

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS-UFAL  
INSTITUTO DE FÍSICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

**ALISSON DA SILVA MARQUES**

**ESTUDO NUMÉRICO DE DISPOSITIVO ACUSTOFLUÍDICO COM  
MICROCAVIDADE CILÍNDRICA**

**MACEIÓ  
2021**

Alisson da Silva Marques

Estudo Numérico de Dispositivo Acustofluídico com Microcavidade Cilíndrica

Dissertação apresentada como requisito parcial  
para obtenção do grau de Mestre em Física da  
Universidade Federal de Alagoas - UFAL .

Orientador: Prof. Dr. Glauber José Ferreira  
Tomaz da Silva

Coorientador: Prof. Dr. José Pereira Leão Neto

Maceió

2021

**Catálogo na Fonte**  
**Universidade Federal de Alagoas**  
**Biblioteca Central**  
**Divisão de Tratamento Técnico**

Bibliotecário: Marcelino de Carvalho Freitas Neto – CRB-4 – 1767

M357e Marques, Alisson da Silva.

Estudo numérico de dispositivo acustofluídico com microcavidade cilíndrico /  
Alisson da Silva Marques. – 2021.  
57 f. : il. color.

Orientador: Glauber José Ferreira Tomaz da Silva.

Co-orientador: José Pereira Leão Neto.

Dissertação (Mestrado em Física) – Universidade Federal de Alagoas. Instituto de Física. Maceió, 2021.

Bibliografia: f. 55-57.

1. Microfluídica. 2. Acustofluídica. 3. Dispositivo acustofluídico. I. Título.

CDU: 531.742

Dedico este trabalho aos meus pais, Ailton e  
Madalena, e em memória a minha avó Maria  
Inês e a minha Tia Luciana Matos.

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço primeiramente a Deus, por ter me concedido forças para continuar nessa caminhada acadêmica, apesar de todas as dificuldades. Agradeço também a minha família por todo apoio, principalmente aos meus pais, Ailton e Madalena, por terem entendido a mudança de cidade, além do suporte quando mais precisei, agradeço também a minha querida irmã Mayse por acreditar tanto em mim e nunca me deixar desanimar.

Agradeço a minha namorada e companheira Daiane Medeiros, por sempre estar comigo em todos os momentos bons e ruins. Por me ajudar na correção desse trabalho, sem ela esse trabalho não seria escrito, não desta maneira. Por acreditar e me incentivar a concluir mais um ciclo importante em minha vida.

Também não poderia deixar de agradecer aos meus companheiros de laboratório, Everton e Giclenio, por todas as noites que ficamos no laboratório fazendo experimentos e simulações, além dos conselhos e acolhimento no começo do mestrado. Agradeço também ao meu parceiro Gutenberg, pela companhia nos perrengues das disciplinas durante o período difícil do EAD. A todos do Grupo de Acústica Física (GAF) o grupo o qual faço parte com muito orgulho.

Por fim, agradeço ao meu orientador professor Glauber T. Silva, pela disponibilidade, por todos os conhecimentos passados e experiências vividas, ao meu coorientador professor J. P. Leão Neto, por sempre me ajudar quando precisava mesmo estando a distância. Sem esquecer do professor Henrique Lopes, meu antigo orientador, pois sem ele não estaria nessa área podendo concluir mais essa etapa.

E a CAPES pelo apoio financeiro durante o período do mestrado.

O fator decisivo para vencer o maior obstáculo é, invariavelmente, ultrapassar o obstáculo anterior.

Henry Ford

## RESUMO

A manipulação com precisão de micropartículas em dispositivos microfluídicos, tem sido alvo de inúmeras pesquisas, devido a sua aplicação em áreas como medicina e biologia. Acustofluídica, área que faz uso do ultrassom como força externa para essa manipulação, tem ganhado destaque nas últimas décadas por ser uma técnica compacta, sem contato e versátil, além da sua fácil implementação em dispositivos. Esse trabalho tem como objetivo principal o estudo numérico de um dispositivo de acustofluídica formado por uma microcavidade cilíndrica, fabricado em polímero (resina), por impressão 3D, as vantagens desse dispositivo são o seu baixo custo de produção comparado a chips feitos de silício e sua portabilidade. Nosso modelo é composto por uma cavidade cilíndrica preenchida por água, onde é promovida a levitação e o aprisionamento, a estrutura da cavidade modelada em resina, com exceção do topo da cavidade, que é vedado por uma lâmina de vidro, além de uma cerâmica piezoelétrica acoplada abaixo da base de resina a qual fornece excitação acústica ao dispositivo. Modelamos o dispositivo utilizando o método de elementos finitos por meio do software comercial COMSOL Multiphysics<sup>®</sup>, no qual imputamos as condições de contorno para a solução das equações diferenciais da dinâmica de fluidos, sólido viscoelástico e material piezoelétrico. Exploramos a simetria do problema usando o módulo *2D Axis simétrico* do software. Posteriormente aos estudos paramétricos, obtivemos a melhor configuração de dispositivo, para uma cavidade com densidade de energia acústica de  $1000 \text{ J m}^{-3}$ , com plano de levitação na altura de  $130 \mu\text{m}$  em relação a base da cavidade.

**Palavras-chave:** Acustofluídica. Microfluídica. Dispositivo.

## ABSTRACT

The precision manipulation of microparticles in microfluidic devices has been the subject of numerous researches, due to its application in areas such as medicine and biology. Acoustofluidics, an area that uses ultrasound as an external force for this manipulation, has gained strength in recent decades for being a compact, non-contact and versatile technique, in addition to its easy implementation in devices. This work has as main objective the numerical study of an acoustofluidics device formed by a cylindrical microcavity, manufactured in polymer (resin), by 3D printing, the advantages of this device are its low production cost compared to chips made of silicon and its portability. Our model consists of a cylindrical cavity filled with water, where levitation and trapping is promoted, the cavity structure modeled in resin, with the exception of the cavity top, which is sealed by a glass slide, in addition to a piezoelectric ceramic coupled below the resin base which provides acoustic excitation of the device. We model the device using the finite element method using the commercial software COMSOL Multiphysics®, in which we impute the boundary conditions for the solution of the differential equations of fluid dynamics, viscoelastic solid and piezoelectric material. We explore the symmetry of the problem using the software's 2D Axisymmetric module. After the parametric studies, we obtained the best device configuration, for a cavity with an acoustic energy density of  $1000 \text{ J m}^{-3}$ , with a levitation plane at the height of  $130 \mu\text{m}$  in relation to the base of the cavity.

**Keywords:** Acoustofluidics. Microfluidic. Device.

# LISTA DE FIGURAS

|           |                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |    |
|-----------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Figura 1  | – A figura ilustra uma sonda medindo uma determinada quantidade física em fluido, para região microscópica (cinza claro) observa grandes flutuações moleculares, para região mesoscópica (branco) sem flutuações a região mais estável, e na região macroscópica pequenas flutuações devido a forças externas | 17 |
| Figura 2  | – Elemento de fluido $V_0$ ocupado por partículas de massa $m_i$ e velocidade $v_i$ .                                                                                                                                                                                                                         | 19 |
| Figura 3  | – Ilustração da deformação de meio contínuo de volume $V_0$ e superfície $S_0$ para o volume $V'_0$ e superfície $S'_0$                                                                                                                                                                                       | 27 |
| Figura 4  | – Vetor tração $\mathbf{q}$ de meio contínuo de volume $V_0$ e superfície $S_0$ em virtude das forças externas $f_i (i = 1, 2, 3)$                                                                                                                                                                            | 27 |
| Figura 5  | – Ilustração de um transdutor ultrassônico característico.                                                                                                                                                                                                                                                    | 33 |
| Figura 6  | – Exemplo de discretização 3D no COMSOL Multiphysics®                                                                                                                                                                                                                                                         | 39 |
| Figura 7  | – Discretização 2D                                                                                                                                                                                                                                                                                            | 39 |
| Figura 8  | – Geometria e distribuição de materiais do dispositivo, sendo $z$ o eixo de simetria utilizado no COMSOL para obter os resultados em 3 dimensões. Com $r_c$ sendo o raio da cavidade, $h_b$ altura da base da cavidade e $h_d$ altura da base do dispositivo.                                                 | 41 |
| Figura 9  | – Distribuição das físicas e as principais equações do modelo, seguindo o que foi apresentado no capítulo 2                                                                                                                                                                                                   | 43 |
| Figura 10 | – Discretização da malha no modelo, onde o zoom foi utilizado para a melhor visualização da geometria dos elementos.                                                                                                                                                                                          | 44 |
| Figura 11 | – Gráfico de convergência do modelo, onde a linha tracejada se refere ao valor usado na simulação.                                                                                                                                                                                                            | 45 |
| Figura 12 | – Densidade de energia acústica média $E_{ac}$ , para diferentes raios da cavidade $r_c$ , a linha tracejada vermelha marca o melhor resultado, para um range de frequência 3.2-3.6 MHz.                                                                                                                      | 47 |
| Figura 13 | – Densidade de energia acústica média $E_{ac}$ , comparado com diferentes alturas da base da cavidade $h_b$ , a linha pontilhada vermelha marca o melhor resultado, em um range de frequência 3.2-3.6 MHz.                                                                                                    | 48 |
| Figura 14 | – Densidade de energia acústica média $E_{ac}$ , para diferentes alturas da base do dispositivo $h_d$ , a linha pontilhada vermelha marca o melhor resultado, para um range de frequência 3.2-3.6 MHz.                                                                                                        | 48 |
| Figura 15 | – Densidade de energia acústica média $E_{ac}$ , para diferentes frequências, sendo 3.4 MHz a frequência de ressonância da cavidade                                                                                                                                                                           | 49 |
| Figura 16 | – Densidade de energia acústica média $E_{ac}$ versus a tensão aplicada                                                                                                                                                                                                                                       | 50 |
| Figura 17 | – Potencial da força de radiação $U_{rad}$ no plano $zx$ da cavidade, onde a região de mínimo potencial (azul escuro) caracteriza a região de aprisionamento, a linha pontilhada demarca essa região.                                                                                                         | 51 |

|                                                                                                                                                                                                                       |    |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Figura 18 – Pressão total ( $p_t$ ) (curva cinza) e potencial da força de radiação $U_{\text{rad}}$ (curva azul) ao longo do eixo $z$ para $x = 0$ , a linha trastejada marca a altura do plano de levitação. . . . . | 51 |
| Figura 19 – Potencial da força de radiação $U_{\text{rad}}$ , no plano $xy$ para $z = 0.13$ mm, as setas brancas apontam o sentido da força de radiação $F_{\text{rad}}$ na direção radial. . . .                     | 52 |
| Figura 20 – Força de radiação $F_{\text{rad}}$ ao longo do eixo $z$ , onde as setas azuis representam o sentido da força . . . . .                                                                                    | 53 |

# LISTA DE TABELAS

|                                                                           |    |
|---------------------------------------------------------------------------|----|
| Tabela 1 – Relações constitutivas para materiais piezoelétricos . . . . . | 33 |
| Tabela 2 – Parâmetros utilizado na simulação computacional . . . . .      | 42 |

## SUMÁRIO

|          |                                                              |           |
|----------|--------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1</b> | <b>INTRODUÇÃO . . . . .</b>                                  | <b>14</b> |
| <b>2</b> | <b>ACUSTOFLUÍDICA . . . . .</b>                              | <b>16</b> |
| 2.1      | Microfluídica . . . . .                                      | 16        |
| 2.1.1    | <i>Lab-on-a-chip (LOC)</i> . . . . .                         | 16        |
| 2.1.2    | Lei de Escala . . . . .                                      | 16        |
| 2.1.3    | A hipótese da Continuidade e as Partículas Fluidas . . . . . | 17        |
| 2.2      | Equações de conservação para um fluido . . . . .             | 18        |
| 2.2.1    | Equação de Conservação da Massa . . . . .                    | 18        |
| 2.2.2    | Equação de Conservação do Momento . . . . .                  | 20        |
| 2.2.3    | Equação da Conservação da Energia . . . . .                  | 22        |
| 2.3      | Teoria de Perturbação de primeira ordem . . . . .            | 23        |
| 2.4      | Conservação para sólidos . . . . .                           | 25        |
| 2.4.1    | Deformação . . . . .                                         | 25        |
| 2.4.2    | Tensão . . . . .                                             | 26        |
| 2.4.3    | Conservação da Massa . . . . .                               | 28        |
| 2.4.4    | Conservação do Momento . . . . .                             | 29        |
| 2.4.5    | Conservação da Energia . . . . .                             | 29        |
| 2.5      | Modelos constitutivos elásticos . . . . .                    | 30        |
| 2.5.1    | Modelo Elástico Linear . . . . .                             | 31        |
| 2.6      | Piezoelectricidade . . . . .                                 | 32        |
| 2.6.1    | Equações Básicas . . . . .                                   | 32        |
| <b>3</b> | <b>FORÇA DE RADIAÇÃO ACÚSTICA . . . . .</b>                  | <b>35</b> |
| 3.1      | Espalhamento Rayleigh . . . . .                              | 35        |
| 3.2      | Força de radiação acústica no regime de Rayleigh . . . . .   | 37        |
| <b>4</b> | <b>MODELO NUMÉRICO . . . . .</b>                             | <b>39</b> |
| 4.1      | Descrição do modelo numérico . . . . .                       | 40        |
| 4.1.1    | Parâmetros e Geometria . . . . .                             | 40        |
| 4.1.2    | Distribuição das físicas no modelo . . . . .                 | 42        |
| 4.2      | Convergência de malha e carga computacional . . . . .        | 44        |
| 4.2.1    | Carga computacional . . . . .                                | 45        |
| <b>5</b> | <b>RESULTADOS E DISCUSSÕES . . . . .</b>                     | <b>46</b> |
| 5.1      | Estudos Paramétricos . . . . .                               | 46        |

|          |                                                            |           |
|----------|------------------------------------------------------------|-----------|
| 5.2      | Estudo da Melhor Configuração para o Dispositivo . . . . . | 49        |
| 5.2.1    | Potencial e Força de Radiação Acústica . . . . .           | 50        |
| <b>6</b> | <b>CONCLUSÃO . . . . .</b>                                 | <b>54</b> |
|          | <b>REFERÊNCIAS . . . . .</b>                               | <b>55</b> |

# 1 INTRODUÇÃO

Conseguir manipular micropartículas, com precisão, em micro-canais ou em micro-cavidades, é de suma importância para aplicações em biologia, química, engenharia e física no âmbito da microfluídica. Principalmente para a manipulação de células (GUO et al., 2015), apesar de diversas técnicas terem sido desenvolvidas, nesses últimos anos, para a manipulação de células e micro-organismos, a maioria dessas técnicas possui alguma limitação, incluindo as que usam tecnologias, tais como: ópticas, elétricas, magnéticas entre outras.

A primeira limitação é que, para a maioria dessas técnicas, é necessário que alguma modificação seja feita nas células, por exemplo, para montagem magnética é preciso que as células sejam marcadas com sondas magnéticas. Para manipulação por forças elétricas, habitualmente se utiliza de um meio especial, não condutor, assim precisando de nutrientes essenciais ou de propriedades biofísicas, podendo afetar o crescimento celular ou a fisiologia (VOLDMAN, 2006). As pinças ópticas trazem uma abordagem sem contato e sem precisar fazer modificações nas células, porém, necessitam de alta potência do laser para fazer a manipulação, assim podendo danificar as células (ZHANG; LIU, 2008). A segunda limitação, é que essas técnicas não conseguem uma boa concordância entre alta precisão e alto rendimento em um único dispositivo, técnicas com alto rendimento como montagem magnéticas, normalmente não conseguem ter uma alta precisão para manipular uma única célula, e técnicas de alta precisão em sua grande maioria precisam de um aparato experimental complexo, para conseguir manipular várias células ao mesmo tempo. Sendo assim, como alternativa para substituir essas técnicas, o uso de ultrassom para manipulação de partículas tem sido bastante investigado nesses últimos anos, pois não apresenta nenhuma das limitações citadas acima, e ainda possui como vantagem, seu baixo custo e a versatilidade na implementação em dispositivos microfluídicos. Essa técnica se resume em envolvermos as partículas em um campo acústico, essas partículas sofrem ação por meio da força de radiação acústica, através da absorção e reflexão, em microfluídica normalmente se usa ondas estacionárias para manipulação. Vários estudos foram apresentados para a manipulação de partícula em campo permanente, desde a construção de micro-canais para gerar esses campos (LENSHOF et al., 2012), até estudos teóricos (WANG; DUAL, 2012) e observações experimentais da força de radiação acústica para aprisionar, mover e separar micro-partículas (YAMAMOTO et al., 2017; SUN et al., 2020).

Estudos numéricos para dispositivos de microfluídica tem se tornado uma boa alternativa para modelos complexos, Nitesh Nama (2015), propôs um estudo totalmente numérico para

manipulação de partículas em um microcanal de PDMS (*poly-dimethylsiloxane*) por meio de ondas de superfície fazendo análise para diferentes tamanhos de partícula. Zhangming Mao (2016), apresentou um trabalho numérico/experimental para manipulação de partículas em microcanais de PDMS e silício, com um modelo bidimensional mostrando uma boa concordância com o experimental. L. Spigarelli (2020), fez um estudo numérico sobre a influência da geometria em dispositivos microfluídicos para barrar os efeitos de streaming acústico, analisando a razão de aspecto de um microcanal retangular, mostrando assim que podemos utilizar os estudos numéricos para otimizar dispositivos. Em um trabalho mais recente William Naundrup Bode (2021), faz uso de modelos numérico em duas e três dimensões para estudar o acoplamento entre o transdutor e o microcanal.

Este trabalho tem como objetivo principal o estudo numérico de dispositivo de acusto-fluídica formado por uma microcavidade cilíndrica para aplicação em microfluídica, fabricado com polímero (Resina) em impressora 3D. O nosso dispositivo além de todas as vantagens citadas acima para dispositivos acústicos, tem o diferencial da sua fabricação por impressão 3D, que é uma técnica de baixo custo, principalmente comparado a dispositivo fabricado em silício (GAROFALO et al., 2017). Nosso modelo é composto por uma cavidade central preenchida por água, em que é promovida a levitação e o aprisionamento das partículas, a estrutura da cavidade é modelada em resina, porém o topo dessa cavidade é vedado por uma lâmina de vidro, e por fim, há uma cerâmica piezoelétrica acoplada abaixo da base da cavidade a qual fornece excitação acústica para o dispositivo, para a modelagem do dispositivo utilizamos o software comercial COMSOL Multiphysics<sup>®</sup>, para desenvolver o modelo numérico desse trabalho, em que o mesmo faz uso do método de elementos finitos.

