Universitat Autònoma de Barcelona

Grau en Física

Treball Final de Grau

ESTUDI DE LA CONVECCIÓ INDUÏDA PER MAGNETOFORESI

Ariadna Tohà Dalmau - 1528459

Juny 2023

Abstract

AAA

CONTENTS

I. MODEL SENSE INTERACCIONS HIDRODINÀMIQUES

Es planteja de dues maneres diferents. La primera consisteix en aplicar les diferents forces sobre cada partícula, observant-ne el moviment. La segona, que serà la que farà de base pel model amb interaccions hidrodinàmiques, estudia les variacions en la concentració a cada punt de la cubeta en aplicar-hi el camp magnètic. En ambdós casos, a part de negligir les interaccions hidrodinàmiques, es suposa que les partícules no interaccionen entre elles i s'aproxima la forma de cada una a una esfera.

A. Model per nanopartìcules

Es treballa amb una cubeta de dimensions 1x1x3 cm^3, on hi ha N partícules repartides uniformement per l'espai. Sobre cada partícula actuen 3 forces: la magnètica, la gravitatòria i la viscosa.

- **Força magnètica:** Força deguda a l'acció que fa el camp magnètic generat per l'imant sobre les nanopartìcules. Aquesta depèn de la magnetització de les partícules, que es defineix com magnetització per unitat de massa ($M_m = 42.79 \mathrm{A/m^2kg}$) i per tant també depèn de la massa de cada partícula ($m_p \simeq 5 \cdot 10^{-20}$kg) i del camp magnètic aplicat, que variarà en funció de les característiques de l'imant.

$$\vec{F}_{mag} = m_p \cdot \vec{M}_m \cdot \nabla B \tag{1}$$

  Per definir la força magnètica s'utilitza l'expressió de B per un imant, on s'asumeix que el camp magnètic en l'epai només depèn de la coordenada y:

$$B = \frac{B_r}{2}\left(\frac{y+h}{\sqrt{(y+h)^2+r^2}} - \frac{y}{\sqrt{y^2+r^2}}\right), \tag{2}$$

  on $B_r = 1.45$T és TAL, $h = 1.5$cm és l'alçada de l'imant i $r = 0.7$cm el radi d'aquest. A partir d'aquesta fòrmula es troba la següent expressió pel gradient de camp magnètic:

$$\nabla B = \frac{B_r \cdot r^2}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{((y+h)^2+r^2)^3}} - \frac{1}{\sqrt{(y^2+r^2)^3}}\right)\vec{e}_y. \tag{3}$$

- **Força gravitatòria:** Força deguda a l'acció de la gravetat, es defineix com:

$$\vec{F}_g = m_p \cdot \vec{g}. \tag{4}$$

- **Força viscosa:** Força causada per la viscositat del líquid, aquesta s'oposa al moviment de les partícules.

$$\vec{F}_d = -6\pi\eta d_h \vec{v}, \tag{5}$$

  on $\eta = 9 \cdot 10^{-4}$Kg/m·s és la viscositat del fluid i $d_h = 30$nm el diametre hidrodinàmic de les nanopartícules.

Aplicant les forces definides a la segona llei de Newton es troba

$$m_p \cdot \frac{d\vec{v}}{dt} = m_p \cdot \vec{M}_m \cdot \nabla B - 6\pi\eta d_h \vec{v} + m_p \cdot \vec{g} \tag{6}$$

S'asumeix que la velocitat és constant i que la força gravitatòria és menyspreable respecte les altres. Amb aquestes assumpcions es defineix la velocitat de cada nanopartícula:

$$\vec{v} = \frac{m_p \cdot \vec{M}_m \cdot \nabla B}{6\pi\eta d_h}. \tag{7}$$

La velocitat trobada depén de $\nabla\vec{B}$, que depèn de la distància a la que es troba cada MNP respecte l'imant (y).

S'efectua el model mitjançant python i s'observa com es desplacen les partícules per la cubeta per un temps determinat.

B. Model per concentracions

Les forces amb que es treballa són les definides a l'apartat anterior. El que canvia és la forma de treballar amb aquestes, definint una concentració inicialment uniforme en tot l'espai i veient com varia aquesta en cada punt a causa de les forces externes.

