

CALCULO DE LAS FUERZAS DE ARRASTRE Y DE CASIMIR-LIFSHITZ-VAN DER WAALS APLICADOS AL ESTUDIO DE LA INTERACCION DE PARTICULAS SOLIDAS CON INTERFASES DE SOLIDIFICACION

C. E. Schvezov*

Facultad de Ciencias Exactas, Químicas y Naturales. UNaM. Azara 1552. Posadas. Argentina
e-mail: schvezov@fceqyn.unam.edu.ar

En este trabajo se presentan los resultados del cálculo de las fuerzas de arrastre y de Casimir-Lifshitz-Van der Waals aplicados al estudio de la interacción de partículas sólidas con una interfase de solidificación. Se calcularon dichas fuerzas para diversas configuraciones geométricas para el sistema partícula-interfase que incluyen; interfase y partícula planas, interfase plana y partícula esférica e interfase cóncava y partícula esférica. Las fuerzas serán aplicadas en modelos dinámicos que describan la interacción.

Results are presented of the calculations of the drag and Lifshitz-Van der Waals forces applied to the study of the interaction of solid particles with an advancing solid liquid interface during solidification. The forces are calculated for different particle and interface geometries including; flat particle and flat interface, spherical particle and flat interface and spherical particle and concave interface. These forces will be employed in a dynamic model for the interaction.

I. INTRODUCCIÓN

La interacción de partículas con una interfase durante la solidificación ha sido motivo de diversos estudios desde los puntos de vista experimental y teórico¹. Las teorías para determinar la velocidad crítica de solidificación para el "pushing" de partículas emplean dos fuerzas principales y opuestas que deben estar en equilibrio durante el proceso estacionario. Estas fuerzas son, las de arrastre viscoso y la de repulsión de Casimir-Lifshitz-Van der Waals. Con el objeto de desarrollar un modelo dinámico para determinar las condiciones de solidificación que derivan en tal estado estacionario, se calculan dichas fuerzas para tres configuraciones morfológicas del proceso de captura/repulsión; partícula e interfase planas, partícula esférica e interfase plana y partícula e interfase esféricas. Los resultados se analizan en función de las consecuencias en el modelo a desarrollar.

II. MÉTODOS DE CALCULO

Ecuaciones Básicas para el Arrastre Viscoso

La configuración de interés consiste de una partícula moviéndose delante, y con el frente de solidificación como se muestra en la Figura 1. La velocidad de la partícula es v_p y la del frente es v_f . La velocidad relativa es $v_r = v_p - v_f$. Como resultado de la solidificación existe un flujo de líquido con un velocidad igual a la de solidificación y por consiguiente, se ejerce una fuerza de arrastre sobre la partícula que depende entre otros de; la velocidad

relativa entre partícula y fluido v , viscosidad η , tamaño de partícula R . Para una partícula en un medio infinito esta fuerza está dada por la Ley de Stokes. Cuando el fluido tiene restricciones como en este caso en el que se encuentra una superficie cercana a la partícula que actúa como sumidero, la fuerza viscosa se modifica. Para una partícula esférica y un frente plano que actúa como sumidero la fuerza es² $F_D = 6\pi\eta R^2 v / h_0$. Esta ecuación se obtiene utilizando el tratamiento general a partir de las ecuaciones de Navier-Stokes³ las cuales, suponiendo que las fuerzas viscosa predominan sobre las inerciales, se escriben de la siguiente forma:

$$\frac{\partial p}{\partial r} = \eta \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \quad (1)$$

sujeta a las siguientes condiciones de contorno:

en la interface sólido líquido, $z=0$, $v_r=0$ y $v_z = v_f \approx v$;
en la superficie de la partícula, $z=h(r)$, $v_r=0$ y $v_z = v_p \approx v$.

La ecuación de continuidad queda como:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial(rv_r)}{\partial r} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0 \quad (2)$$

Luego de la integración de las ecuaciones (1) y (2) se obtiene $p(r)$, con ella la fuerza de arrastre se puede calcular como:

$$F_D = 12\pi\eta v \int_0^R \left(r \int_r^R \frac{\rho d\rho}{h^3(\rho)} \right) dr \quad (3)$$

La separación entre partícula e interfase h posee diferentes formas analíticas dependiendo del tipo de configuración geométrica que se trate, los casos que consideraremos y las respectivas ecuaciones para h que

* Autor a quién debe dirigirse la correspondencia.