O trabalho está organizado da seguinte maneira. No capítulo 2 vamos começar com um breve resumo sobre microfluídica e derivar a equação da onda a partir das equações de conservação, descrever o modelo viscoelástico e o fenômeno de piezoeletricidade. No capítulo 3 derivamos a força de radiação acústica no limite de Rayleigh a partir da teoria de espalhamento. No capítulo 4 iremos descrever o modelo numérico, partindo do software, passando por parâmetros e geometria, tipo de estudo, discretização da malha e carga computacional. No capítulo 5, iremos apresentar os resultados e discussões do modelo descrito no capítulo anterior. Por fim, no capítulo 6 teremos as conclusões e perspectivas para trabalhos seguintes.

## 2 ACUSTOFLUÍDICA

### 2.1 MICROFLUÍDICA

A microfluídica se trata do estudo teórico de escoamento de fluidos e suspensões, na escala de submilímetro, sob ação de forças externas. O estudo da microfluídica tem tomado força na última década, com o surgimento do ramo de pesquisa baseado em sistemas *Lab-on-a-chip* (LOC). Esse ramo tem como principal objetivo desenvolver laboratórios inteiros na superfície de um micro-chip feito de silício, na maioria das vezes, ou de alguns outros polímeros (LAURELL; LENSCHOF, 2014).

#### 2.1.1 Lab-on-a-chip (LOC)

Existem inúmeras vantagens em diminuir as configurações de laboratório de uma escala de decímetros para uma escala de 100  $\mu\text{m}$ . A primeira é a redução na quantidade de amostra utilizada, se em um laboratório convencional utiliza cerca de 1 L ou 1 mL de amostra, em um *lab-on-a-chip* esse volume seria apenas de 1  $\mu\text{L}$  ou 1 pL, com esse pequeno volume seria possível análises mais rápidas, mesmo quando há uma pequena amostra disponível. Além disso, os *lab-on-a-chip* trazem a mobilidade como outra vantagem, já que são sistemas portáteis e compactos. Os LOC podem conter dispositivos eletrônicos e mecânicos, visto que, a ideia é realmente conseguir miniaturizar um laboratório completo em um chip.

#### 2.1.2 Lei de Escala

Quando analisamos as propriedades físicas em sistemas microfluídicos, é importante definir uma lei de escala. A lei de escala demonstra a variação de grandezas físicas com o tamanho  $\ell$  de determinado objeto ou sistema, tendo ele outras grandezas que continuam constantes, como tempo, temperatura e pressão. Sendo assim, podemos relacionar as forças volumétricas ( $f^V$ ), como gravidade e inércia, com forças superficiais ( $f^S$ ) como tensão e viscosidade. A lei de escala para essa razão entre essas classes de força é definida como:

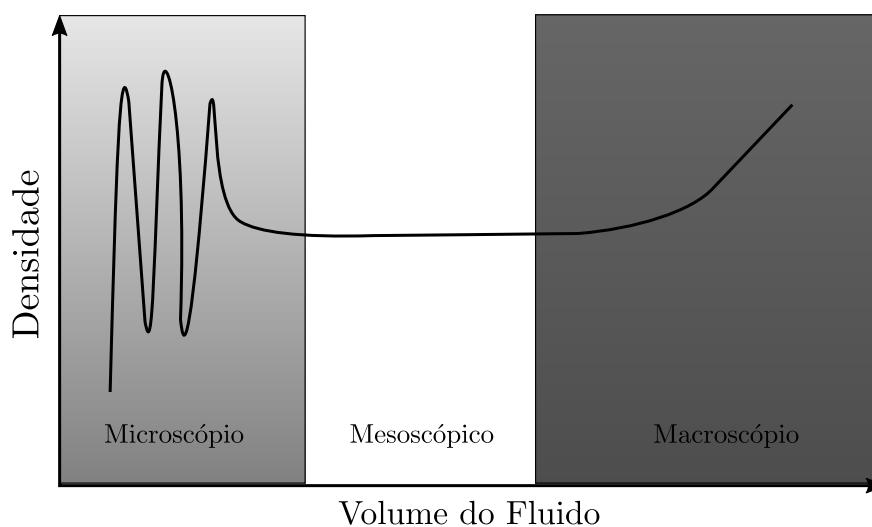
$$\frac{f^S}{f^V} \propto \frac{\ell^2}{\ell^3} = \ell^{-1} \quad (1)$$

Com isso, temos que forças superficiais são dominantes em escala microscópica, diferente do que vemos na vida real, na qual esse papel é das forças volumétricas.

### 2.1.3 A hipótese da Continuidade e as Partículas Fluidas

Apesar de um fluido ser quantizado na escala intermolecular, onde representa-se a distância entre moléculas (que é cerca de 0.3 nm para líquidos e 3 nm para gases), para os estudos em dispositivos LOC os fluidos são considerados contínuos, pois são definidos em uma escala de 10  $\mu\text{m}$  ou mais. Sendo assim, vamos considerar a hipótese da continuidade que afirma que as quantidades físicas macroscópicas do fluido são as mesmas se o fluido fosse completamente contínuo em estrutura ao invés de ser composto por moléculas. Logo, quantidades físicas como massa, momento e energia, associadas a um pequeno volume de fluido, devem ser consideradas como a soma da contribuição em cada molécula no volume. A partir da hipótese da continuidade, surge o conceito de partícula fluida, que se trata de um dos constituintes básicos na teoria dos fluidos, esse conceito, diferentemente da partícula sólida, possui um tamanho finito, mas qual seria o tamanho de uma partícula fluida?

Figura 1 – A figura ilustra uma sonda medindo uma determinada quantidade física em fluido, para região microscópica (cinza claro) observa grandes flutuações moleculares, para região mesoscópica (branco) sem flutuações a região mais estável, e na região macroscópica pequenas flutuações devido a forças externas



Fonte: O autor, 2021

Para responder essa pergunta, observe a ilustração da Figura 1: Uma sonda que mensura uma determinada quantidade física densidade, por exemplo, em um elemento de volume. Para a escala microscópica teríamos grandes flutuações devido a estrutura molecular do fluido, contudo, conforme o elemento do fluido dentro da sonda vai aumentando, entramos nas regiões onde a medida se encontra mais estável, isso acontece devido ao número de moléculas dentro da sonda ser suficientemente grande para que os valores médios sejam obtidos com pequenas flutuações,

sendo assim, o comprimento de uma partícula fluida é:

$$\lambda^* \approx 10 \text{ nm (para fluidos)} \quad (2)$$

Onde tal partícula possui cerca de  $4 \times 10^4$  moléculas e uma flutuação da ordem de 0,5 % (BRUUS, 2008). Sendo assim se o tamanho da partícula for considerado muito grande dentro da sonda, começa a aparecer pequenas variações nas propriedades físicas do fluido, devido a forças externas que é o que estamos interessados. Portanto a partícula fluida na escala mesoscópica deve apresentar um comprimento  $\lambda^*$  maior que 3 nm para não apresentar flutuações moleculares e menor que 10  $\mu\text{m}$  para que o fluido não sofra alteração nas propriedades devido as forças externas.

## 2.2 EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO PARA UM FLUIDO

Nessa seção iremos derivar as equações que regem a hidrodinâmica em geral e a micro-fluídica em particular, essas equações são derivadas das relações fundamentais que retratam a taxa de variação do fluxo de massa, momento e energia.

Partindo da hipótese da continuidade descrita na sub-seção 2.1.3, para descrevermos o movimento de um fluido vamos considerar um elemento de volume  $V_0$  fixo no espaço em relação a qualquer sistema de coordenadas. Em uma posição  $\mathbf{r}$ , para qualquer instante de tempo  $t$ , como esse elemento de volume é grande o suficiente para que os valores médios estatísticos sejam estáveis, ou seja, esteja em equilíbrio termodinâmico, com isso podemos definir grandezas físicas como densidade, velocidade, energia, entre outras.

Como o uso do teorema da divergência de Gauss será assíduo nessa seção, é necessário apresenta-lo, o mesmo traz a seguinte relação para um determinado campo vetorial  $\mathbf{B}(\mathbf{r})$  :

$$\int_{V_0} \nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \int_{S_0} \mathbf{B}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n} d^2\mathbf{r}, \quad (3)$$

Onde  $\mathbf{n}$  é um vetor unitário apontado para fora da superfície  $S_0$ , criada pelo volume  $V_0$ , com  $d^3\mathbf{r}$  sendo o elemento de integração de volume e  $d^2\mathbf{r}$  de área.

### 2.2.1 Equação de Conservação da Massa

Suponha um elemento de fluido de volume  $V_0$  sem variação, localizado na posição  $\mathbf{r}$ . Adotando que o elemento de fluido é constituído de  $N$  átomos ou moléculas em um determinado

instante de tempo  $t$ . Com isso, definimos que a densidade  $\rho(\mathbf{r}, t)$  é dada por:

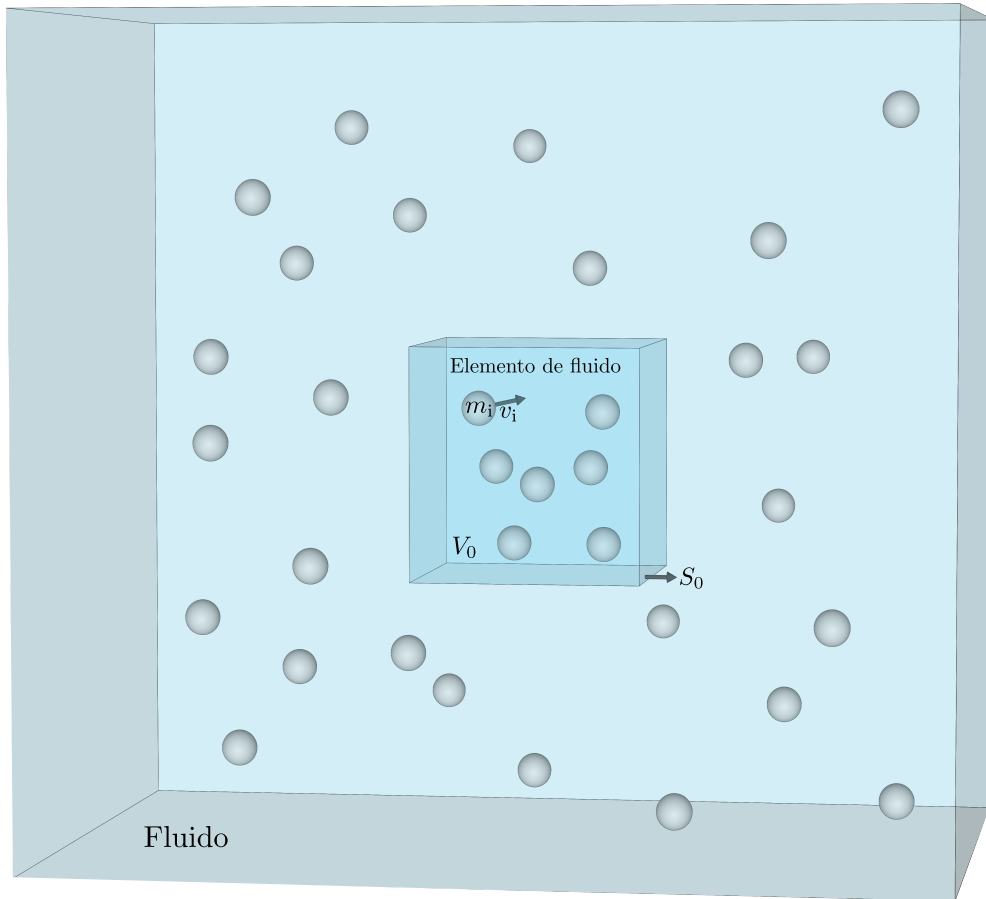
$$\rho(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{V_0} \sum_{i=1}^{N(t)} m_i, \quad (4)$$

Com  $m_i$  sendo a massa de cada átomo dentro do volume  $V_0$ . Logo, a velocidade do centro de massa de cada elemento de fluido  $V_0$  tem sua definição dada por:

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\rho(\mathbf{r}, t)V_0} \sum_{i=1}^{N(t)} m_i \mathbf{v}_i. \quad (5)$$

Sendo  $\mathbf{v}$  a velocidade do elemento de fluido, e  $\mathbf{v}_i$  a velocidade do  $i$ -ésimo átomo ou molécula, como mostra a figura 2.

Figura 2 – Elemento de fluido  $V_0$  ocupado por partículas de massa  $m_i$  e velocidade  $\mathbf{v}_i$ .



Fonte: O autor, 2021

Como dentro do fluido a massa não pode ser criada ou eliminada, temos que a massa total pode variar somente devido ao fluxo de massa. Por definição o fluxo de massa é a densidade  $\rho(\mathbf{r}, t)$  vezes a velocidade de convecção  $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ . A partir disso, temos que a variação da massa total no volume  $V_0$  por unidade tempo depende do fluxo  $\rho \mathbf{v}$  através da superfície  $S_0$  e do volume

$V_0$ . Logo, a conservação da massa impõe,

$$\partial_t \int_{V_0} \rho d^3\mathbf{r} + \int_{S_0} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} d^2\mathbf{r} = 0 \quad (6)$$

com  $\partial_t = \partial/\partial t$ . Como temos que o volume  $V_0$  é fixo, portanto a derivada temporal pode ser aplicada diretamente na função densidade. Contudo, podemos fazer uso do teorema da divergência de Gauss, Eq. (3), na integral de superfície da Eq. (6) para convertê-la em uma integral de volume, assim temos:

$$\int_{S_0} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} d^2\mathbf{r} = \int_{V_0} \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) d^3\mathbf{r} \quad (7)$$

agora substituindo a Eq.(7) na Eq.(6) temos,

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (8)$$

que equivale a equação de conservação da massa.

### 2.2.2 Equação de Conservação do Momento

Temos que o momento linear dentro de um volume fixo  $V_0$  para qualquer instante de tempo  $t$  é dado por  $\rho \mathbf{v}$ . Análogo ao que vimos com a variação da massa, o momento linear pode variar devido a convecção. Sendo assim, o fluxo de momento é definido como  $\rho \mathbf{v} \mathbf{v}$ . A variação da taxa do momento linear de um volume  $V_0$ , terá que ser a soma das contribuições das forças que atuam na superfície  $S_0$ , tais como pressão e viscosidade, e de forças volumétricas aplicadas ao longo do fluido, como força gravitacional e força elétrica. Portanto, a taxa de variação do momento linear de um volume  $V_0$  para um fluido é:

$$\partial_t \int_{V_0} \rho \mathbf{v} d^3\mathbf{r} + \int_{S_0} p \mathbf{n} d^2\mathbf{r} - \int_{S_0} \boldsymbol{\sigma}' \mathbf{n} d^2\mathbf{r} + \int_{S_0} \rho \mathbf{v} \mathbf{v} \mathbf{n} d^2\mathbf{r} + \int_{V_0} \mathbf{f}^v d^3\mathbf{r} = 0, \quad (9)$$

Com  $\mathbf{v} \mathbf{v}$  sendo um díade (tensor de segunda ordem),  $p(\mathbf{r}, t)$  a pressão em  $\mathbf{r}$ ,  $\boldsymbol{\sigma}'$  tensor de viscosidade e  $\mathbf{f}^v$  a densidade de força volumétrica. Podemos fazer uso do teorema de Gauss para tensores (MASE, 1970). Para transformar as integrais de superfície da Eq. (9) em integrais de volume, fazemos,

$$\partial_t \int_{V_0} \rho \mathbf{v} d^3\mathbf{r} + \int_{V_0} \nabla p \mathbf{n} d^3\mathbf{r} - \int_{V_0} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}' d^3\mathbf{r} + \int_{V_0} \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) d^3\mathbf{r} + \int_{V_0} \mathbf{f}^v d^3\mathbf{r} = 0 \quad (10)$$

como temos que  $V_0$  é volume arbitrário, chegamos na equação diferencial parcial da conservação do momento:

$$\partial_t(\rho \mathbf{v}) + \nabla p - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}' + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) + \mathbf{f}^v = 0. \quad (11)$$

Como vimos na sub-seção 2.1.2, as forças volumétricas  $\mathbf{f}^v$  são muito menores que as outras forças da Eq.(11), sendo assim podemos considerar  $\mathbf{f}^v = 0$ . Como o atrito das paredes internas do fluido não é zero, somente quando há movimento entre elas, o tensor de viscosidade  $\boldsymbol{\sigma}'$  depende da derivadas espaciais da velocidade, como estamos na microfluídica, para pequenos gradientes de velocidades, podemos considerar apenas a primeira ordem das derivadas, como isso definimos  $\boldsymbol{\sigma}'$  como,

$$\boldsymbol{\sigma}' = \eta(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) + (\beta - 1)\eta(\nabla \cdot \mathbf{v})\mathbf{I} \quad (12)$$

sendo  $\eta$  a viscosidade dinâmica,  $\beta$  é a razão adimensional das viscosidades (BRUUS, 2008),  $\mathbf{I}$  um tensor unitário,  $\nabla \mathbf{v}$  é um tensor de segunda ordem, e o subscrito  $^T$  denomina a transposta um tensor. Além do mais, podemos definir um tensor de tensões para um fluido viscoso como,

$$\mathbf{S} = p\mathbf{I} - \boldsymbol{\sigma}' + \rho \mathbf{v} \mathbf{v} \quad (13)$$

além disso, podemos escrever o gradiente da pressão em termos de um tensor de segunda ordem  $\nabla p = \nabla \cdot (p\mathbf{I})$ . Desta forma, podemos reescrever a Eq. (11) como:

$$\partial_t(\rho \mathbf{v}) + \nabla \cdot \mathbf{S} = 0 \quad (14)$$

Essa é a equação de conservação do momento linear, a qual faremos uso para derivar a equação da onda linear. No entanto, é importante reescrevermos essa equação de uma forma que irá nos ajudar a calcular a força de radiação. Sendo assim, considere a seguinte relação matemática:

$$\nabla \cdot \rho \mathbf{v} \mathbf{v} = (\nabla \cdot \rho \mathbf{v})\mathbf{v} + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \quad (15)$$

Substituindo a equação de conservação da massa Eq. (8) na relação acima, ficamos com,

$$\nabla \cdot \rho \mathbf{v} \mathbf{v} = -(\partial_t \rho)\mathbf{v} + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \quad (16)$$

e sabendo que o divergente do tensor de viscosidade é dado por, (BRUUS, 2008)

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}' = \eta \nabla^2 \mathbf{v} + \beta \eta \nabla(\nabla \cdot \mathbf{v}) \quad (17)$$

substituindo as Eqs. (16) e (17) na equação de conservação do momento temos,

$$\partial_t(\rho \mathbf{v}) + \nabla p - \eta \nabla^2 \mathbf{v} - \beta \eta \nabla(\nabla \cdot \mathbf{v}) - (\partial_t \rho)\mathbf{v} + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = 0 \quad (18)$$

$$\rho(\partial_t + \mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v} = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{v} + \beta \eta \nabla(\nabla \cdot \mathbf{v})$$

definindo  $D_t = \partial_t + \mathbf{v} \cdot \nabla$  como o operador de derivada temporal material, portanto

$$\rho D_t \mathbf{v} = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{v} + \beta \eta \nabla(\nabla \cdot \mathbf{v}) \quad (19)$$

sendo essa a equação de conservação do momento para um fluido viscoso.