Per fer-ho es parteix de l'equació de continuitat

$$\frac{dc}{dt} + \nabla\vec{j} = 0, \tag{8}$$

definint el flux $\vec{j}$ com la suma del flux difusiu, degut al moviment brownià dels col·loides, i del flux advectiu, generat pel moviment del fluid. Aquests fluxes es defineixen com:

$$\vec{j}_{dif} = -D\nabla c, \tag{9}$$

$$\vec{j}_{adv} = \vec{u}c, \tag{10}$$

on $\vec{u}$ és la velocitat del fluid, que al no tenir en compte les interaccions hidrodinàmiques es considera nul·la, i D el coeficient de difusió, definit com

$$D = \frac{k_B T}{6\pi\eta R_h}, \tag{11}$$

amb $R_h \simeq 15$nm el radi hidrodinàmic de les MNP. Tenint en compte que $\vec{u} = 0$ es defineix el flux total com:

$$\vec{j} = -D\nabla c. \tag{12}$$

A partir de les equacions 8 i 12 es troba

$$\frac{dc}{dt} = \nabla(D\nabla c), \tag{13}$$

que descriu la variació de concentració a cada punt de la cubeta en funció del temps, és a dir, la velocitat de variació de la concentració. Aquesta serà compatible amb l'equació 7, però en comptes de treballar amb la massa de les MNP es defineix a partir del volum, de la densitat ($\rho_{magnetita} = 5180\text{kg/m}^3$) i de la concentració, que inicialment es fixa com a $c_0 = 0.034\mu$M.

Les condicions inicials imposades determinen que la distribució de partícules en l'espai és uniforme i, pel que fa a les condicions de contorn, s'imposa que les partícules s'acumulen a la base de la cubeta. També es podria plantejar com un fluxe, és a dir, que en arribar a la base les partícules fosin recollides.

II. MODEL AMB INTERACCIONS HIDRODINÀMIQUES

Un cop estudiat el comportament de les partícules sense interaccions hidrodinàmiques s'afegeixen aquestes per estudiar-ne el comportament real i observar el fenómen d'interès per aquest treball; la convecció que té lloc en el procés de magnetofòresis.

Es defineix el moviment del fluid a partir de l'equació de Navier-Stokes

$$\frac{d\vec{u}}{dt} + (\vec{u} \cdot \nabla)\vec{u} = \frac{-1}{\rho}\Delta P + \eta\nabla^2\vec{u} + \frac{1}{3}\eta\Delta(\Delta \cdot \vec{u}) + \vec{f}_{ext}, \tag{14}$$

on $\vec{u}$ és la velocitat del fluid. En aquesta equació es tenen en compte les diferents forces a les que està sotmés cada element de volum del fluid. Aquestes corresponen al gradient de presions, a la viscositat del fluid i a les forces externes, que seràn les plantejades a l'apartat anterior tenint en compte que la viscositat s'inclou dins d'aquesta equació. Es defineix la força externa per unitat de volum com

$$\vec{f}_{ext} = \vec{f}_g + \vec{f}_{mag} \simeq \vec{f}_{mag} = c(\vec{M}_m \cdot \nabla)B. \tag{15}$$

Tenint en compte que es tracta d'un fluid incompresible, i que per tant

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0, \tag{16}$$

l'equació 14 es pot expressar com:

$$\frac{d\vec{u}}{dt} + (\vec{u} \cdot \nabla)\vec{u} = \frac{-1}{\rho}\Delta P + \eta\nabla^2\vec{u} + c(\vec{M}_m \cdot \nabla)B. \tag{17}$$

En aquest model també es té en compte l'equació 8 i, com en aquest cas $\vec{u} \neq 0$ i el fluid és incompresible, es defineix com:

$$\frac{dc}{dt} = \nabla(D\nabla c) - \vec{u} \cdot \nabla c, \tag{18}$$

que determina la velocitat a la que disminueix la concentració de MNP.

L'evolució temporal del sistema es pot modelitzar utilitzant les equacions 17 i 18, però per fer-ho és necessari determinar les condicions inicials i de contorn.

Inicialment es treballa amb la mateixa concentració en tota la cubeta i es defineix la pressió a cada punt d'aquesta com a

$$P(y) = P_{atm} + g\rho(h - y), \tag{19}$$

on h és l'alçada de la cubeta.

Pel que fa a les condicions de contorn, s'imposa que a totes les parets la velocitat del fluid és nul·la, excepte a la base, on es recullen les MNP i per tant hi ha un fluxe de sortida corresponent a

$$J = \frac{1}{S}\frac{dN}{dt}, \qquad on \;\; N(t) = c(t) \cdot V, \tag{20}$$

i V és el volum total. Experimentalment es troba que

$$c(t) = c_0^{-Kt}, \tag{21}$$

on K és una constant.