se obtienen mediante consideraciones de tipo geométricas son:

a) partícula semiesférica e interfase plana, $h=h_0=$ constante, 1,

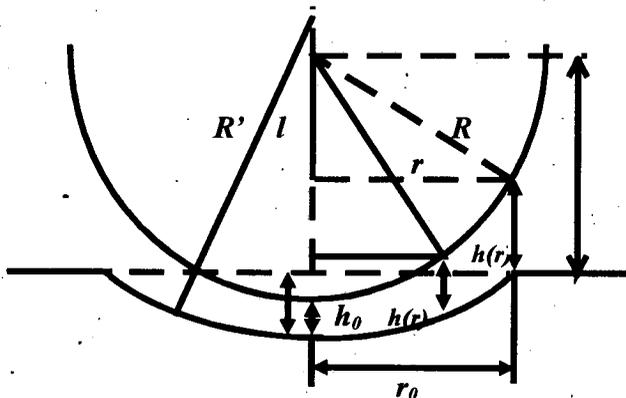


Figura 1. Esquema de la morfología y las variables consideradas en la interacción entre una partícula y la interfase de solidificación

b) partícula esférica e interfase plana,

$$h(r) = h_0 + R\left(1 - \sqrt{1 - \frac{r^2}{R^2}}\right) \quad (4)$$

c) partícula e interfase esféricas,

para $0 \leq r \leq r_0$

$$h(r) = h_0 - R' + \sqrt{R'^2 - r^2} + R - \sqrt{R^2 - r^2} \quad (5a)$$

para $r_0 \leq r \leq R$

$$h(r) = h_0 - R' + \sqrt{R'^2 - r_0^2} + R - \sqrt{R^2 - r^2} \quad (5b)$$

en las que R' es el radio de curvatura de la interfase y α varía entre 0 y 1.

La integración de la ecuación (3) para los tres casos considerados resulta en las siguientes expresiones analíticas:

a)
$$F_D = \frac{3}{2} \pi \eta \nu \frac{R^4}{h_0^3} \quad (6)$$

b)
$$F_D \cong 12 \pi \eta \nu R \left(-\frac{1}{2} + \frac{3}{2} \ln h_0' + \frac{1}{2 h_0'} \right)$$

donde $h_0' = \frac{h_0}{R} \quad (7)$

Cuando la separación entre partícula e interfase es mucho menor que el radio de la partícula la ecuación (7) coincide con la expresión empleada usualmente en la literatura.

c) En este caso la integración de (3) se realiza en dos partes; una correspondiente a la parte cóncava de la

interfase y otra para la parte plana de la interfase. Se obtienen así expresiones para la fuerza de arrastre sujeta a las siguientes condiciones límites y/o aproximaciones de interés:

i) $R' = R$, la contribución de la parte plana de la interfase resulta despreciable respecto de la zona $r \leq r_0$, resultando

$$F_D = \frac{3}{2} \pi \eta \nu \frac{r_0^4}{h_0^3} \quad (8)$$

Esta contribución es mayor que la contribución de la parte plana siempre que $r_0 > \sqrt{16 h_0 R}$. Esto es, para valores mucho mayores que este se aplica la aproximación de interfase curva (8) y en el otro extremo se aplica la aproximación de interfase plana (7).

ii) $R' \approx R$ Para esta situación las expresiones derivadas en la literatura divergen a infinito sin embargo se ha visto que el valor límite máximo está dado por la ecuación (8). Esta divergencia es debida a la aproximación cuadrática empleada en otros trabajos³ para $h(r)$ en la integración. En lugar de esto, se elige aquí realizar la siguiente aproximación:

$$\begin{aligned} \frac{1}{h^3} &= \frac{1}{h_0 + \beta} \cong \frac{1}{h_0^3} - \frac{3}{h_0^4} \beta + \frac{12}{h_0^5} \beta^2 - \frac{60}{h_0^6} \beta^3 \\ &\cong \frac{1}{h_0^3} - \frac{3}{h_0^4} \beta \end{aligned} \quad (9)$$

donde $\beta = R(1 - \frac{1}{\alpha}) + \sqrt{R'^2 - r^2} - \sqrt{R^2 - r^2}$

La componente de arrastre en la zona curva de la interfase resulta ser entonces:

$$F_D = 12 \pi \eta \nu \left\{ \begin{aligned} &\frac{1}{8} \frac{r_0^4}{h_0^3} + \frac{3}{8} \frac{r_0^4}{h_0^4} R \frac{1-\alpha}{\alpha} + \\ &\frac{1}{2} \frac{r_0^2}{h_0^4} \left[(R'^2 - r_0^2)^{3/2} - (R^2 - r_0^2)^{3/2} \right] + \\ &\frac{1}{5} \frac{r_0^2}{h_0^4} \left[R^5 - R'^5 + (R'^2 - r_0^2)^{5/2} - \right] \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

Es de notar que tomando el primer término solamente se deriva la ecuación (8) que corresponde a $\alpha=1$. Además, la mayor contribución está dada por el término correspondiente a la potencia quinta de los radios, esta contribución es negativa como es de esperar físicamente. desarrollar.