### 2.2.3 Equação da Conservação da Energia

Agora vamos apresentar a última equação de conservação do fluido, sendo ela governada pela as leis da termodinâmica e por convecção. É conveniente usar quantidades termodinâmicas por unidade de massa quando se trabalha com fluidos. Sendo assim vamos definir  $u$  como sendo energia interna por unidade da massa em um volume  $V_0$  e  $s$  sendo a entropia por unidade de massa. Temos que a primeira lei da termodinâmica associa o aumento da energia interna com o trabalho realizado sobre um elemento de volume, e o calor  $Tds$  da seguinte maneira:

$$du = Tds - pd(\rho^{-1}) = Tds + \frac{p}{\rho^2}d\rho \quad (20)$$

Sendo  $T$  a temperatura. Consideremos que o transporte de calor é lento se comparado com a propagação acústica. Com isso, em um processo adiabático ( $ds = 0$ ), a primeira lei da termodinâmica se reduz a  $du = pp^{-2}d\rho$ . Portanto, tanto energia interna como a pressão pode ser escrita pela a equação de estado em função da densidade,

$$p = p(\rho), \quad (21)$$

$$u = u(\rho). \quad (22)$$

temos que a densidade de energia em um volume  $V_0$ , é obtida pela a soma da densidade de energia cinética e a densidade de energia interna,

$$E(\mathbf{r}, t) = \frac{\rho \mathbf{v}^2(\mathbf{r}, t)}{2} + \rho u(\mathbf{r}, t) \quad (23)$$

semelhante a variação de momento linear. Eq. (9), a densidade de energia em fluido de volume  $V_0$ , varia por convecção através de uma superfície  $S_0$  e por conta, da variação de trabalho realizada por uma força, gerada a partir da pressão na superfície  $S_0$ . Tendo que a densidade de energia de convecção é obtida em termos do fluxo de energia  $(\rho \mathbf{v}^2/2 + \rho u)\mathbf{v}$ , ao mesmo tempo que a variação do trabalho devido a pressão é  $p\mathbf{v}$  (observe a figura 2). Sendo assim, a variação da taxa de densidade de energia em um volume  $V_0$  em fluido é:

$$\partial_t \int_{V_0} \left( \frac{\rho \mathbf{v}^2}{2} + \rho u \right) d^3\mathbf{r} + \int_{S_0} \left( \frac{\rho \mathbf{v}^2}{2} + \rho u \right) \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} d^2\mathbf{r} + \int_{S_0} p\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} d^2\mathbf{r} = 0 \quad (24)$$

Usando novamente o Teorema de Gauss, e considerando um volume  $V_0$  arbítrio, chegamos na equação de conservação de energia,

$$\partial_t \left( \frac{\rho \mathbf{v}^2}{2} + \rho u \right) + \nabla \cdot \left[ \left( \frac{\rho \mathbf{v}^2}{2} + \rho u + p \right) \mathbf{v} \right] = 0, \quad (25)$$

Onde a quantidade entre os colchetes é conhecida como vetor fluxo de energia (NETO et al., 2015).

## 2.3 TEORIA DE PERTURBAÇÃO DE PRIMEIRA ORDEM

Nessa seção vamos derivar a equação da onda linear em um fluido, utilizando a teoria de perturbação, a derivação tem como partida a equação de estado termodinâmico da pressão  $p$  em termos da densidade  $\rho$  e equação de conservação da massa e equação de conservação do momento, derivadas nas seções anteriores, lembrando e rescrevendo alguns temos:

$$p = p(\rho) \quad (26)$$

$$\partial_t \rho = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) \quad (27)$$

$$\rho \partial_t \mathbf{v} = -\nabla p - \rho(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} + \eta \nabla^2 \mathbf{v} + \beta \eta \nabla(\nabla \cdot \mathbf{v}) \quad (28)$$

Vamos considerar o caso adiabático para não envolver a equação de troca de calor, contudo a solução analítica das equações diferenciais não lineares acopladas, é bastante complexa, mas felizmente soluções aproximadas são uteis e podem ser encontradas através da teoria de perturbação.

Considerando um líquido, onde antes de qualquer interação com uma onda acústica, tenha densidade  $\rho_0$  e pressão  $p_0$  constante. Após uma onda construir pequenas perturbações  $(\rho^{(1)}, p^{(1)} \text{ e } \mathbf{v}^{(1)})$  nos campos de densidade  $\rho$ , pressão  $p$  e velocidade  $\mathbf{v}$  ficamos com:

$$\begin{aligned} \rho &= \rho_0 + \rho^{(1)}, \\ p &= p_0 + c_0^2 \rho^{(1)}, \\ \mathbf{v} &= \mathbf{v}^{(1)} \end{aligned} \quad (29)$$

Onde fizemos a expansão da equação de estado em um processo isentrópico,

$$p(\rho) = p_0 + \left( \frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s \rho^{(1)} \quad (30)$$

como a variação de pressão com a densidade do fluido, isto é, onda de pressão, que é a por definição o som. Logo, a derivada parcial  $(\partial p / \partial \rho)$  tem a dimensão de velocidade ao quadrado. Portanto, a velocidade do som é definida da seguinte forma,

$$c_0^2 = \left( \frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s \quad (31)$$

substituindo a Eq. (29) nas Eqs. (27) e (28), e desconsiderando o produto dos termos de primeira ordem, chegamos

$$\partial_t \rho^{(1)} = -\nabla \cdot (\rho_0 \mathbf{v}^{(1)}), \quad (32)$$

$$\rho_0 \partial_t \mathbf{v}^{(1)} = -c_0^2 \nabla \rho^{(1)} + \eta \nabla^2 \mathbf{v}^{(1)} + \beta \eta \nabla (\nabla \cdot \mathbf{v}^{(1)}) \quad (33)$$

para escrevermos uma equação em termos apenas de  $\rho^{(1)}$ , vamos aplicar  $\partial$  na Eq (32) em ambos os lados assim,

$$\partial_t^2 \rho^{(1)} = -\nabla \cdot (\rho_0 \partial_t \mathbf{v}^{(1)}) \quad (34)$$

substituindo a Eq. (33) na Eq. (34), temos

$$\begin{aligned} \partial_t^2 \rho^{(1)} &= c_0^2 \nabla^2 \rho^{(1)} - \eta \nabla^2 (\nabla \cdot \mathbf{v}^{(1)}) + \beta \eta \nabla^2 (\nabla \cdot \mathbf{v}^{(1)}) \\ \partial_t^2 \rho^{(1)} &= c_0^2 \nabla^2 \rho^{(1)} - (1 + \beta) \eta \nabla^2 (\nabla \cdot \mathbf{v}^{(1)}) \\ \partial_t^2 \rho^{(1)} &= c_0^2 \left[ 1 + \frac{(1 + \beta) \eta}{\rho_0 c_0^2} \partial_t \right] \nabla^2 \rho^{(1)} \end{aligned} \quad (35)$$

usando a aproximação linear da expansão da pressão em termos da densidade

$$p^{(1)} = c_0^2 \rho^{(1)} \quad (36)$$

na equação acima, obtemos

$$\partial_t^2 p^{(1)} = c_0^2 \left[ 1 + \frac{(1 + \beta) \eta}{\rho_0 c_0^2} \partial_t \right] \nabla^2 p^{(1)}, \quad (37)$$

assumindo que os campos acústicos (densidade, pressão e velocidade ) tem uma dependência de tempo harmônica,

$$\rho^{(1)}(\mathbf{r}, t) = \rho^{(1)}(\mathbf{r}) e^{-i\omega t} \quad (38)$$

$$p^{(1)}(\mathbf{r}, t) = p^{(1)}(\mathbf{r}) e^{-i\omega t} \quad (39)$$

$$\mathbf{v}^{(1)}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{v}^{(1)}(\mathbf{r}) e^{-i\omega t} \quad (40)$$

onde  $\omega = 2\pi f$  é a frequência angular, e  $f$  a frequência do campo acústico, adicionando o termo harmônico através da fase complexa  $e^{-i\omega t}$  facilitamos os cálculos matemáticos, e os campos físicos são obtidos pegando a parte real de campo acústico. Sendo assim, para cada  $\partial_t$  na Eq.(37) aparece um termo  $-i\omega$ , então substituindo a Eq. (39) na Eq. (37) e efetuando as derivadas, obtemos

$$\nabla^2 p^{(1)} = - \left[ 1 - \frac{i(1 + \beta) \eta \omega}{\rho_0 c_0^2} \right]^{-1} \frac{\omega^2}{c_0^2} p^{(1)} \quad (41)$$

definindo o fator de amortecimento acústico como,

$$\gamma_d = \frac{(1 + \beta) \eta \omega}{2 \rho_0 c_0^2} \quad (42)$$

para a água em uma frequência de MHz temos  $\gamma_d \approx 10^{-5}$ . Introduzindo o número de onda complexo como,

$$k = k_0 \sqrt{\frac{1}{1 - 2i\gamma_d}}, \quad k_0 = \frac{\omega}{c_0} \quad (43)$$

expandindo a raiz quadrada em série de *Maclaurin* para  $\gamma_d$  pequeno, ficamos com

$$k = k_0(1 + i\gamma_d) \quad (44)$$

portanto,

$$\nabla^2 p^{(1)} = -k^2 p^{(1)}. \quad (45)$$

Que é a equação de Helmholtz para um número de onda complexo. Para  $\gamma \ll 1$  podemos desconsiderar os efeitos de viscosidade, assim  $\eta = 0$ , com isso a Eq. (33) se resume em,

$$\rho_0 \partial_t \mathbf{v}^{(1)} = -\nabla p^{(1)} \quad (46)$$

Substituindo a Eq. (40) na equação acima, temos

$$-i\omega\rho_0\mathbf{v}^{(1)} = -\nabla p^{(1)}, \quad \mathbf{v}^{(1)} = -\frac{i}{\omega\rho_0}\nabla p^{(1)} = \nabla\phi^{(1)} \quad (47)$$

onde definimos o potencial de velocidade como  $\phi^{(1)} = -ip^{(1)}/\omega\rho_0$ , e a equação da onda de pressão fica

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c_0^2}\partial_t^2\right)p^{(1)} = 0, \text{ para } \eta = 0 \quad (48)$$

Considerando a dependência harmônica no campo de pressão, chegamos novamente na equação de Helmholtz,

$$(\nabla^2 + k_0^2)p^{(1)}(\mathbf{r}) = 0 \quad (49)$$

agora para um número de onda real  $k_0 = \omega/c_0$ . O termo  $e^{-i\omega t}$  foi omitido pra simplificar.

## 2.4 CONSERVAÇÃO PARA SÓLIDOS

Agora vamos apresentar as equações básicas para um sólido, sendo elas conservação da massa, do momento e da energia, onde incluiremos conceitos de deformação e desenvolvimento de relação constitutivas. Nesta seção as equações apresentadas serão referenciadas a um sistema de coordenadas cartesianas  $x_i = i(1, 2, 3)$ , para que com isso as dificuldades do cálculo tensorial possam ser evitadas.

### 2.4.1 Deformação

Vamos considerar um meio contínuo de volume  $V_0$  e superfície  $S_0$  vulnerável a uma deformação. No estado inicial, o ponto  $P_0$  está localizado na posição representada pelo o vetor  $\mathbf{R}(x_1, x_2, x_3)$ . Um ponto  $P_1$ , próximo do ponto  $P_0$ , se encontra localizado pelo vetor  $d\mathbf{R}$  em relação a  $P_0$ . Depois da deformação, teremos  $V'_0$  e  $S'_0$  para a volume e superfície respectivamente,

representaremos o ponto  $P_0$  por  $P'_0$  que estará localizado pelo vetor  $\mathbf{r}(x_1, x_2, x_3)$ , e o ponto  $P_1$  por  $P'_1$  localizado pelo o vetor  $d\mathbf{x}$  em relação a  $P'_0$ , como podemos ver na figura 3. Sendo  $\mathbf{w} = (w_1, w_2, w_3)$  o vetor deslocamento medido de  $P_0$  para  $P'_0$ . Com isso, temos que a relações entre os vetores da figura 3 são dadas por

$$\mathbf{r} = \mathbf{R} + \mathbf{w} \quad (50)$$

$$\mathbf{w} + d\mathbf{r} = d\mathbf{R} + \mathbf{W} \quad (51)$$

Contudo, da Eq. (50), temos  $d\mathbf{r} = d\mathbf{R} + d\mathbf{w}$ , então, usando essa expressão podemos reescrever a Eq. (51) como

$$\mathbf{W} = \mathbf{w} + d\mathbf{w}. \quad (52)$$

Além do mais, podemos expressar  $dw_i$  da seguinte maneira:

$$dw_i = \partial_j w_i dx_j \quad (53)$$

com  $\partial_j = \partial/\partial x_j$ , a equação acima pode ser representada por:

$$dw_i = \frac{1}{2}(\partial_j w_i + \partial_i w_j)dx_j + \frac{1}{2}(\partial_j w_i - \partial_i w_j)dx_j \quad (54)$$

Dessa forma, podemos definir os tensores infinitesimais de deformação e rotação para pequenas deformações sendo,

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2}(\partial_j w_i + \partial_i w_j), \quad w_{ij} = \frac{1}{2}(\partial_j w_i - \partial_i w_j) \quad (55)$$

para a forma vetorial da deformação temos

$$\boldsymbol{\epsilon} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{w} + \nabla \mathbf{w}^T) \quad (56)$$

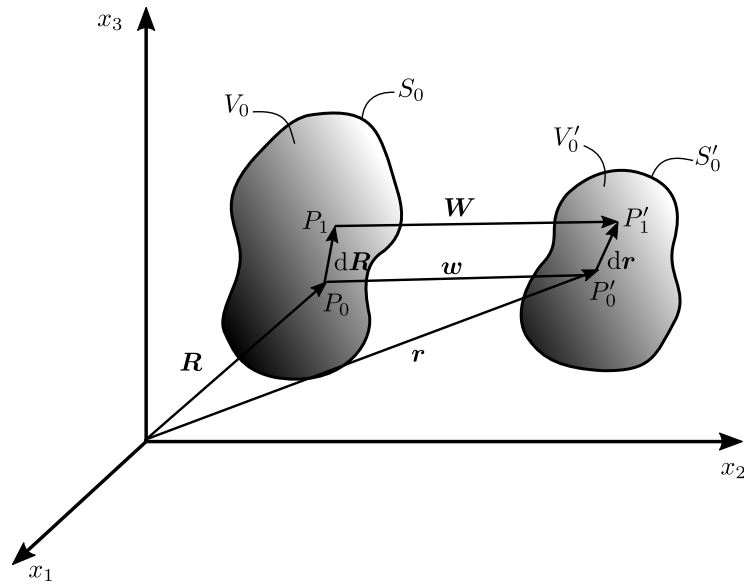
Sendo  $\nabla \mathbf{w}$  um tensor de segunda ordem e o subscrito  $^T$  denomina a transposta um tensor.

A partir do resultado da Eq. (54) percebemos que a cinemática de ponto arbitrário próximo ao ponto  $P_0$  é governada pelo o campo gradiente local  $\partial_j w_j$  a combinação de efeitos locais de distorção  $\epsilon_{ij}$  e rotação de corpo rígido  $w_{ij}$  é o movimento.

## 2.4.2 Tensão

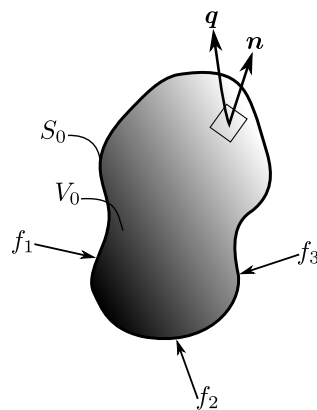
Vamos considerar um meio contínuo de volume  $V_0$  e superfície  $S_0$  com forças externas  $f_i (i = 1, 2, 3)$  agindo sobre ele como mostra a figura 4. A medida que um objeto sofre ação dessas forças o mesmo é deformado, logo a distribuição das moléculas é alterada, fazendo que o objeto saia do estado de equilíbrio original.

Figura 3 – Ilustração da deformação de meio contínuo de volume  $V_0$  e superfície  $S_0$  para o volume  $V'_0$  e superfície  $S'_0$



Fonte: O autor, 2021

Figura 4 – Vetor tração  $\mathbf{q}$  de meio contínuo de volume  $V_0$  e superfície  $S_0$  em virtude das forças externas  $f_i (i = 1, 2, 3)$



Fonte: O autor, 2021

A partir dessas forças, o vetor de tração interno  $\mathbf{q}$ , tende a devolver o equilíbrio ao objeto atuando sobre um elemento de superfície arbitrária com um vetor  $\mathbf{n}$  normal a essa superfície (olhe a figura 4). Dessa forma, temos que vetor tração é dado,

$$\mathbf{q} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \quad (57)$$

com  $\sigma$  sendo o tensor de tensões que está diretamente relacionado com a forças internas que tentam devolver o equilíbrio ao corpo. Com isso, se não existe deformação, não há tensão interna.

