

**EFFECTO JOULE POR APLICACIÓN DE RADIOFRECUENCIA EN NANO-
PARTÍCULAS METÁLICAS INMERSAS EN SOLUCIONES ACUOSAS**

JORGE ANDRÉS MIDEROS ARBOLEDA

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FISICOMECÁNICAS
ESCUELA DE INGENIERÍAS ELÉCTRICA, ELECTRÓNICA Y DE
TELECOMUNICACIONES
BUCARAMANGA**

2018

**EFFECTO JOULE POR APLICACIÓN DE RADIOFRECUENCIA EN NANO-
PARTÍCULAS METÁLICAS INMERSAS EN SOLUCIONES ACUOSAS**

JORGE ANDRÉS MIDEROS ARBOLEDA

**Trabajo de grado para optar al título de
Ingeniero Electrónico**

Director

ERNESTO AGUILERA BERMÚDEZ

Doctor en Ingeniería

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FISICOMECÁNICAS
ESCUELA DE INGENIERÍAS ELÉCTRICA, ELECTRÓNICA Y DE
TELECOMUNICACIONES
BUCARAMANGA**

2018

AGRADECIMIENTOS

Agradezco enormemente a mi familia por todo su apoyo, por los valores que recibí, por los consejos, por ser el soporte fundamental en mi vida.

También agradezco al profesor Ernesto Aguilera por su dirección, dedicación, acompañamiento y consejo, por sus enseñanzas y por creer en mí.

A ti también, Tatiana, por compartir conmigo este momento.

CONTENIDO

	pág.
INTRODUCCIÓN.....	15
1. GENERALIDADES DEL PROYECTO	17
1.1 DESCRIPCIÓN DEL PROYECTO	17
1.1.1 Formulación del problema.	17
1.1.2 Objetivo general.	17
1.1.3 Objetivos específicos.....	18
1.2 MARCO TEÓRICO	18
1.2.1 Efecto de la Ley de Joule.	18
1.2.2 Calentamiento del agua por efecto del campo electromagnético.	20
2. CONFIGURACIÓN DE LAS SIMULACIONES EN CST	24
2.1 DEFINICIÓN DEL PROYECTO PRINCIPAL.....	24
2.1.1 Aspectos generales.	24
2.1.2 Descripción del modelo de simulación.....	26
2.1.3 Configuración de la simulación multifísica.	28
2.2 DEFINICIÓN DEL AMBIENTE ELECTROMAGNÉTICO	30
2.2.1 Componentes adicionales al modelo de simulación.....	30

2.2.2	Configuración del mallado del ambiente electromagnético.	34
2.2.3	Fronteras de simulación.	35
2.3	DEFINICIÓN DEL AMBIENTE TÉRMICO	36
2.3.1	Señal de excitación del sistema.....	37
2.3.2	Definición del dominio computacional térmico y sus fronteras.	37
2.3.3	Configuración de los monitores de temperatura.....	38
3.	RESULTADOS	40
3.1	CASO DE ESTUDIO 1: MODELO DE CONTROL.....	40
3.1.1	Descripción.....	40
3.1.2	Resultados en el ambiente electromagnético.	40
3.1.3	Resultados en el ambiente térmico.....	42
3.2	CASO DE ESTUDIO 2: PARTÍCULAS DE 0.8 CENTÍMETROS DE DIÁMETRO.....	43
3.2.1	Descripción.....	43
3.2.2	Resultados en el ambiente electromagnético.	44
3.2.3	Resultados en el ambiente térmico.....	46
3.3	CASO DE ESTUDIO 3: PARTÍCULAS DE 0.01 CENTÍMETROS DE DIÁMETRO.....	48
3.3.1	Descripción.....	48
3.3.2	Resultados en el ambiente electromagnético.	48

3.3.3	Resultados en el ambiente térmico.....	49
4.	ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS	51
4.1	MODELO DE CONTROL	51
4.2	VARIACIÓN DEL MATERIAL EN LAS PARTÍCULAS DE 8 MILIMETROS DE DIÁMETRO.....	52
4.3	VARIACIÓN DE LA CONCENTRACIÓN DE PARTÍCULAS DE 0.01 CENTÍMETROS DE DIÁMETRO	54
5.	CONCLUSIONES.....	57
	BIBLIOGRAFIA.....	59
	ANEXOS	61