Ecuaciones Básicas para la Fuerzas de Van der Waals

Las fuerzas de Casimir-Lifshitz-Van der Waals forman parte del tipo de interacción más general de Casimir y aplicables a la interacción entre sólidos separados por vacío o un fluido. Esta fuerza por unidad de área (presión) toma la forma particular dada por⁴:

$$\frac{F_{LVW}}{A} = \frac{h\omega}{8\pi^2 h^3} = \frac{B_3}{h^3} \quad (11)$$

donde ω es una frecuencia característica del espectro de absorción de los tres medios, h es la constante de Planck y h es la separación entre los medios sólidos. Esta fuerza es en general atractiva incluyendo metales en los cuales es siempre atractiva. Cuando la constante característica cambia de signo esta fuerza resulta repulsiva. La repulsión de partículas durante la solidificación por la interfase es atribuida a este tipo de interacción. En la mayoría de los casos donde se percibe esta interacción repulsiva que contrarreste el arrastre viscoso es posible establecer un estado estacionario de *pushing*. A continuación se calcula la fuerza dada por (11) calculando la siguiente integral para las tres situaciones geométricas planteadas arriba:

$$F_{LVW} = 2\pi B_3 \left\{ \int_0^{r_0} \frac{rdr}{h^3(r)} + \int_{r_0}^R \frac{rdr}{h^3(r)} \right\} = 2\pi B_3 \{I_1 + I_2\} \quad (12)$$

donde h esta dada en cada caso por a) h_0 , b) Ecuación (4) y c) Ecuaciones (5a) y (5b) para cada integral.

$$a) \quad F_{LVW} = \pi B_3 \frac{R^2}{h_0^3} \quad (13)$$

$$b) \quad F_{LVW} = \pi B_3 \frac{R}{h_0^2} \quad (14)$$

c)
i)

$$F_{LVW} \cong 2\pi B_3 \left\{ \frac{1}{2A} - \frac{A^3 - (R^2 - r_0^2)(3A + 2\sqrt{R^2 - r_0^2})}{2(A^3 - R^2 + r_0^2)^2} \right\}$$

$$\text{donde } A = h_0 + \sqrt{R^2 - r_0^2} \quad (15)$$

ii)

$$F_{LVW} \cong \frac{2\pi B_3}{h_0^3} \left\{ \frac{r_0^2}{2} + \frac{3r_0^2}{2h_0} R \frac{1-\alpha}{\alpha} + \frac{1}{h_0} \left[(R^2 - r_0^2)^{3/2} - (R^2 - r_0^2)^{3/2} - R^3 \frac{1-\alpha^3}{\alpha^3} \right] \right\} \quad (16)$$

Ambas resultan ser la componente mayor de la fuerza que corresponde y se desarrolla en la zona de contacto con la parte curva de la interfase.

III. DISCUSION DE RESULTADOS

Se han calculado las fuerzas más importantes resultantes de la interacción de una partícula con una interfase de solidificación para tres morfologías típicas. Estas fuerzas serán entrada a un modelo dinámico de la interacción; a las mismas se agregarán otras interacciones de menor magnitud como ser el efecto de la tensión superficial debido a la curvatura de la interfase. Cuando sea posible un estado estacionario. estas dos fuerzas principales deberán estar equilibradas. Una condición simple que se puede aplicar en forma preliminar para determinar cuando este equilibrio es posible, se basa en una consideración del límite mínimo para la separación h y para la cual la materia condensada entre partícula e interfase pueda ser considerada un fluido. Equilibrios conseguidos para distancias menores a esta determinarán la captura de la partícula. Se puede establecer así un método para determinar la relación entre la velocidad de solidificación crítica con los parámetros intervinientes en la interacción. Con este objeto, en el estado estacionario se deberán igualar para cada situación las fuerzas dadas por las ecuaciones (6) con la (13), la (7) con la (14) y la (8) con la (15) y la (10) con la (16). Evidentemente de estas dos últimas igualdades resultan relaciones complejas de analizar. Sin embargo y a los efectos de mostrar un resultado significativo; utilizando las dos primeras igualdades se puede observar que las velocidades críticas resultan ser:

$$a) \quad v_c = \frac{2 B_3}{3 \eta R^2} \quad (17)$$

y

$$b) \quad v_c = \frac{1 B_3}{6 \eta h_0 c R} \quad (18)$$

En el caso de partícula plana (a) la velocidad crítica disminuye con el cuadrado del radio mientras que para una partícula esférica la relación es lineal. Este es un resultado significativo ya que muestra que la velocidad

crítica depende de la morfología del sistema y debe ser considerado como una variable experimental importante cuando se determinan las velocidades críticas. Además que a medida que se incrementa el tamaño resultará más fácil atrapar una partícula plana que una esférica.

IV. CONCLUSIONES

Se han calculado las fuerzas de arrastre viscoso y de Casimir-Lifshitz-Van der Waals aplicables al estudio de la interacción de partículas con una interfase de solidificación para tres morfologías diferentes.

Las expresiones analíticas de dichas fuerzas muestran una fuerte dependencia con la morfología que se trate. Este resultado tiene implicancias importantes en el estudio de la interacción.

Estos resultados serán utilizados en la elaboración de un modelo dinámico de la interacción.

Referencias

1. Schvezov, C. Anales de Química Argentina, **84**, 527-530 (1996).
2. Uhlman, D.R.; Chalmers, B. and Jackson, K. J. of Applied Phys., **35**, 2986-2993 (1964).
3. Casses, P y Azouni-Aidi, M.A. Advances in Colloid and Interface Science, **50** 103-120 (1994).
4. Dzyaloshinskii, E.; Lifshitz, E.M. y Pitaevskii, L.P. Soviet Physics. USPEKHI, **73**, 153-176 (1961).