### 2.4.3 Conservação da Massa

Temos que a massa confinada em um meio contínuo de volume  $V_0$  e superfície  $S_0$  para qualquer instante de tempo  $t$ , é definida por

$$m = \int_{V_0} \rho_1 d^3\mathbf{r}, \quad (58)$$

Com  $\rho_1 = \rho_1(\mathbf{r}, t)$  sendo a densidade da massa de um sólido. A conservação da massa exige que a taxa de variação da massa seja zero, isso quer dizer que  $dm/dt = 0$ . Então,

$$\int_{V_0} [\partial_t \rho_1 d^3\mathbf{r} + \rho_1 \partial_t (d^3\mathbf{r})] = 0. \quad (59)$$

Temos que o deslocamento de uma partícula em virtude de uma deformação de um volume  $V_0$  após um instante  $dt$  é  $\mathbf{v}dt$ . Sendo  $\mathbf{n}$  um vetor unitário normal a superfície  $S_0$ , logo o volume deslocado por essas partículas em um elemento de área  $d^2\mathbf{r}$  na superfície  $S_0$  é dado

$$d^3\mathbf{r} = \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dt d^2\mathbf{r}. \quad (60)$$

com isso,

$$\int_{V_0} \partial_t \rho_1 d^3\mathbf{r} + \int_{S_0} \rho_1 \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} d^2\mathbf{r} = 0 \quad (61)$$

usando o teorema da divergência de Gauss Eq. (3), na integral de superfície para convertê-la em uma integral de volume, dessa maneira

$$\int_{V_0} \partial_t \rho_1 d^3\mathbf{r} + \int_{V_0} \nabla \cdot \rho_1 \mathbf{v} d^3\mathbf{r} = 0 \quad (62)$$

Sendo o volume  $V_0$  arbitrário, a equação de conservação da massa se resume em,

$$\partial_t \rho_1 + \nabla \cdot \rho_1 \mathbf{v} = 0 \quad (63)$$

### 2.4.4 Conservação do Momento

Temos que para qualquer instante de tempo  $t$  o momento linear no volume contínuo  $V_0$  é dado por  $\rho_1 \mathbf{v}$ . Sabendo que a taxa do momento linear em meio contínuo de volume  $V_0$  e superfície  $S_0$  é igual a soma das forças aplicadas nesse volume. O corpo está sobre efeito de forças superficiais e volumétricas. Com isso, a taxa de variação do momento linear é obtida por

$$\partial_t \int_{V_0} \rho_1 \mathbf{v} d^3 \mathbf{r} = \int_{S_0} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} d^2 \mathbf{r} + \int_{V_0} \mathbf{f}^V d^3 \mathbf{r}, \quad (64)$$

Com  $\boldsymbol{\sigma}$  sendo o tensor de tensões de um sólido. Resolvendo a derivada temporal na integral utilizando a regra do produto, e como vimos que a derivada temporal do elemento de volume é  $\partial_t(d^3 \mathbf{r}) = \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} d^2 \mathbf{r}$ , ficamos com

$$\int_{V_0} (\mathbf{v} \partial_t \rho_1 + \rho_1 \partial_t \mathbf{v}) d^3 \mathbf{r} + \int_{S_0} \rho_1 \mathbf{v} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} d^2 \mathbf{r} = \int_{S_0} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} d^2 \mathbf{r} + \int_{V_0} \mathbf{f}^V d^3 \mathbf{r} \quad (65)$$

agora substituindo a Eq. (61) e fazendo uso que  $\mathbf{v} = \partial_t \mathbf{w}$  conseguimos simplificar o lado esquerdo da equação. Novamente utilizando o teorema de Gauss Eq. (3) na integral de superfície podemos reescrevê-la da seguinte maneira,

$$\int_{V_0} (\rho_1 \partial_t^2 \mathbf{w} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} - \mathbf{f}^V) d^3 \mathbf{r} = 0 \quad (66)$$

Novamente para um volume  $V_0$  arbitrário, temos que a equação de conservação do momento é dada por

$$\rho_1 \partial_t^2 \mathbf{w} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} - \mathbf{f}^V = 0 \quad (67)$$

Para o caso particular onde as forças volumétricas são muito menores que as outras forças, podemos fazer  $\mathbf{f}^V = 0$  na equação acima, logo,

$$\rho_1 \partial_t^2 \mathbf{w} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0. \quad (68)$$

Sendo essa a equação de conservação de momento para sólidos a qual faremos uso nas próximas seções.

### 2.4.5 Conservação da Energia

A conservação de energia exige que a variação da taxa da energia total seja igual ao trabalho realizado sobre o corpo por todas as forças externas por unidade de tempo.

A energia cinética  $E_c$  e a energia interna  $U$  são respectivamente definidas por

$$E_c = \int_{V_0} \frac{1}{2} v^2 \rho_1 d^3 \mathbf{r}, \quad (69)$$

$$U = \int_{V_0} u \rho_1 d^3 \mathbf{r} \quad (70)$$

com  $u$  sendo a energia interna por unidade massa. Sendo assim, a conservação da energia é dada por

$$\partial_t \int_{V_0} \left( \frac{1}{2} v^2 + u \right) \rho_1 d^3 \mathbf{r} = \int_{S_0} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{v} d^2 \mathbf{r} + \int_{V_0} \mathbf{f}^V \cdot \mathbf{v} d^3 \mathbf{r}. \quad (71)$$

Aplicando a derivada temporal no lado esquerdo da equação e desenvolvendo, temos

$$\begin{aligned} & \int_{V_0} \left[ (\mathbf{v} \partial_t \mathbf{v} + \partial_t u) \rho_1 + \left( \frac{1}{2} v^2 + u \right) \partial_t \rho_1 \right] d^3 \mathbf{r} + \int_{S_0} \left( \frac{1}{2} v^2 + u \right) \rho_1 \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} d^2 \mathbf{r} \\ &= \int_{S_0} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{v} d^2 \mathbf{r} + \int_{V_0} \mathbf{f}^V \cdot \mathbf{v} d^3 \mathbf{r} \end{aligned} \quad (72)$$

novamente usando o teorema de Gauss nas integrais de superfície e reorganizando alguns termos, temos

$$\int_{V_0} (\mathbf{v} \partial_t \mathbf{v} + \partial_t u) \rho_1 d^3 \mathbf{r} + \int_{V_0} \left( \frac{1}{2} v^2 + u \right) [\partial_t \rho_1 + \nabla \cdot \rho_1 \mathbf{v}] d^3 \mathbf{r} = \int_{V_0} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} \mathbf{v} d^3 \mathbf{r} + \int_{V_0} \mathbf{f}^V \cdot \mathbf{v} d^3 \mathbf{r} \quad (73)$$

observe que o termo entre colchetes é nulo, por ser a equação de conservação da massa Eq. (63), e ainda substituindo  $\mathbf{v} = \partial_t \mathbf{w}$  e trocando de lugar alguns termos, podemos reescrever a equação da seguinte maneira,

$$\int_{V_0} [(\rho_1 \partial_t^2 \mathbf{w} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} - \mathbf{f}^V) + (\rho_1 \partial_t u - \boldsymbol{\sigma} \nabla \cdot \mathbf{v})] d^3 \mathbf{r} = 0 \quad (74)$$

Dessa vez o primeiro parenteses que é nulo, pois trata-se da equação de conservação do momento Eq. (68), dessa forma, para um volume arbitrário  $V_0$  a equação se reduz,

$$\rho_1 \partial_t u - \boldsymbol{\sigma} \nabla \cdot \mathbf{v} = 0. \quad (75)$$

Sendo essa a equação de conservação de energia para sólidos.

## 2.5 MODELOS CONSTITUTIVOS ELÁSTICOS

Usualmente definimos um material elástico como sendo aquele que volta ao seu estado inicial, depois de ser submetido a um ciclo completo de carregamento e descarregamento, sem sofrer deformações permanentes (TIMOSHENKO; GOODIER, 1970), contudo para a descrição de modelos constitutivos, a definição clássica de Cauchy é mais apropriada, na qual um material elástico tem o estado de tensão em função apenas do estado de deformação, ou seja, temos que as trajetórias de carregamento, descarregamento ou recarregamento são todas coincidentes nessa classe de material, ou melhor, os materiais elásticos são conservativos, assim liberando no descarregamento toda a energia interna armazenada na fase de carregamento.

### 2.5.1 Modelo Elástico Linear

Em grande parte dos modelos constitutivos a teoria de elasticidade linear é empregada onde considerando que as componentes da tensão são linearmente relacionadas com as componentes da deformação. Assim podemos escrever a relação constitutiva geral em modelo elástico como,

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\epsilon_{kl} \quad (76)$$

com  $\sigma_{ij}$  sendo tensor de tensões,  $\epsilon_{kl}$  o tensor de deformação e o  $C_{ijkl}$  sendo o tensor de constantes elásticas, ou módulos, do material que é denominado o tensor do módulo de elasticidade. Na condição de simetria dos tensores de tensão e deformação, o número de constantes elásticas usadas para definir o comportamento do material é de 21, diminuindo para 9 na hipótese de ortotropia do meio elástico, 5 para materiais transversalmente isotrópicos e por fim se reduzindo a 2 para materiais isotrópicos, onde o comportamento do meio é independente a direção em estudo. É importante lembrar que para o caso de materiais elásticos lineares e isotrópicos os eixos principais de tensão e deformação se coincidem. Sendo assim, a lei constitutiva para materiais linearmente elásticos e isotrópicos, conhecida como lei de Hooke generalizada, é dada por,

$$\sigma_{ij} = \lambda\epsilon_{kk}\delta_{ij} + 2\mu\epsilon_{ij} \quad (77)$$

onde  $\lambda$  e  $\mu$  são as constantes elásticas de Lamé e  $\delta_{ij}$  a função delta de Kronecker. Entretanto, é conveniente expressar a Eq. (77) em termos do módulo de deformação volumétrica (Bulk Modulus)  $K$  e o módulo de cisalhamento (Shear Modulus)  $G$ , que são relacionados com as constantes de Lamé da seguinte maneira,

$$\begin{aligned} \lambda &= K - \frac{2}{3}G \\ \mu &= G \end{aligned} \quad (78)$$

substituindo as relações da eq.(78) na Eq. (77), temos

$$\sigma_{ij} = K\epsilon_{kk}\delta_{ij} + 2G(\epsilon_{ij} - \frac{\epsilon_{kk}}{3}\delta_{ij}) \quad (79)$$

A relação constitutiva da Eq. (77), pode ser representada matricialmente em termos das constantes  $K$  e  $G$  da seguinte forma (ROMANEL, 2003),

$$\begin{Bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{12} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} K + \frac{4}{3}G & K - \frac{2}{3}G & K - \frac{2}{3}G & 0 & 0 & 0 \\ K - \frac{2}{3}G & K + \frac{4}{3}G & K - \frac{2}{3}G & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2G & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2G & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2G \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \epsilon_{11} \\ \epsilon_{22} \\ \epsilon_{33} \\ \epsilon_{12} \\ \epsilon_{23} \\ \epsilon_{13} \end{Bmatrix} \quad (80)$$

Para o estudo em acústica é habitual escrever o módulo de deformação volumétrica  $K$  e o módulo de cisalhamento  $G$  em termos dos números de onda longitudinal  $k_\ell$  e de cisalhamento  $k_s$  (LOPES et al., 2017), então

$$K = -\frac{4}{3}G + \frac{\rho}{(k_\ell/\omega)^2} \quad (81)$$

$$G = \frac{\rho}{(k_s/\omega)^2} \quad (82)$$

onde

$$k_j = \frac{\omega}{c_j} + i\alpha_j \quad j \in \{\ell, s\} \quad (83)$$

onde  $c_\ell$  e  $c_s$  são as velocidades do som longitudinal e cisalhamento do material respectivamente, da mesma forma que  $\alpha_\ell$  e  $\alpha_s$  são os coeficientes de atenuação ou absorção longitudinal e cisalhamento, responsáveis por adicionar a absorção do som no material.

## 2.6 PIEZOELETRICIDADE

A piezoeletricidade é a característica apresentada por alguns materiais capazes de transformar sinais elétricos em movimentos mecânicos, o processo inverso também é válido. Esses materiais piezoelétricos têm sido bastante utilizados para manipulação de partículas ultrassônicas. Para excitar esses materiais, podemos usar geradores de sinais programáveis, que geram diversos tipos de ondas, em diferentes frequências assim abrindo um leque para inúmeras aplicações.

Para que essas vantagens possam acontecer é preciso ter materiais com constantes piezoelétricas altas. Isso acontece com as cerâmicas piezoelétricas. Para um Pz26, que é um *lead zirconate titanate* (PZT) a constante de carga piezoelétrica é  $10^{-10} \text{ C N}^{-1}$ , enquanto para um cristal de quartzo é de  $10^{-12} \text{ C N}^{-1}$ . Na figura 5 temos a ilustração de um transdutor clássico utilizado em ultrassom. O transdutor é colocado em contato com a superfície que deseja ser excitada por meio de um agente externo, sendo ele um gel de acoplamento ou uma cola. A maioria dos transdutores ultrassônicos, trabalham em modo ressonante, ou seja, eles têm uma frequência definida para uma maior eficiência sendo essa a frequência de ressonância.

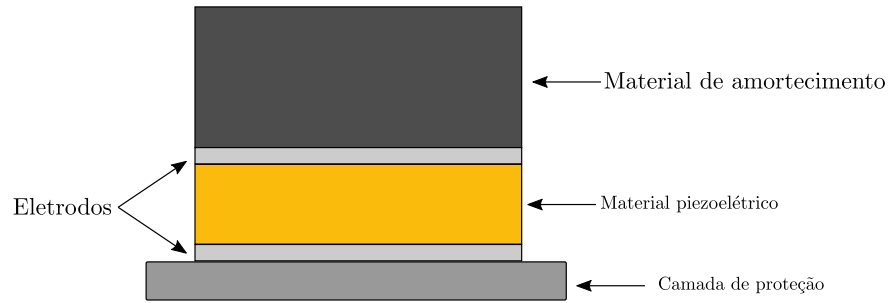
### 2.6.1 Equações Básicas

Os materiais piezoelétricos possuem uma densidade de polarização intrínseca  $\mathbf{P}$ , dependendo em qual direção o campo elétrico  $\mathbf{E}$  é aplicado, onde o mesmo é controlado pelos eletrodos.

Para um campo  $\mathbf{E}$  paralelo à polarização  $\mathbf{P}$ , ocorre extensão/contração do material ou para um campo  $\mathbf{E}$  ortogonal a  $\mathbf{P}$  ocorre o cisalhamento.

Nesse momento, vamos apresentar a teoria linear de materiais piezoelétricos. Sendo a mais apropriada para manipulação de partículas ultrassônicas, a lei constitutiva é considerada linear, e os termos de segunda ordem do deslocamento de deformação também são desprezados.

Figura 5 – Ilustração de um transdutor ultrassônico característico.



Fonte: O autor, 2021

A tabela 1 mostra que relações constitutivas para materiais piezoelétricos estão relacionadas com sete quantidades, onde as três últimas são obtidas a partir das propriedades do material.

Tabela 1 – Relações constitutivas para materiais piezoelétricos

| Símbolo                                | Descrição                                       | ordem do tensor | Unidade (SI)                      |
|----------------------------------------|-------------------------------------------------|-----------------|-----------------------------------|
| $E_i$                                  | Campo elétrico                                  | 1 <sup>a</sup>  | C/N                               |
| $D_i$                                  | Deslocamento elétrico                           | 1 <sup>a</sup>  | C/m <sup>2</sup>                  |
| $\gamma_{ij}$                          | Deformação Mecânica                             | 2 <sup>a</sup>  | -                                 |
| $\sigma_{ij}$                          | Tensão Mecânica                                 | 2 <sup>a</sup>  | N/m <sup>2</sup>                  |
| $s_{Eijkl}$                            | Conformidade mecânica ( $\mathbf{E}$ Constante) | 4 <sup>a</sup>  | m <sup>2</sup> /N                 |
| $d_{ijk}$                              | Constante de carga piezoelétrica                | 3 <sup>a</sup>  | C/N                               |
| $\epsilon_{\sigma ij} = \epsilon_{ij}$ | Permissividade ( $\sigma_{ij}$ contante)        | 2 <sup>a</sup>  | C <sup>2</sup> / m <sup>2</sup> N |

Fazendo uso da Notação de Einstein, o deslocamento elétrico é definido por,

$$D_i = \epsilon_0 E_i + P_i, \quad (84)$$

onde  $\epsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12} \text{ C}^2/\text{Nm}^2$  é a permissividade no vácuo, essa equação representa o fato de que a nuvem de elétrons muda em relação ao núcleo sob ação de um campo elétrico externo.

As equações constitutivas para um material piezoelétrico são dadas por (DUAL; MÖLLER, 2012)

$$\begin{aligned} \gamma_\lambda &= s_{E\lambda\mu} \sigma_\mu + d_{k\lambda} E_k, \\ D_i &= d_{i\mu} \sigma_\mu + \epsilon_{ik} E_k \end{aligned} \quad (85)$$

aqui utilizamos índices gregos para simplificar a notação (DUAL; SCHWARZ, 2012). Os índices gregos podem assumir valores de 1 a 6, e a correspondência entre os pares de índices dos tensores é dada por:

|           |    |    |    |       |       |       |
|-----------|----|----|----|-------|-------|-------|
| ij        | 11 | 22 | 33 | 23,32 | 13,31 | 12,21 |
| $\lambda$ | 1  | 2  | 3  | 4     | 5     | 6     |

Perceba que as cerâmicas piezoelétricas apresentam um eixo de simetria paralelo à direção de polarização.