LISTA DE FIGURAS

	pág.
Figura 1. Contribución de los mecanismos de calentamiento al factor de pérdidas debido a la frecuencia de operación.	22
Figura 2. Variación del valor de la permitividad dieléctrica relativa y el factor de pérdidas relativo con respecto a la frecuencia de operación y la temperatura.	23
Figura 3. Modelo con partícula de oro para el caso de estudio 3.	27
Figura 4. Configuración para creación del ambiente electromagnético.	29
Figura 5. Configuración para creación del ambiente térmico.	29
Figura 6. Configuración para la computación de pérdidas electromagnéticas.	30
Figura 7. Modelo de simulación con placas de cobre, cableado y fuente de voltaje en el ambiente electromagnético.	31
Figura 8. Señal de excitación Gaussiana.	32
Figura 9. Sección transversal del Campo Eléctrico entre las placas paralelas de 15 cm.	33
Figura 10. Valor Absoluto del Campo Eléctrico medido entre las placas de 15 cm.	33
Figura 11. Sección transversal del Campo Eléctrico entre las placas paralelas de 60 cm.	34
Figura 12. Valor Absoluto del Campo Eléctrico medido entre las placas de 60 cm.	34
Figura 13. Sección transversal del mallado en el ambiente electromagnético.	35
Figura 14. Ejemplo de las fronteras eléctrica, magnética y abierta.	36
Figura 15. Señal de excitación Constante unitaria.	37
Figura 16. Ejemplo de las fronteras isotérmica, adiabática y abierta.	38
Figura 17. Configuración del monitor de distribución de temperatura.	39

Figura 18. Monitores de temperatura para diferentes coordenadas.	39
Figura 19. Modelo de control sin partículas.	40
Figura 20. Sección transversal del Campo Eléctrico en el modelo de control.	42
Figura 21. Perfil de pérdidas electromagnéticas en el modelo de control.	42
Figura 22. Temperatura medida en el modelo de control.	43
Figura 23. Modelo con una partícula de oro 0.8 cm de diámetro.	43
Figura 24. Sección transversal del Campo Eléctrico en los modelos con partículas de 0.8 cm de diámetro.	44
Figura 25. Corriente superficial en las partículas conductoras.	45
Figura 26. Perfil de pérdidas electromagnéticas en los modelos con partículas de 0.8 cm de diámetro.	46
Figura 27. Temperatura medida en los modelos con partículas de 0.8 cm de diámetro.	47
Figura 28. Modelos con partículas de 0.01 cm de diámetro.	48
Figura 29. Perfil de pérdidas electromagnéticas en los modelos con partículas de 0.01 cm diámetro.	49
Figura 30. Temperatura medida en los modelos con partículas de 0.01 cm de diámetro.	50
Figura 31. Representación de la línea donde se mide el valor absoluto de la intensidad de campo eléctrico al interior de una partícula.	52
Figura 32. Valor absoluto de la intensidad de campo eléctrico al interior de las partículas de 0.8 cm de diámetro.	53
Figura 33. Valor de pérdidas al interior de las partículas de 0.8 cm de diámetro. .	54
Figura 34. Tasa de aumento de temperatura promedio en relación con la concentración de oro.	56

LISTA DE TABLAS

	pág.
Tabla 1. Unidades para los resultados de las simulaciones.	25
Tabla 2. Propiedades del aire.	25
Tabla 3. Rango de frecuencias.	26
Tabla 4. Materiales del modelo de simulación.	27
Tabla 5. Tasa de aumento de temperatura en el modelo de control.	51
Tabla 6. Tasa de aumento de temperature en los modelos de partículas de oro, cobre y madera de 0.8 cm de diámetro.....	54
Tabla 7. Concentración de oro en los modelos con partículas de 0.01 cm de diámetro.	55
Tabla 8. Tasa de aumento de temperatura en los modelos con partículas de 0.01 cm de diámetro.	55

LISTA DE ANEXOS

	pág.
Anexo A. Perfiles de variación de temperatura en el modelo de control.	61
Anexo B. Perfiles de variación de temperatura en el modelo con una partícula de oro.	62
Anexo C. Perfiles de variación de temperatura en el modelo con una partícula de cobre.	63
Anexo D. Perfiles de variación de temperatura en el modelo con una partícula de madera.	64
Anexo E. Perfiles de variación de temperatura en el modelo con 1 partícula de 0.01 cm de diámetro.	65
Anexo F. Perfiles de variación de temperatura en el modelo con 20 partículas de 0.01 cm de diámetro.	66
Anexo G. Perfiles de variación de temperatura en el modelo con 40 partículas de 0.01 cm de diámetro.	67
Anexo H. Perfiles de variación de temperatura en el modelo con 80 partículas de 0.01 cm de diámetro.	68

RESUMEN

TITULO: EFECTO JOULE POR APLICACIÓN DE RADIOFRECUENCIA EN NANOPARTÍCULAS METÁLICAS INMERSAS EN SOLUCIONES ACUOSAS¹

AUTOR: JORGE ANDRÉS MIDEROS ARBOLEDA²

PALABRAS CLAVE: Nano-partículas metálicas, campo electromagnético de radiofrecuencia, efecto joule, simulación numérica multifísica.