É comum utilizar sinais de tempo harmônico na manipulação de partículas, então, se a tensão de excitação for do tipo  $V = \text{Re}(V_a e^{i\omega t})$ , em que "Re" é a parte real de uma quantidade complexa, todas as outras quantidades terão a mesma dependência do tempo por conta da linearidade das equações. Com isso, a equação de equilíbrio mecânico para o caso harmônico é,

$$\sigma_{ij,j} + \rho \omega^2 \mu_i = 0 \quad (86)$$

Onde  $\mu$  é deslocamento mecânico,  $\rho$  a densidade,  $\omega$  a frequência angular e  $\sigma_{ij,j}$  a derivada em relação a  $x_j$ . Definimos a pressão mecânica como,

$$\begin{aligned} \gamma_{ij} &= \frac{1}{2}(\mu_{i,j} + \mu_{j,i}), \\ 2\gamma_{ij} &= (1 + \delta_{ij})\gamma_{\lambda}. \end{aligned} \quad (87)$$

a primeira equação de Maxwell para um material dielétrico é dada por

$$D_{i,i} = 0 \quad (88)$$

Onde o lado direito da Eq.(88) é zero, pois não há cargas livres em um material dielétrico. Assim, temos que da Eq. (85) até a Eq. (88) são as equações básicas da piezoeletricidade, que podem ser revolvidas a partir das condições de contorno adequadas para as grandezas elétricas e mecânicas.

No capítulo seguinte, vamos derivar a força de radiação acústica que vamos fazer uso para caracterizar o aprisionamento de partícula da microcavidade.

### 3 FORÇA DE RADIAÇÃO ACÚSTICA

A força de radiação acústica aparece com a interação de um campo acústico com partículas suspensas em um fluido. A partir dessa interação, a onda acústica é espalhada e assim produz uma transferência de momento da onda para as partículas. Deste modo, o fluxo de momento linear e tensão que atuam sobre as partículas é intitulado de força de radiação acústica.

Os primeiros estudos com uma certa relevância em força de radiação para partículas suspensa em fluidos, foram feitos por King (1934). Para esse trabalho, King estudou o efeito em uma esfera rígida de um tamanho qualquer para um fluido ideal, para ondas planas e estacionárias. Esse trabalho serviu de inspiração para diversos autores começarem a propor novos métodos para o estudo. Com isso, Yosioka e Kawasima (1955), promoveram estudos para partículas esféricas compressíveis em um fluido ideal, eles perceberam que para diferentes contrastes das propriedades mecânicas das partículas e dos fluidos, elas eram atraídas para os nós ou antinós de pressão de uma onda estacionária. Algum tempo depois, Gor'kov (1962) aprimorou o trabalho de Yosioka e Kawasima, propondo uma expressão simples para força de radiação acústica por efeito do espalhamento de um feixe com geometria arbitrária, contudo, essa teoria é válida apenas para partículas muito menores que o comprimento de onda. Mais recentemente, Settnes e Bruus (2012), refinaram a teoria de Gor'kov, com uma versão mais detalhada, e adicionando o efeito de viscosidade no fluido.

Na próxima seção vamos apresentar a teoria de espalhamento Rayleigh usada para derivar a força de radiação para uma partícula com raio muito menor que o comprimento de onda.

#### 3.1 ESPALHAMENTO RAYLEIGH

Vamos supor que uma onda incidente seja espalhada por uma partícula compressível de raio  $a$ , com densidade  $\rho_p$  e velocidade do som  $c_p$ , a partícula esta localizada na origem do sistema de coordenadas. Temos que a amplitude de pressão total no fluido é caracterizada por  $p_i(\mathbf{r}) + p_s(\mathbf{r})$ , sendo  $p_i$  a pressão incidente e  $p_s$  a pressão espalhada, podemos expandir a pressão espalhada em uma série de ondas parciais em coordenadas esféricas  $(r, \theta, \phi)$  da seguinte maneira (SILVA, 2011b),

$$p_s = p_0 \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^m s_n a_n^m h_n^{(1)}(k_0 r) \mathbf{Y}_n^m(\theta, \phi) \quad (89)$$

onde  $p_0$  é a magnitude da pressão incidente,  $k_0 = \omega/c_0$  o número de onda,  $h_n^{(1)}$  a função de Hankel de ordem  $n$  do primeiro tipo,  $\mathbf{Y}_n^m$  os harmônicos esféricos de ordem  $n$  e grau  $m$ ,  $a_n^m$  são

os coeficientes de forma do feixe e  $s_n$  os coeficientes de espalhamentos escalar. Perceba que a Eq. (89) satisfaz a condição de radiação de Sommerfeld. Os coeficientes de forma do feixe são os pesos das ondas parciais na expansão do feixe incidente (SILVA, 2011b). Esses coeficientes até a aproximação de quadrupolo em termos da pressão incidente e da velocidade do elemento de fluido é dado por (SILVA, 2014):

$$\begin{aligned}
 a_0^0 &= \frac{\sqrt{4\pi}}{p_0} p(\mathbf{0}), \\
 a_1^{\mp 1} &= \frac{\rho_0 c_0}{p_0} \sqrt{6\pi} [\pm i v_x(\mathbf{0}) + v_y(\mathbf{0})], \\
 a_1^0 &= \frac{2i\rho_0 c_0}{p_0} \sqrt{3\pi} v_z(\mathbf{0}), \\
 a_2^{\mp 2} &= \frac{\rho_0 c_0}{k_0 p_0} \sqrt{\frac{15\pi}{2}} \left[ i \left( \frac{\partial v_x(\mathbf{0})}{\partial x} - \frac{\partial v_y(\mathbf{0})}{\partial y} \right) \pm 2 \frac{\partial v_x(\mathbf{0})}{\partial y} \right], \\
 a_2^{\mp 1} &= \frac{\rho_0 c_0}{k_0 p_0} \sqrt{30\pi} \left[ \pm i \frac{\partial v_x(\mathbf{0})}{\partial x} - \frac{\partial v_y(\mathbf{0})}{\partial z} \right], \\
 a_2^0 &= -\frac{i\rho_0 c_0}{k_0 p_0} \sqrt{5\pi} \left[ \frac{\partial v_x(\mathbf{0})}{\partial x} + \frac{\partial v_y(\mathbf{0})}{\partial y} - 2 \frac{\partial v_z(\mathbf{0})}{\partial z} \right]
 \end{aligned} \tag{90}$$

Para obter os coeficientes de espalhamento escalar vamos aplicar a condição de continuidade de pressão e velocidade da partícula, através da superfície da partícula em  $r = a$ , a partir dessas condições temos,

$$s_n = -\det \begin{bmatrix} \gamma j_n(k_0 a) & j_n(\kappa_p a) \\ j_n'(k_0 a) & j_n'(\kappa_p a) \end{bmatrix} \det \begin{bmatrix} \gamma h_n^{(1)}(k_0 a) & j_n(\kappa_p a) \\ h_n^{(1)'}(k_0 a) & j_n'(\kappa_p a) \end{bmatrix}^{-1} \tag{91}$$

com  $\kappa_1$  sendo o número de onda interno da partícula e  $\gamma = \rho_0 \kappa_p / (\rho_p k_0)$ . No regime de espalhamento de Rayleigh temos que a partícula é muito menor que o comprimento de onda  $k_0 a \ll 1$ , com isso nesse regime os coeficientes de espalhamento são  $\mathcal{O}[(k_0 a)^6 + i(k_0 a)^3]$ , então  $s_n = \mathcal{O}[(k_0 a)^{4n+2} + i(k_0 a)^{2n+1}]$  para  $n > 1$ .

Assumindo que a absorção dentro de uma partícula obedece a uma lei de potência (SZABO, 1994), tal que  $\alpha_\nu = \alpha(\omega/2\pi)^\nu$ , onde  $\alpha$  é coeficiente de absorção e  $0 < \nu < 2$ , com isso o número de interno da partícula pode ser expresso como,

$$\kappa_p = k_p + i\alpha_\nu \tag{92}$$

onde  $k_p = \omega/c_p$ . Não vamos considerar os efeitos da onda de cisalhamento dentro da partícula, pois temos que a camada de limite viscosa é muito menor que o raio da partícula.

Agora expandindo os coeficientes de espalhamento escalar  $s_0$  e  $s_1$  na Eq.(91), para  $a \rightarrow 0$  e  $k_0 a \ll \rho_p/\rho_0$ , é conveniente definir um coeficiente de absorção adimensional  $\tilde{\alpha}_\nu = \alpha_\nu/k_p$ ,

vamos analisar somente para uma absorção fraca, isto é,  $\tilde{\alpha}_\nu \ll 1$ , portanto os primeiros termos relevantes dos coeficientes de espalhamento, monopolo e dipolo, são dados por (SILVA, 2014),

$$s_0 = 2(f_0 - 1)\tilde{\alpha}_\nu \frac{(k_0 a)^3}{3} - f_0^2 \frac{(k_0 a)^6}{9} - i f_0 \frac{(k_0 a)^3}{3}, \quad (93)$$

$$s_1 = 2 \frac{(f_0 - 1)\tilde{\alpha}_\nu (k_0 a)^5}{(\tilde{\rho}_p^{-1} + 2)^2} - f_1^2 \frac{(k_0 a)^6}{36} + i f_1 \frac{(k_0 a)^3}{6}, \quad (94)$$

onde  $\tilde{\rho}_p = \rho_p / \rho_0$ ,  $f_0$  e  $f_1$  são os fatores de monopolo e dipolo respectivamente, definidos por,

$$\begin{aligned} f_0 &= 1 - \frac{\rho_0 c_0^2}{\rho_p c_p^2}, \\ f_1 &= \frac{2(\rho_p - \rho_0)}{(2\rho_p + \rho_0)}. \end{aligned} \quad (95)$$

Como estamos considerando apenas a absorção fraca  $\tilde{\alpha}_\nu \ll 1$ , desconsideramos os termos  $\tilde{\alpha}_\nu^m$ , para  $m = 2, 3, \dots$  nas Eqs.(93) e (94).

## 3.2 FORÇA DE RADIAÇÃO ACÚSTICA NO REGIME DE RAYLEIGH

A partir da expansão de onda parcial dos campos incidente e espalhado, foi demonstrado que a força de radiação acústica exercida sobre uma partícula por um feixe com uma dependência de tempo harmônica é dada por (SILVA, 2011a),

$$\mathbf{F} = \frac{\pi a^2 \mathbf{I}_0}{c_0} \mathbf{Y}, \quad (96)$$

sendo  $\mathbf{I}_0 = p_0^2 / 2\rho_0 c_0$  a intensidade média e  $\mathbf{Y}$  o vetor da força de radiação adimensional com componentes cartesianas  $Y_x$ ,  $Y_y$  e  $Y_z$ . Podemos expressar esse vetor em termos dos coeficientes de forma do feixe  $a_n^m$  e dos coeficientes de espalhamento escalar  $s_n$  (SILVA et al., 2013). No regime de Rayleigh apenas os coeficientes  $s_0$  e  $s_1$  são relevantes (SILVA, 2014), com isso as componentes do vetor de força de radiação adimensional para esses coeficientes são dadas por (SILVA et al., 2013),

$$\begin{aligned} Y_x + iY_y &= \frac{i}{2\pi(k_0 a)^2} \left[ \sqrt{\frac{2}{3}} [(s_0 + s_1^* + 2s_0 s_1^*) a_0^0 a_1^{1*} + (s_0^* + s_1 + 2s_0^* s_1) a_0^{0*} a_1^{-1}] + \right. \\ &\quad \left. \sum_{m=-1}^1 \sqrt{\frac{(2+m)(3+m)}{15}} \times (s_1 a_1^m a_2^{m+1*} + s_1^* a_1^{-m*} a_2^{-m-1}) \right], \end{aligned} \quad (97)$$

$$Y_z = \frac{1}{\pi(k_0 a)^2} \text{Im} \left[ \sqrt{\frac{1}{3}} (s_0 + s_1^* + 2s_0 s_1^*) a_0^0 a_1^{0*} + \sum_{m=-1}^1 \sqrt{\frac{(2-m)(2+m)}{15}} s_1 a_1^m a_2^{m*} \right], \quad (98)$$

onde o símbolo \* representa o complexo conjugado e "Im" a parte imaginária. Perceba que é necessário o cálculo do momento de quadrupolo da onda incidente  $a_2^m$ .

Para obtermos a força de radiação acústica vamos substituir a Eq.(90) nas Eqs. (97) e (98), e ainda vamos fazer uso da seguinte relação,

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_i = \frac{ik_0}{\rho_0 c_0} p_i, \quad (99)$$

onde a mesma foi derivada das Eqs. (32) e (36), logo, encontramos a força de radiação,

$$\mathbf{F} = -\frac{2\pi}{k_0^2 c_0} \text{Re} \left[ \frac{3is_1}{k_0} \rho_0 c_0 \mathbf{v}_i(\mathbf{0}) \cdot \nabla \mathbf{v}_i + (s_0 + 2s_0 s_1^*) p_i(\mathbf{0}) \mathbf{v}_i^*(\mathbf{0}) \right] \quad (100)$$

onde "Re" significa a parte real, note que estamos calculando os campos acústicos para o centro da partícula  $\mathbf{r} = \mathbf{0}$ , considerando a identidade,

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i^* = \mathbf{v}_i \cdot \nabla \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i^* + \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i^* (\nabla \cdot \mathbf{v}_i), \quad (101)$$

e substituindo a Eq.(99) na mesma, a força de radiação acústica Eq. (100) se torna,

$$\mathbf{F} = -\frac{2\pi}{k_0^2 c_0} \text{Re} \left[ \frac{3i\rho_0 c_0 s_1}{k_0} \nabla \cdot \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i^*(\mathbf{0}) + (s_0 + 3s_1 + 2s_0 s_1^*) p_i(\mathbf{0}) \mathbf{v}_i^*(\mathbf{0}) \right]. \quad (102)$$

Fazendo uso da relação (WESTERVELT, 1951),

$$\text{Re}[\nabla \cdot \rho_0 \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i^*] = \nabla \left( \frac{\rho_0 |\mathbf{v}_i|^2}{2} - \frac{|p_i|^2}{2\rho_0 c_0^2} \right) \quad (103)$$

na Eq. (102) junto com as Eqs. (93) e (94) chegamos na equação geral para a força de radiação acústica, com as contribuições da força gradiente, força de espalhamento e força de absorção (SILVA, 2014). Para o nosso estudo vamos analisar somente a força gradiente, pois estamos considerando uma onda estacionária formada a partir dos módulos de ressonância da microcavidade e para ondas estacionárias as contribuições de espalhamento e absorção são nulas (NETO et al., 2015), assim força de radiação para uma onda estacionaria no regime de Rayleigh é,

$$\mathbf{F}_{\text{rad}} = -\nabla U_{\text{rad}} \quad (104)$$

onde

$$U_{\text{rad}} = \pi a^3 \left( f_0 \frac{|p_i|^2}{3\rho_0 c_0^2} - f_1 \frac{\rho_0 |\mathbf{v}_i|^2}{2} \right) \quad (105)$$

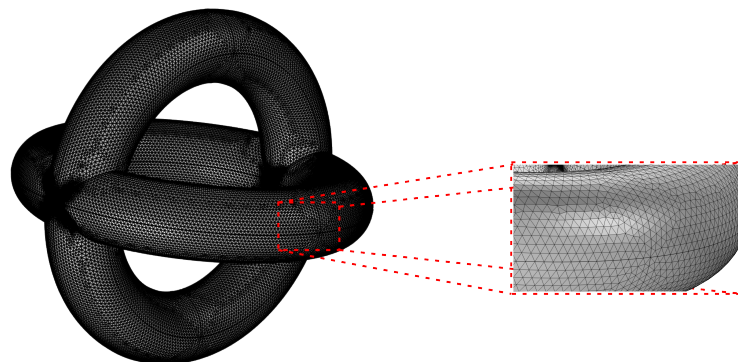
é a função potencial da força de radiação, que foi derivada pela primeira vez por Gorkov (1962) como foi falado acima, ela corresponde a componente conservativa da força.

No próximo capítulo vamos descrever o modelo numérico, utilizado para calcular os campos acústicos e consequentemente a força de radiação acústica para um dispositivo de acustofluidica formado por uma microcavidade cilíndrica.

## 4 MODELO NUMÉRICO

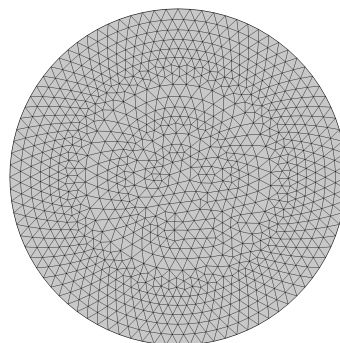
A maioria dos fenômenos físicos podem ser descritos em termos das equações diferenciais parciais (EDPs), no capítulo 2 (Veja Cap. 2) descrevemos os fenômenos que são abordados nesse trabalho por meios das EDPs, contudo a solução analítica dessas equações, por muitas vezes, são complexas e limitadas para algumas geometrias específicas. Diante disto, as aproximações numéricas têm se tornado uma ótima alternativa. Essas aproximações normalmente são desenvolvidas por diferentes tipos de discretizações. Desse modo, nesse capítulo vamos apresentar o modelo numérico montado no software COMSOL Multiphysics<sup>®</sup>, que faz uso do método de elementos finitos (MEF), onde o mesmo discretiza os domínios para resolver as equações do modelo numérico, chegando assim em soluções aproximadas, para as EPDs. (COMSOL, 2016).

Figura 6 – Exemplo de discretização 3D no COMSOL Multiphysics<sup>®</sup>



Fonte: O autor, 2021

Figura 7 – Discretização 2D



Fonte: O autor, 2021

O método de elementos finitos apresenta uma vasta variabilidade em discretização. A partir disso, podemos simplificar domínios mais complexos (figura 6), e também obter soluções descritas por funções mais simples (figura 7). Nesse trabalho, não vamos fazer uma descrição detalhada do MEF utilizado pelo COMSOL, contudo no trabalho de Everton Brito (LIMA et al., 2019) há uma apresentação completa da descrição desse método. Aqui, vamos focar em apresentar como o modelo numérico foi construindo, explicando cada etapa da simulação.

## 4.1 DESCRIÇÃO DO MODELO NUMÉRICO

O COMSOL é um software capaz de acoplar várias físicas em um mesmo modelo, sendo assim, em uma única simulação podemos trabalhar com eletromagnetismo, acústica, termodinâmica entre outras, dessa forma, conseguimos simular o mais próximo da realidade, contudo sempre temos algumas limitações sendo elas de hardware ou do próprio software.

No COMSOL, primeiro definimos em qual dimensão espacial a simulação será montada, para esse trabalho usamos *2D Axisymmetric*, pois estamos simulando dispositivos cilíndricos que possuem simetria axial. O software COMSOL é dividido em módulos, tais como *Acoustics*, *Optics*, *Fluid flow*, entre outros. Dentro de cada módulo tem as físicas relacionadas a ele, então, para esse trabalho escolhemos as seguintes físicas, seguindo as equações que foram apresentadas no capítulo 2:

- *Thermoviscous Acoustics*
- *Solid Mechanics*
- *Electrostatics*

Nas próximas seções, vamos descrever como cada física é responsável por controlar um conjunto de equações e condições de contorno para cada domínio da simulação. Por último escolhemos o tipo de estudo que vai ser feito na simulação, nesse caso escolhemos:

- *Frequency Domain*.

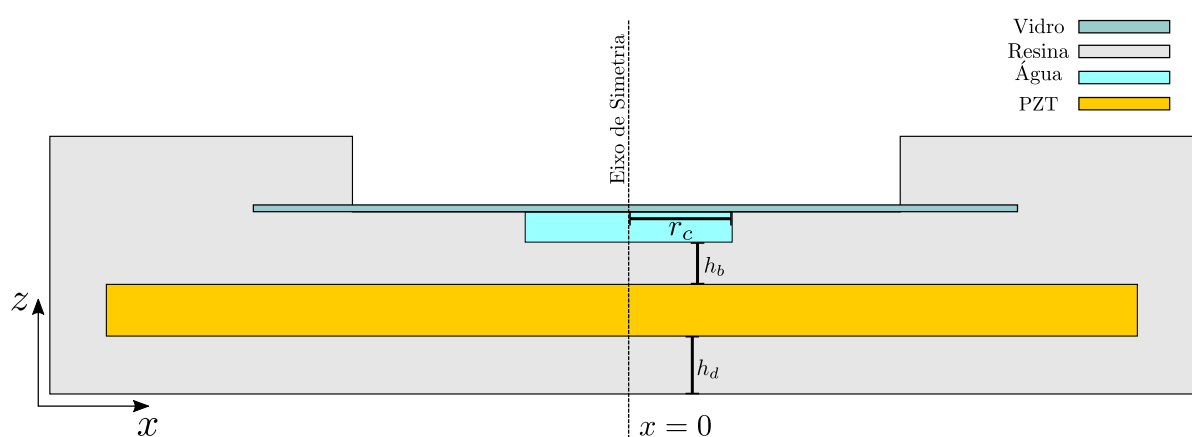
Assim resolvendo a equação de Helmholtz para o domínio da frequência.

### 4.1.1 Parâmetros e Geometria

O próximo passo do modelo é definir a geometria do nosso problema, no caso o dispositivo cilíndrico acústico, e especificar o domínio de cada material, então, a figura 8 mostra a geometria

do dispositivo em uma seção transversal no plano  $zx$ , onde  $z$  é o eixo de simetria e também nos traz a distribuição dos materiais.

Figura 8 – Geometria e distribuição de materiais do dispositivo, sendo  $z$  o eixo de simetria utilizado no COMSOL para obter os resultados em 3 dimensões. Com  $r_c$  sendo o raio da cavidade,  $h_b$  altura da base da cavidade e  $h_d$  altura da base do dispositivo.



Fonte: O autor, 2021

É importante lembrar que não estamos simulando os canais de entrada e saída do fluido no dispositivo, mas somente a cavidade no interior do mesmo, pois ao adicionar os canais perderíamos a simetria axial, como isso teríamos que usar um modelo 3D no qual o gasto computacional é bastante elevado, assim inviabilizando a simulação numérica.

Em seguida vamos apresentar os parâmetros utilizados no modelo, como a simulação é complexa envolvendo diferentes materiais, vamos dividir a tabela 2 em parâmetros globais e por material. Para que o modelo numérico se aproxime mais da realidade do experimento físico, precisamos que os parâmetros da tabela 2 tenham uma boa concordância com a realidade, então, para isso procuramos sempre buscar referências para os parâmetros apresentados. Para a água usamos os parâmetros cedidos pelo COMSOL, os quais estão de acordo com a literatura. Tanto para o vidro utilizado para vedar a cavidade (figura 8), quanto para a partícula de poliestireno que usamos para calcular a força de radiação acústica, utilizamos os parâmetros de Di Xu (XU et al., 2019), que também faz um estudo de cavidade cilíndrica, mas utilizando outros materiais no dispositivo. Na resina da impressora 3D, usada para a construção do dispositivo, fizemos uso dos parâmetros de Krisztian Fuzesi (FÜZESI; GYÖNGY, 2017), que fez uma caracterização das propriedades físicas de diferentes tipo de materiais para impressão 3D. Por fim, utilizamos cerâmicas piezoelétricas do tipo PTZ-5H, com uma frequência de ressonância entre 3.2 MHz a 3.6 MHz, onde novamente usamos as propriedades disponíveis no software.

Tabela 2 – Parâmetros utilizado na simulação computacional

| Parâmetros Globais                        | Valor/unidade                     |
|-------------------------------------------|-----------------------------------|
| Frequência                                | 3.4 MHz                           |
| Raio da cavidade                          | 2.2 mm                            |
| Altura da cavidade                        | 250 $\mu\text{m}$                 |
| Raio do dispositivo                       | 17.5 mm                           |
| Raio do PZT-5H                            | 12.5 mm                           |
| Altura do PZT-5H                          | 700 $\mu\text{m}$                 |
| Tensão aplicada                           | 5 V                               |
| Parâmetros fluido (Água)                  |                                   |
| Densidade                                 | 998 $\text{kg m}^{-3}$            |
| Velocidade do som                         | 1481 $\text{m s}^{-1}$            |
| Bulk Modulus                              | 2.189 GPa                         |
| Viscosidade dinâmica                      | 1.002 $\text{mPa} \cdot \text{s}$ |
| Compressibilidade isentrópica             | 0.4477 $\text{nPa}^{-1}$          |
| Parâmetros partícula (poliestireno)       |                                   |
| Raio                                      | 5 $\mu\text{m}$                   |
| Densidade                                 | 1050 $\text{kg m}^{-3}$           |
| Velocidade do som                         | 2170 $\text{m s}^{-1}$            |
| Velocidade de cisalhamento do som         | 1100 $\text{m s}^{-1}$            |
| Bulk Modulus                              | 3.2503 GPa                        |
| Parâmetros vidro                          |                                   |
| Densidade                                 | 2600 $\text{kg m}^{-3}$           |
| Velocidade do som                         | 5521 $\text{m s}^{-1}$            |
| Velocidade de cisalhamento do som         | 3449 $\text{m s}^{-1}$            |
| Parâmetros resina 3D                      |                                   |
| Densidade                                 | 1107 $\text{kg m}^{-3}$           |
| Velocidade do som                         | 2136.6 $\text{m s}^{-1}$          |
| Velocidade de cisalhamento do som         | 890 $\text{m s}^{-1}$             |
| Coefficiente de atenuação longitudinal    | 29.4734 $\text{Np m}^{-1}$        |
| Coefficiente de atenuação de cisalhamento | 200 $\text{Np m}^{-1}$            |

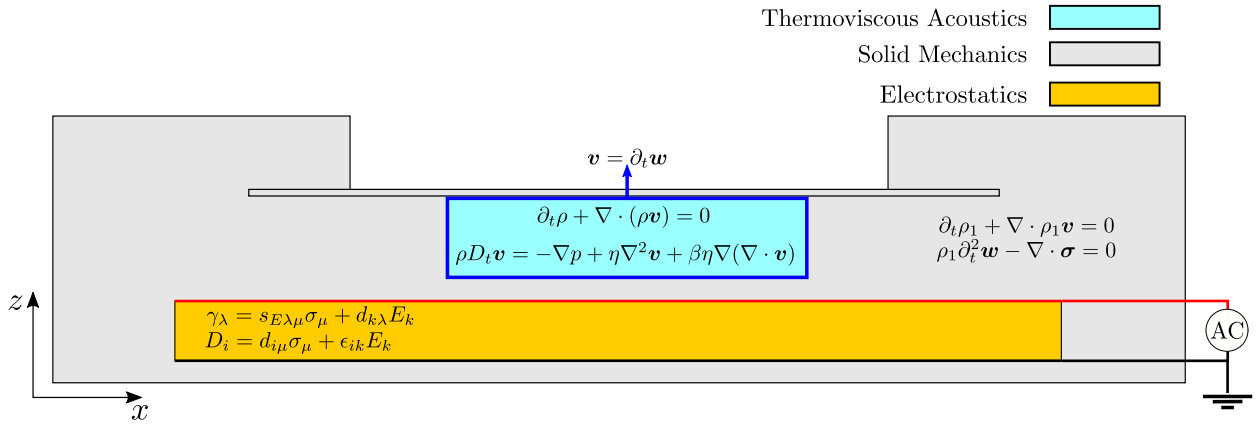
#### 4.1.2 Distribuição das físicas no modelo

Depois de ter adicionado os parâmetros e os materiais no modelo, vamos especificar o domínio de cada física, a figura 9 mostra essa especificação e o domínio das principais equações descritas no capítulo 2.

*Thermoviscous Acoustics* é responsável por controlar as equações do fluido viscoso, as equações de conservação da massa Eq.(8) e conservação do momento Eq.(19), descrevem a dinâmica do fluido, as derivadas temporais são resolvidas para o domínio da frequência, ou seja, com campos harmônicos.

No modelo utilizamos a seguinte condição de contorno na interface fluido/sólido (linha

Figura 9 – Distribuição das físicas e as principais equações do modelo, seguindo o que foi apresentado no capítulo 2



Fonte: O autor, 2021

azul na figura 9),

$$\mathbf{v} = \partial_t \mathbf{w} \quad (106)$$

onde  $\mathbf{v}$  é a velocidade total do fluido e  $\mathbf{w}$  o deslocamento no sólido, com essa condição temos que o campo de deslocamento é contínuo. Em relação a parte térmica do modelo usamos a condição adiabática, com isso temos que a microcavidade está isolada termicamente da resina, utilizamos essa condição pois a variação da temperatura da cerâmica piezoelétrica é pequena para baixas tensões aplicadas e a resina apresenta um bom isolamento térmico.

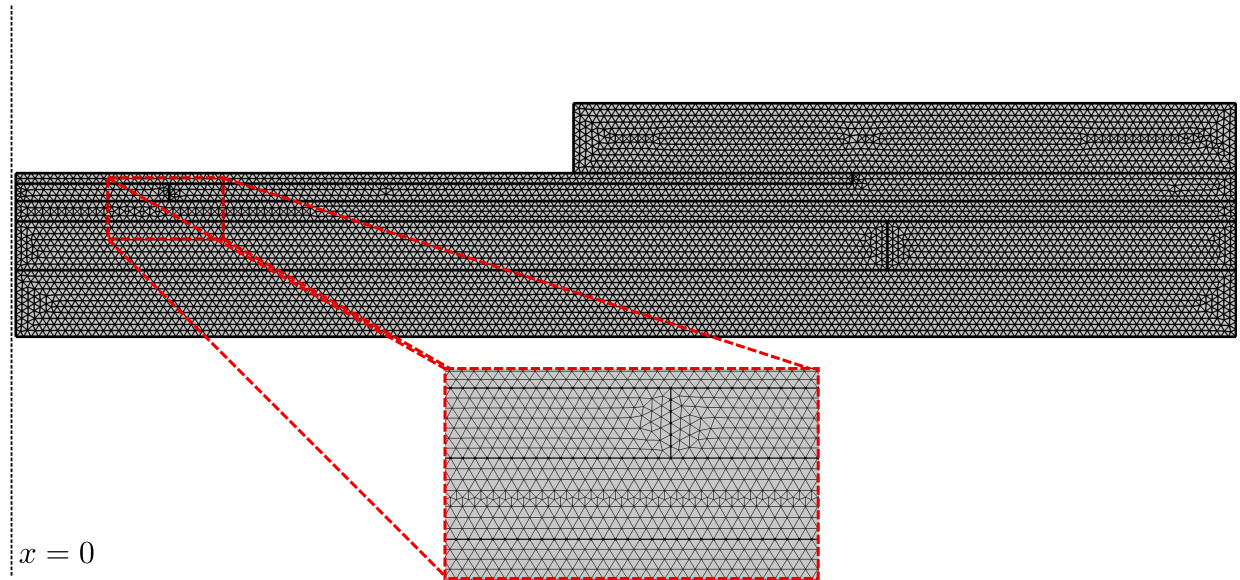
O *Solid Mechanics* controla as equações e condições de contorno nos sólidos da simulação, semelhante ao fluido temos as equações de conservação da massa Eq. (63) e conservação do momento Eq. (68), para descrever a dinâmica no sólido. Todos os materiais sólidos são envolvidos por essa física, inclusive a cerâmica piezoelétrica, entretanto precisamos adicionar a condição de material piezoelétrico para que o software considere as equações de piezoeletricidade descritas na seção 2.6. Finalmente, usamos o *Electrostatics* para aplicar a diferença de potencial na cerâmica piezoelétrica PZT-5H, a figura 9 mostra o esquema do circuito, aplicamos uma tensão alternada de 5V, pois temos como intuito que esse dispositivo seja móvel, com isso ele possa ser ligado em um circuito simples alimentado por uma fonte pequena, como a de carregadores de celulares.

Com a simulação montada começamos a fazer inúmeros estudos da frequência de ressonância do dispositivo, sendo esses, estudos paramétricos, para chegarmos nas melhores configurações de aprisionamento.

## 4.2 CONVERGÊNCIA DE MALHA E CARGA COMPUTACIONAL

Outra parte de suma importância para a validação do modelo numérico é a análise de convergência de malha. A figura 10, exportada diretamente do COMSOL Multiphysics®, apresenta a discretização dos elementos do modelo. O COMSOL permite a escolha de diferentes geometrias para a discretização da malha, nesse trabalho escolhemos a geometria triangular a qual melhor se adapta a geometria do problema (veja a figura 10). Perceba que a malha utilizada é bastante densa, pois é necessário para o cálculo dos campos acústicos.

Figura 10 – Discretização da malha no modelo, onde o zoom foi utilizado para a melhor visualização da geometria dos elementos.



Fonte: O autor, 2021

Para o cálculo da convergência da malha, ou erro numérico, usamos o potencial da força de radiação Eq. (105) como variável na equação definida por

$$Erro(\%) = 100 \sqrt{\frac{\int (U_{rad}(n) - U_{rad}^{ref})^2 d^3\mathbf{r}}{\int (U_{rad}^{ref})^2 d^3\mathbf{r}}} \quad (107)$$

fizemos esse cálculo somente no domínio da microcavidade, com  $n$  sendo um número inteiro maior que zero, utilizado como denominador para definir o tamanho máximo de elemento da malha na seguinte equação,

$$Mesh_{max} = \frac{\lambda}{n} \quad (108)$$

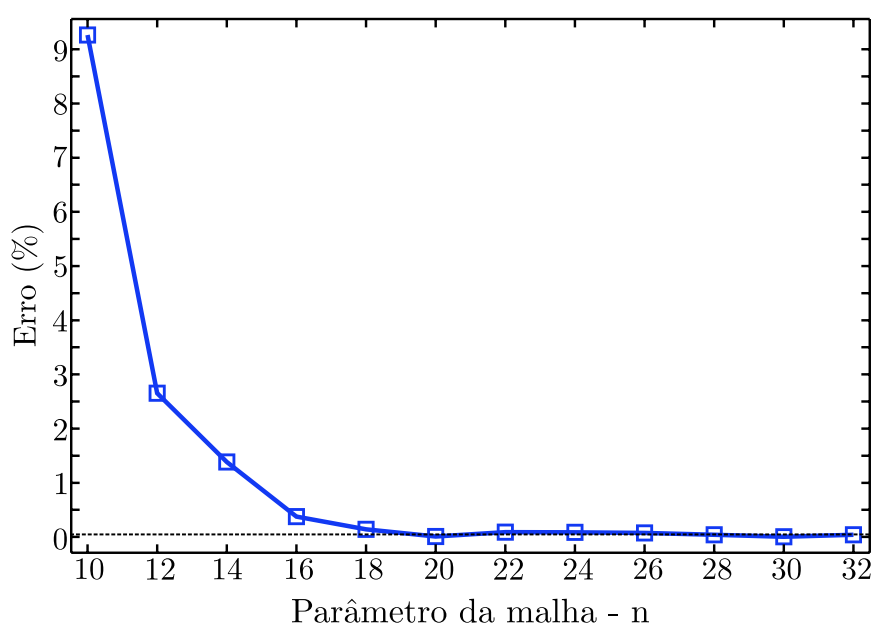
$\lambda$  é o comprimento de onda na água. A figura 11 plota o gráfico de convergência a partir da Eq. (107). Os resultados que serão apresentados no capítulo seguinte, foram obtidos para  $n = 28$ , que apresenta um erro inferior a 0.1%, portanto a partir da figura 11 podemos observar que o modelo apresentou uma convergência de malha satisfatória.

#### 4.2.1 Carga computacional

Todas as simulações referentes ao modelo foram feitas em um desktop com sistema operacional Windows 10 (64 bits) equipado com processador Intel i5-9400 CPU @ 2.90 GHz, 24GB de memória RAM DDR4 (2133 MHz).

A simulação leva cerca de 1 minuto para rodar na máquina citada acima, utilizando aproximadamente 20 GB de memória RAM, isso para  $n = 28$  que é o valor que adotamos seguindo o gráfico da figura 11 como foi falado acima, sendo esse um bom tempo e um gasto computacional aceitável para um o erro bastante pequeno.

Figura 11 – Gráfico de convergência do modelo, onde a linha tracejada se refere ao valor usado na simulação.



Fonte: O autor, 2021

No próximo capítulo vamos apresentar os principais resultados do modelo numérico descrito ao longo desse capítulo.

## 5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Aqui, vamos apresentar os resultados do modelo numérico. Antes da produção desse trabalho fizemos alguns testes preliminares em relação a simulação de dispositivo de microfluídica e percebemos uma boa concordância com os resultados experimentais. Porém, julgamos necessário otimizar essa simulação para conseguirmos um plano de levitação mais estável e maior amplitude da força de radiação, para isso fizemos diversos estudos paramétricos de dimensões específicas do dispositivo, na próxima seção vamos apresentar esses resultados, no qual usamos para definir a melhor configuração de dispositivo.

### 5.1 ESTUDOS PARAMÉTRICOS

Como objetivo é otimizar o dispositivo, e também entender quais parâmetros da geometria iriam contribuir para a alteração dos campos de pressão e velocidade, no interior da microcavidade, então, decidimos estudar três parâmetros específicos do dispositivo sendo eles: Raio da cavidade ( $r_c$ ), altura da base da cavidade ( $h_b$ ) e altura da base do dispositivo ( $h_d$ ) que estão dispostos na figura 8, para fazer a análise desses parâmetros, vamos usar a densidade de energia acústica média  $E_{ac}$  como referência, dada por (GENG et al., 2020),

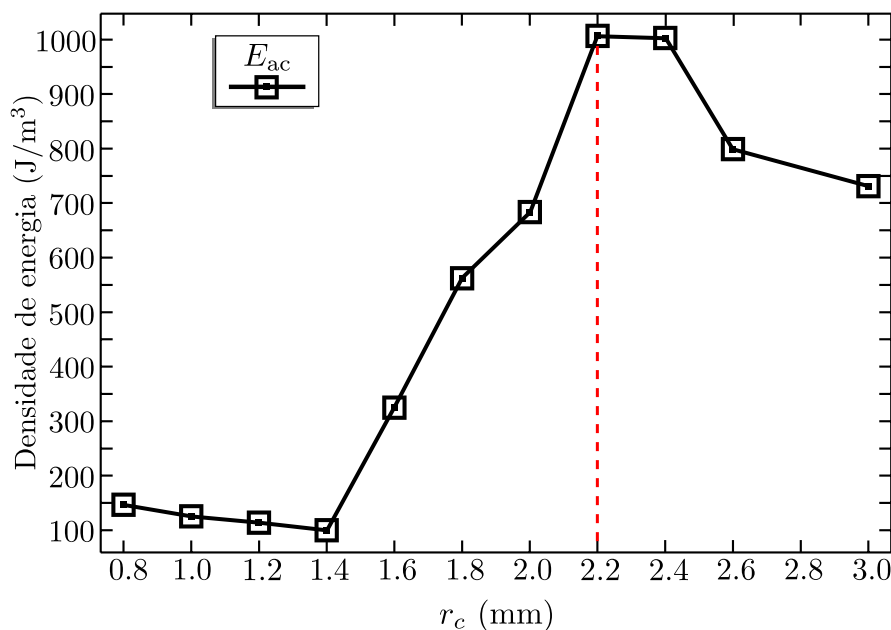
$$E_{ac} = \frac{1}{V_c} \int_{V_c} \left[ \frac{1}{2} k_s |p_i|^2 + \frac{1}{2} \rho_0 |\mathbf{v}_i|^2 \right] dV_c \quad (109)$$

Sendo  $k_s$  e  $\rho_0$  a compressibilidade isentrópica e a densidade da água respectivamente (veja a tabela 2), e  $V_c$  é o volume da cavidade, escolhemos a densidade de energia como fator de qualidade para os estudos paramétricos, visto que ela é proporcional a força de radiação acústica, portanto se tivermos uma boa densidade de energia por volta de  $1000 \text{ J m}^{-3}$  teremos uma boa força de radiação e consequentemente um bom plano de aprisionamento.

A figura 12 apresenta o gráfico do primeiro estudo, onde fizemos a densidade de energia  $E_{ac}$  em comparação com o raio da cavidade  $r_c$ , escolhemos esse parâmetro, pois queríamos saber o quanto interfere na estabilidade do plano de levitação, e como a densidade de energia se comportava, então, pegamos valores de 0.8 mm até 3.0 mm e fizemos uma varredura de frequência 3.2-3.6 MHz pagando o maior valor de  $E_{ac}$  para cada valor diferente de raio dentro dessa varredura de frequência. Percebemos que para esse range de frequência o gráfico apresenta um comportamento, temos um pico para 2.2 mm (marcado com linha trastejada) de raio e depois começa a decair, mas para valores entre 2 mm e 2.4 mm apresentam bons valores da energia da cavidade, sendo assim pra produção em impressora 3D, esse resultado é satisfatório pois estamos

dentro do erro da impressão, ou seja, mesmo que o dispositivo não saia igual a simulação ainda teremos uma boa cavidade para aprisionamento.

Figura 12 – Densidade de energia acústica média  $E_{ac}$ , para diferentes raios da cavidade  $r_c$ , a linha tracejada vermelha marca o melhor resultado, para um range de frequência 3.2-3.6 MHz.



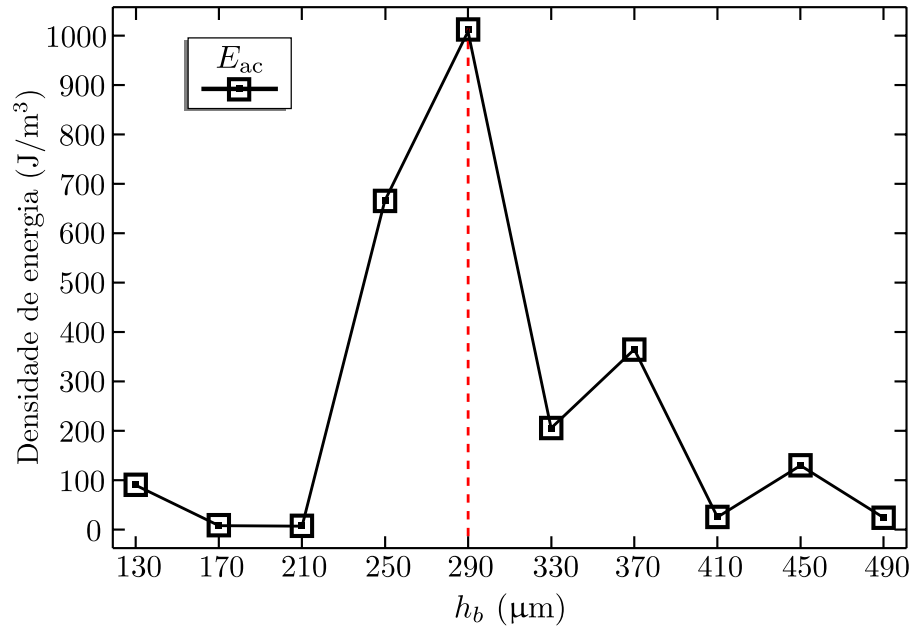
Fonte: O autor, 2021

Para a o segundo parâmetro, temos um resultado diferente, quando fizemos o estudo da altura da base da cavidade  $h_b$  (veja a figura 8), percebemos que para pequenas alterações nessa altura a densidade de Energia  $E_{ac}$  sofria altas variações como mostra a figura 13.

Uma das possibilidades desse comportamento é porque agora estamos fazendo alterações em  $z$ , que é o eixo de propagação da onda gerada pelo PZT-5H, dessa forma, o sistema se torna mais sensível, isso de certa maneira já era esperado, contudo dificulta para a fabricação em impressão 3D, pois qualquer variação de cerca de  $40\ \mu m$  na altura da base da cavidade  $h_b$ , o resultado final sofre alteração, contudo ainda conseguimos um bom resultado para  $290\ \mu m$ .

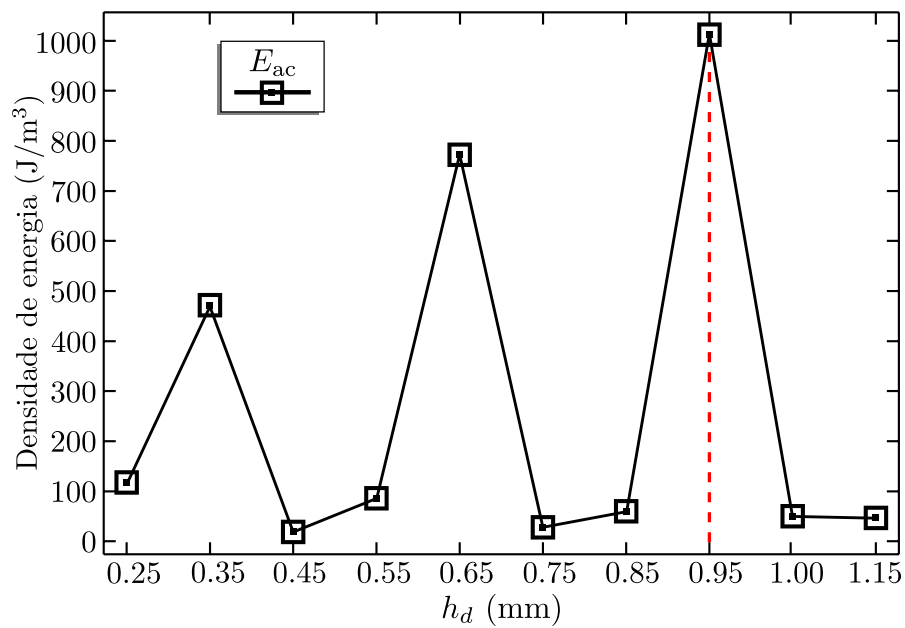
O último estudo paramétrico foi para a altura da base do dispositivo  $h_d$ , como vimos que fazer modificações no eixo  $z$ , altera bastante a densidade de energia da cavidade, decidimos ver se o mesmo aconteceria alterando a camada de resina usada para fechar o dispositivo, e como era esperado tivemos um resultado similar ao da figura 13, como podemos ver no gráfico da figura 14, contudo duas alturas tiveram um resultado aceitável, sendo elas  $0.65\ mm$  e  $0.95\ mm$ , entretanto se pegarmos valores entre esse dois, teremos um resultado bastante abaixo do esperado, isso acontece, pois estamos em range específico de frequência 3.2-3.6 MHz, então é bem provável

Figura 13 – Densidade de energia acústica média  $E_{ac}$ , comparado com diferentes alturas da base da cavidade  $h_b$ , a linha pontilhada vermelha marca o melhor resultado, em um range de frequência 3.2-3.6 MHz.



Fonte: O autor, 2021

Figura 14 – Densidade de energia acústica média  $E_{ac}$ , para diferentes alturas da base do dispositivo  $h_d$ , a linha pontilhada vermelha marca o melhor resultado, para um range de frequência 3.2-3.6 MHz.



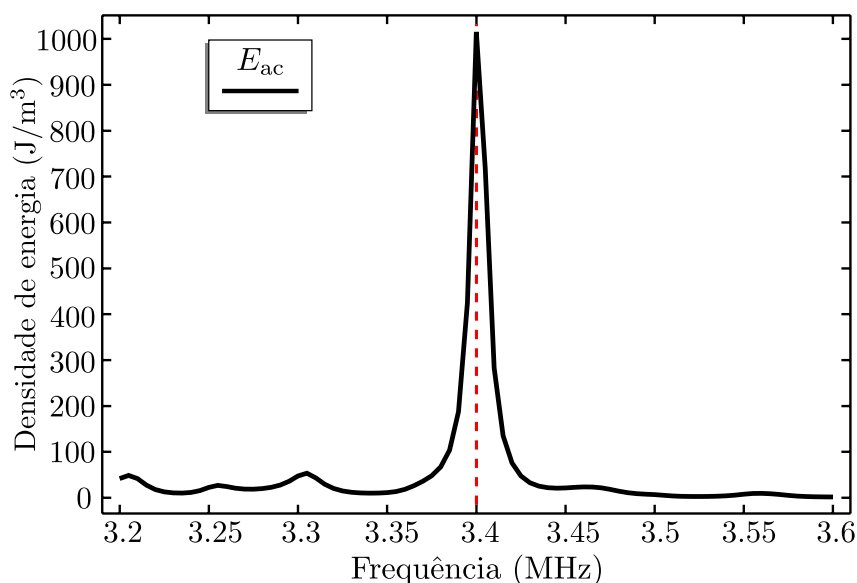
Fonte: O autor, 2021

que para essa altura a ressonância da cavidade, que é quando temos um pico na densidade de energia, esteja em outro range de frequência, diferente do nosso PZT-5H.

## 5.2 ESTUDO DA MELHOR CONFIGURAÇÃO PARA O DISPOSITIVO

A partir dos resultados dos estudos paramétricos apresentados na seção anterior, montamos a melhor configuração (linha trastejada vermelha nos gráficos da seção anterior) para o dispositivo acoustofluidico. Nessa seção vamos caracterizar esse dispositivo. Primeiro fizemos o estudo da ressonância da cavidade do dispositivo, a figura 15 mostra a densidade de energia acústica para diferentes frequências, o gráfico tem um pico de  $1003.2 \text{ J m}^{-3}$  para a frequência de 3.4 MHz, sendo essa a frequência de ressonância do dispositivo, a qual vamos usar para os plots de potencial e força de radiação acústica.

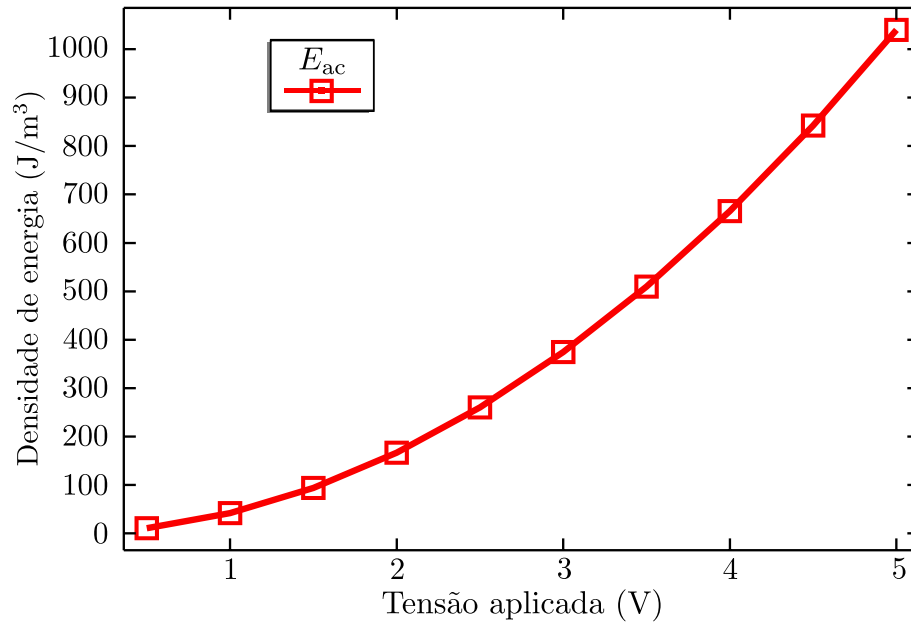
Figura 15 – Densidade de energia acústica média  $E_{ac}$ , para diferentes frequências, sendo 3.4 MHz a frequência de ressonância da cavidade



Fonte: O autor, 2021

Para comprovarmos a boa eficiência do dispositivo, plotamos um gráfico da tensão aplicada de pico a pico no PZT-5H versus a densidade de energia figura 16, a densidade de energia é proporcional a tensão aplicada, veja que para 5 V temos valor bem satisfatório para a densidade de energia.

Figura 16 – Densidade de energia acústica média  $E_{ac}$  versus a tensão aplicada



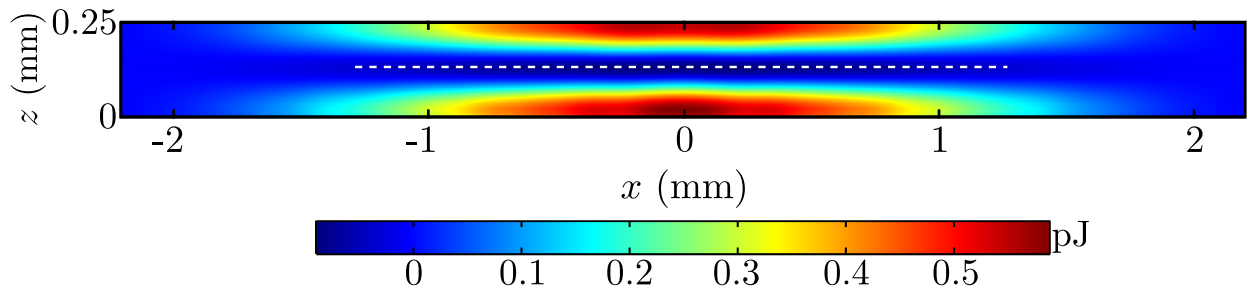
Fonte: O autor, 2021

### 5.2.1 Potencial e Força de Radiação Acústica

Por meio do potencial de força de radiação, podemos determinar se ocorre o aprisionamento da partícula da cavidade do dispositivo, a figura 17 mostra o potencial da força de radiação Eq. (105), para uma partícula de poliestireno (veja a tabela 2) no plano  $zx$  da cavidade, lembrando que essa cavidade tem 2.2 mm de raio e altura de 250  $\mu\text{m}$ , o plano de aprisionamento ocorre na região de mínimo potencial (azul escuro), a linha tracejada marca o plano, percebe-se que o plano é bem definido e tem cerca de 1 mm de raio, sendo o ótimo resultado para manipulação de partícula, tivemos um potencial máximo de 0.67 pJ (vermelho escuro) para uma tensão 5 V de pico a pico.

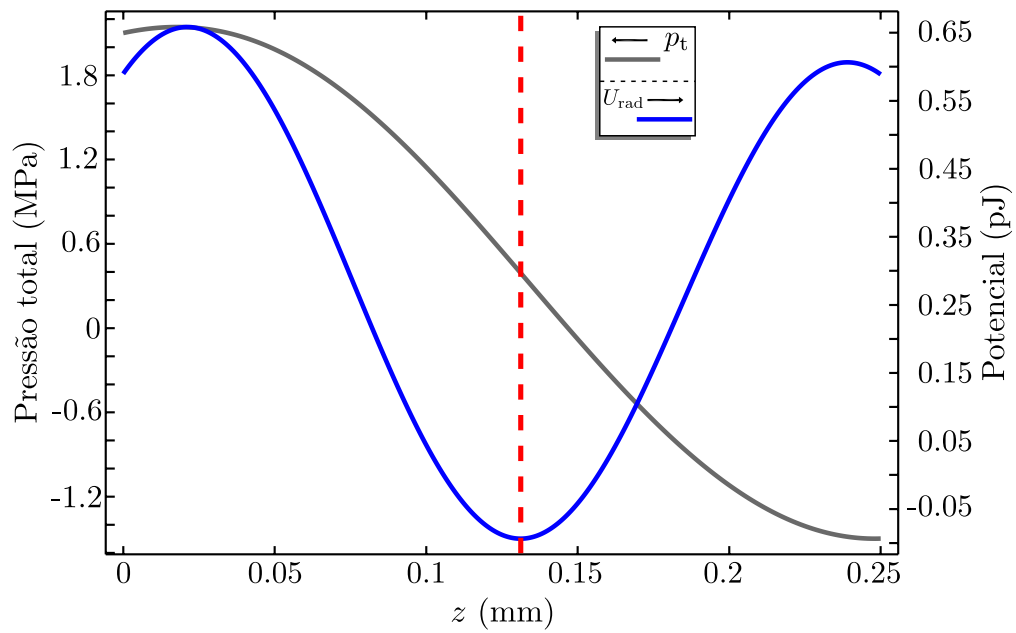
Para obter a altura do plano de levitação plotamos o potencial de força de radiação Eq. (105) ao longo do eixo  $z$  em  $x = 0$ , como mostra a figura 18, a linha tracejada marca o plano de levitação em 130  $\mu\text{m}$  em relação à base da cavidade, o poço de potencial está bem definido caracterizando uma boa armadilha de aprisionamento. A figura 18, também mostra a pressão total ( $p_t$ ), plotada a partir da solução da equação de Helmholtz Eq.(49), ao longo do eixo  $z$ , percebe-se que o ponto de aprisionamento está na região do nó de pressão da onda estacionária criada a partir dos modos de ressonância da cavidade, como era esperado pela literatura (LENSHOF et al., 2012), o ponto de aprisionamento não está exatamente no nó de pressão, pois não estamos lidando como uma cavidade perfeita, ou seja, com condições de contorno ideais.

Figura 17 – Potencial da força de radiação  $U_{\text{rad}}$  no plano  $zx$  da cavidade, onde a região de mínimo potencial (azul escuro) caracteriza a região de aprisionamento, a linha pontilhada demarca essa região.



Fonte: O autor, 2021

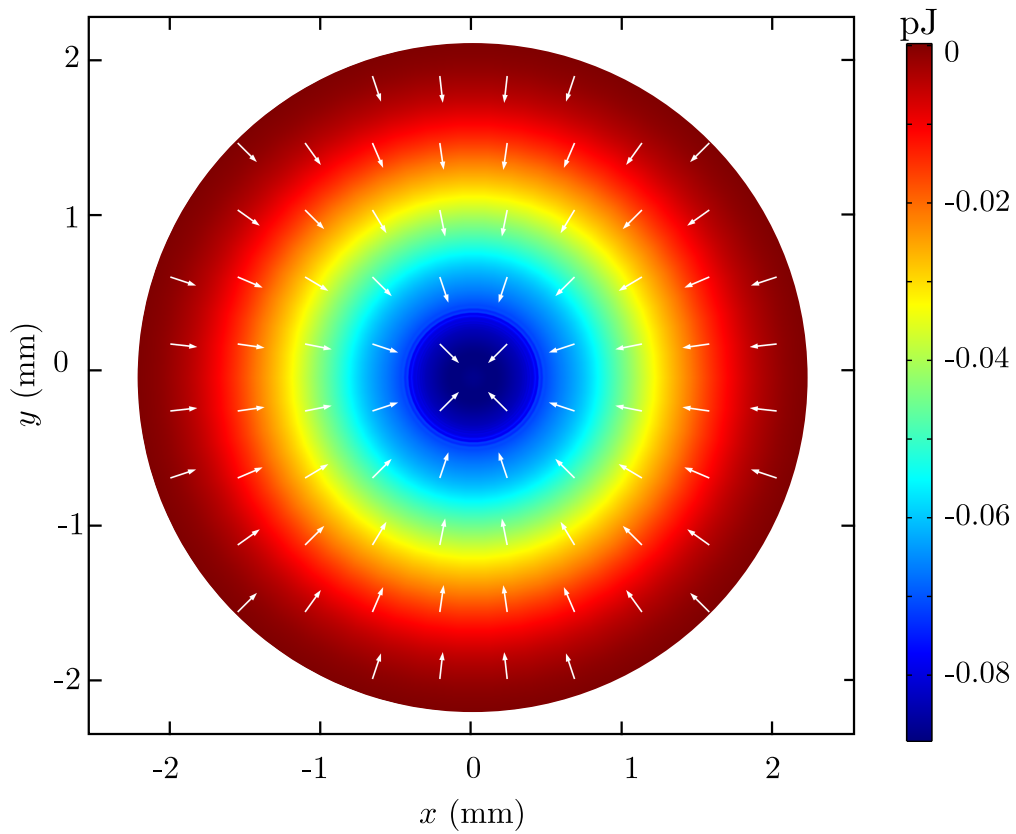
Figura 18 – Pressão total ( $p_t$ ) (curva cinza) e potencial da força de radiação  $U_{\text{rad}}$  (curva azul) ao longo do eixo  $z$  para  $x = 0$ , a linha trasejada marca a altura do plano de levitação.



Fonte: O autor, 2021

A partir da figura 18, plotamos o potencial  $U_{\text{rad}}$ , no plano  $xy$  na altura do plano de levitação, como mostra a figura 19, a região de aprisionamento se encontra localizada no centro da cavidade, as setas brancas apresentam a sentido da força de radiação acústica Eq. (104) na direção radial, percebamos que todas a setas estão apontadas para centro cavidade, ou seja, para a região de aprisionamento.

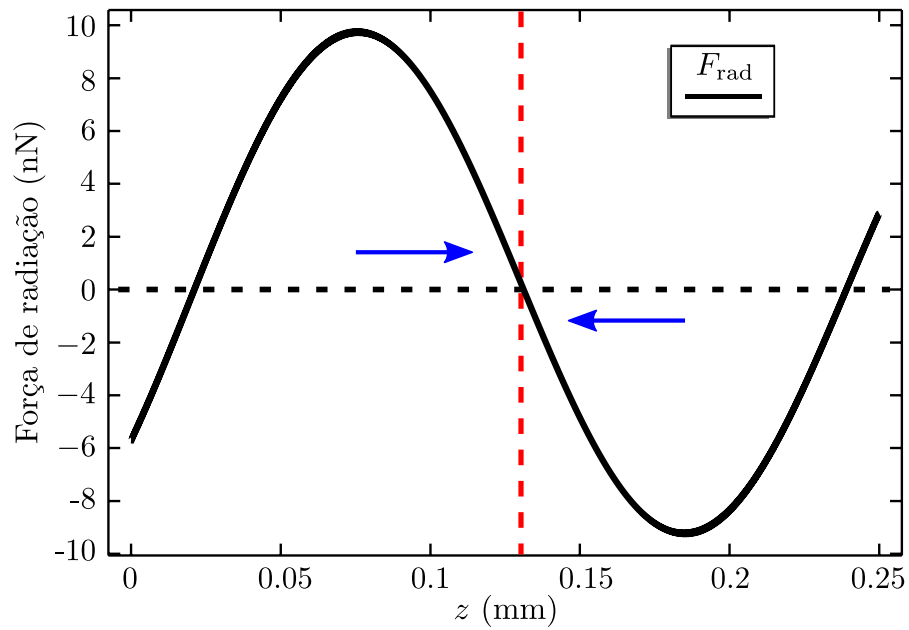
Figura 19 – Potencial da força de radiação  $U_{\text{rad}}$ , no plano  $xy$  para  $z = 0.13$  mm, as setas brancas apontam o sentido da força de radiação  $F_{\text{rad}}$  na direção radial.



Fonte: O autor, 2021

Outro gráfico importante é apresentado na figura 20 que mostra a força de radiação  $F_{\text{rad}}$  Eq. (104) ao longo do eixo  $z$ , onde as setas azuis representam o sentido da força, tivemos uma força máxima de 9.7 nN, que é um ótimo resultado comparado a outros modelos numéricos para dispositivo de microfluídica, como o do trabalho de Di Xu (2019), o ponto de aprisionamento acontece em  $z = 0.13$  mm, quando a linha pontilhada vermelha encontra a curva da  $F_{\text{rad}}$ .

Figura 20 – Força de radiação  $F_{\text{rad}}$  ao longo do eixo  $z$ , onde as setas azuis representam o sentido da força



Fonte: O autor, 2021

## 6 Conclusão

Esse trabalho tinha como objetivo principal estudar numericamente um dispositivo acustoflídico com microcavidade cilíndrica pra aplicação em microfluídica, por meio da descrição das equações diferenciais de um fluido viscoso, sólido viscoelástico e para materiais piezoelétricos, conseguimos montar um modelo numérico no software COMSOL Multiphysics®, para estudarmos a geometria do dispositivo, através do estudo da densidade de acústica média da microcavidade em comparação a geometria do dispositivo, conseguimos desenvolver um dispositivo, com densidade de energia de aproximadamente  $1000 \text{ J m}^{-3}$ . Por meio da força de radiação acústica para uma partícula de poliestireno, mostramos que o nosso dispositivo apresenta um plano de aprisionamento na altura de  $130 \mu\text{m}$  em relação a base da microcavidade.

Mostramos que é possível montar um dispositivo para manipulação de partículas, por meio da impressão 3D, pois conseguimos um bom padrão de aprisionamento, um plano de levitação estável, boas intensidades em relação a densidade de energia acústica e a força de radiação comparadas com a literatura, sendo esse um ótimo resultado para área de acustofluídica, visto que, as impressoras 3D tem se tornado cada vez mais acessíveis, o custo para produzir um dispositivo acustoflídico de qualidade para aplicações em biomedicina deve cair consideravelmente.

Em conclusão, por meio desse trabalho podemos começar as observações experimentais de aprisionamento de partículas de poliestireno. Tendo como perspectivas para trabalhos futuros, começar estudo numérico de aprisionamento de células vermelhas em dispositivos cilíndricos fabricado por impressão 3D, e modelagem de micro-misturadores para aplicação em microfluídica.

## REFERÊNCIAS

- BODÉ, W. N.; BRUUS, H. Numerical study of the coupling layer between transducer and chip in acoustofluidic devices. **The Journal of the Acoustical Society of America**, Acoustical Society of America, v. 149, n. 5, p. 3096–3105, 2021.
- BRUUS, H. **Theoretical microfluidics**. [S.l.]: Oxford university press Oxford, 2008. v. 18.
- COMSOL. **The Finite Element Method (FEM)**. 2016. Disponível em: <<https://br.comsol.com/multiphysics/finite-element-method>>. Acesso em: 10 maio 2021.
- DUAL, J.; MÖLLER, D. Acoustofluidics 4: Piezoelectricity and application in the excitation of acoustic fields for ultrasonic particle manipulation. **Lab on a Chip**, Royal Society of Chemistry, v. 12, n. 3, p. 506–514, 2012.
- DUAL, J.; SCHWARZ, T. Acoustofluidics 3: Continuum mechanics for ultrasonic particle manipulation. **Lab on a Chip**, Royal Society of Chemistry, v. 12, n. 2, p. 244–252, 2012.
- FÜZESI, K.; GYÖNGY, M. Comparison of two inexpensive rapid prototyping methods for manufacturing filament target ultrasound phantoms. **Ultrasound in medicine & biology**, Elsevier, v. 43, n. 3, p. 712–720, 2017.
- GAROFALO, F.; LAURELL, T.; BRUUS, H. Performance study of acoustophoretic microfluidic silicon-glass devices by characterization of material-and geometry-dependent frequency spectra. **Physical Review Applied**, APS, v. 7, n. 5, p. 054026, 2017.
- GENG, P.; LI, C.; JI, X.; DONG, S. Numerical simulation of microfluidic mixing by ultrasonic-induced acoustic streaming. **Journal of Dispersion Science and Technology**, Taylor & Francis, p. 1–11, 2020.
- GOR'KOV, L. P. On the forces acting on a small particle in an acoustical field in an ideal fluid. In: **Sov. Phys. Dokl.** [S.l.: s.n.], 1962. v. 6, p. 773–775.
- GUO, F.; LI, P.; FRENCH, J. B.; MAO, Z.; ZHAO, H.; LI, S.; NAMA, N.; FICK, J. R.; BENKOVIC, S. J.; HUANG, T. J. Controlling cell–cell interactions using surface acoustic waves. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, National Acad Sciences, v. 112, n. 1, p. 43–48, 2015.
- KING, L. V. On the acoustic radiation pressure on spheres. **Proceedings of the Royal Society of London. Series A-Mathematical and Physical Sciences**, The Royal Society London, v. 147, n. 861, p. 212–240, 1934.
- LAURELL, T.; LENSCHOF, A. **Microscale acoustofluidics**. [S.l.]: Royal Society of Chemistry, 2014.
- LENSCHOF, A.; EVANDER, M.; LAURELL, T.; NILSSON, J. Acoustofluidics 5: Building microfluidic acoustic resonators. **Lab on a Chip**, Royal Society of Chemistry, v. 12, n. 4, p. 684–695, 2012.
- LIMA, E. B. d. et al. Aprisionamento de micropartículas em feixes acústicos superfocalizados. Universidade Federal de Alagoas, 2019.

LOPES, J.; LEÃO-NETO, J.; SILVA, G. Absorption, scattering, and radiation force efficiencies in the longitudinal wave scattering by a small viscoelastic particle in an isotropic solid. **The Journal of the Acoustical Society of America**, Acoustical Society of America, v. 142, n. 5, p. 2866–2872, 2017.

MAO, Z.; XIE, Y.; GUO, F.; REN, L.; HUANG, P.-H.; CHEN, Y.; RUFO, J.; COSTANZO, F.; HUANG, T. J. Experimental and numerical studies on standing surface acoustic wave microfluidics. **Lab on a Chip**, Royal Society of Chemistry, v. 16, n. 3, p. 515–524, 2016.

MASE, G. E. **Schaum's Outline Series Theory and Problems of Continuum Mechanics by George Mase**. 1970.

NAMA, N.; BARNKOB, R.; MAO, Z.; KÄHLER, C. J.; COSTANZO, F.; HUANG, T. J. Numerical study of acoustophoretic motion of particles in a pdms microchannel driven by surface acoustic waves. **Lab on a Chip**, Royal Society of Chemistry, v. 15, n. 12, p. 2700–2709, 2015.

NETO, J. P. L. et al. Força e torque de radiação sobre uma partícula viscoelástica em um fluido ideal. Universidade Federal de Alagoas, 2015.

ROMANEL, C. **Modelagem constitutiva para solos com ênfase em solos não saturados**. Tese (Doutorado) — PUC-Rio, 2003.

SETTNES, M.; BRUUS, H. Forces acting on a small particle in an acoustical field in a viscous fluid. **Physical Review E**, APS, v. 85, n. 1, p. 016327, 2012.

SILVA, G. T. An expression for the radiation force exerted by an acoustic beam with arbitrary wavefront (I). **The Journal of the Acoustical Society of America**, Acoustical Society of America, v. 130, n. 6, p. 3541–3544, 2011.

SILVA, G. T. Off-axis scattering of an ultrasound bessel beam by a sphere. **IEEE transactions on ultrasonics, ferroelectrics, and frequency control**, IEEE, v. 58, n. 2, p. 298–304, 2011.

SILVA, G. T. Acoustic radiation force and torque on an absorbing compressible particle in an inviscid fluid. **The Journal of the Acoustical Society of America**, Acoustical Society of America, v. 136, n. 5, p. 2405–2413, 2014.

SILVA, G. T.; LOPES, J. H.; MITRI, F. G. Off-axial acoustic radiation force of repulsor and tractor bessel beams on a sphere. **IEEE transactions on ultrasonics, ferroelectrics, and frequency control**, IEEE, v. 60, n. 6, p. 1207–1212, 2013.

SPIGARELLI, L.; VASILE, N.; PIRRI, C.; CANAVESE, G. Numerical study of the effect of channel aspect ratio on particle focusing in acoustophoretic devices. **Scientific reports**, Nature Publishing Group, v. 10, n. 1, p. 1–11, 2020.

SUN, C.; WU, F.; FU, Y.; WALLIS, D. J.; MIKHAYLOV, R.; YUAN, F.; LIANG, D.; XIE, Z.; WANG, H.; TAO, R. et al. Thin film gallium nitride (gan) based acoustofluidic tweezer: Modelling and microparticle manipulation. **Ultrasonics**, Elsevier, v. 108, p. 106202, 2020.

SZABO, T. L. Time domain wave equations for lossy media obeying a frequency power law. **The Journal of the Acoustical Society of America**, Acoustical Society of America, v. 96, n. 1, p. 491–500, 1994.

TIMOSHENKO, S.; GOODIER, J. Theory of elasticity: New york. **London,; Ed Mc Graw-Hill**, 1970.

VOLDMAN, J. Electrical forces for microscale cell manipulation. **Annu. Rev. Biomed. Eng.**, Annual Reviews, v. 8, p. 425–454, 2006.

WANG, J.; DUAL, J. Theoretical and numerical calculation of the acoustic radiation force acting on a circular rigid cylinder near a flat wall in a standing wave excitation in an ideal fluid. **Ultrasonics**, Elsevier, v. 52, n. 2, p. 325–332, 2012.

WESTERVELT, P. J. The theory of steady forces caused by sound waves. **The Journal of the Acoustical Society of America**, Acoustical Society of America, v. 23, n. 3, p. 312–315, 1951.

XU, D.; CAI, F.; CHEN, M.; LI, F.; WANG, C.; MENG, L.; XU, D.; WANG, W.; WU, J.; ZHENG, H. Acoustic manipulation of particles in a cylindrical cavity: Theoretical and experimental study on the effects of boundary conditions. **Ultrasonics**, Elsevier, v. 93, p. 18–25, 2019.

YAMAMOTO, R.; KOYAMA, D.; MATSUKAWA, M. On-chip ultrasonic manipulation of microparticles by using the flexural vibration of a glass substrate. **Ultrasonics**, Elsevier, v. 79, p. 81–86, 2017.

YOSIOKA, K.; KAWASIMA, Y. Acoustic radiation pressure on a compressible sphere. **Acta Acustica united with Acustica**, S. Hirzel Verlag, v. 5, n. 3, p. 167–173, 1955.

ZHANG, H.; LIU, K.-K. Optical tweezers for single cells. **Journal of the Royal Society interface**, The Royal Society London, v. 5, n. 24, p. 671–690, 2008.