DESCRIPCIÓN: En el presente trabajo de grado se abordará la teoría de los campos electromagnéticos y la Ley de Joule. Con base en esta teoría se desarrollarán unas simulaciones numéricas de una solución acuosa que contiene una o más partículas metálicas mientras se aplica un campo de radiofrecuencia. Se analizará el comportamiento térmico a partir de la variación del nivel de concentración y el tamaño de las partículas. Se tomará como punto de partida, la literatura científica que esté relacionada con el efecto de campos electromagnéticos de radiofrecuencias en el calentamiento de soluciones con nano-partículas metálicas. Se realizará el proceso de simulación utilizando el *software* comercial *CST Studio Suite (Computer Simulation Technology)* en el ambiente multifísico, para describir el fenómeno de campo electromagnético y de variación térmica, por medio de las ecuaciones de Maxwell y de difusión térmica, respectivamente. El acoplamiento de ambos grupos de ecuaciones se produce a través del cálculo de las pérdidas de energía electromagnética. Los resultados obtenidos en este trabajo de grado serían de interés para posteriores investigaciones en ingeniería biomédica en áreas como: el tratamiento hipertérmico de células cancerígenas que complementa otros tratamientos como la quimioterapia y la radioterapia; las terapias rápidas en lesiones musculares en atletas y de otras condiciones reumáticas.

¹ Trabajo de grado

² Facultad de Ingenierías Físico-mecánicas. Escuela de Ingenierías Eléctrica, Electrónica y de Telecomunicaciones. Director: Doctor en Ingeniería Ernesto Aguilera Bermúdez.

ABSTRACT

TITLE: JOULE EFFECT WHEN APPLYING RADIOFREQUENCY IN AQUEOUS IMMERSSED METAL NANO-PARTICLES³

AUTOR: JORGE ANDRÉS MIDEROS ARBOLEDA⁴

KEY WORDS: Metal nano-particles, radiofrequency electromagnetic field, joule effect, multiphysics numerical simulation.

DESCRIPTION: In the following bachelor thesis, it will be presented the theory of electromagnetic fields and joule's law. Based on this theory, it will be developed some numeric simulations of an aqueous solution that includes one or more metal spheres while it is applied a radiofrequency field. A thermal analysis will be done from the parametric sweep of the sphere's concentration level and its size. The working basis will be the scientific literature related with the effect of the radiofrequency electromagnetic fields over the heating up of solutions that contain metal nanoparticles. The simulation process will be done with the commercial software CST Studio Suite (Computer Simulation Technology) in the multiphysics environment, to describe the phenomenon of the electromagnetic field and the thermal variation, by using Maxwell and thermal diffusivity equations, respectively. The linkage of both group of equations is realized through the calculation of the electromagnetic energy loss. These results would be interesting for future biomedical engineering researches such as: the hyperthermic treatment of cancer cells that would complete other treatments like chemotherapy and radiotherapy, fast therapies in muscle injuries for athletes and other rheumatic conditions.

³ Bachelor thesis

⁴ Faculty of Physic-mechanical Engineering. School of Electrical, Electronic and Telecommunications Engineering. Director: PhD. Engineering Ernesto Aguilera Bermúdez.

INTRODUCCIÓN

De acuerdo con la perspectiva histórica que expone Vera⁵, una aplicación médica de la interacción de campos electromagnéticos con la materia se da en el tratamiento del cáncer, donde el objetivo principal es la manifestación de hipertermia para la destrucción de las células cancerígenas. Este fenómeno se describe como el aumento de la temperatura corporal por encima del valor estándar y, según las aplicaciones presentadas por Chichet⁶, se puede generar artificialmente en un área específica con métodos invasivos o no-invasivos.

Como ejemplo de métodos no-invasivos, se encuentra en la literatura trabajos como el de Cheong⁷, quien presenta el uso de Luz Infrarroja Cercana (NIR por sus siglas en inglés) reforzado con nano-partículas de oro, o el de Thomas⁸, quien presenta el uso de campos magnéticos alternos para el calentamiento de nano-partículas de óxido de hierro. Sin embargo, este tipo de tratamientos manifiestan algunas desventajas para su implementación. Por ejemplo, según Martín⁹, la Luz NIR (aproximadamente entre 800 nm y 950 nm de longitud de onda) se emplea únicamente para tratamiento de tejidos subcutáneos, es decir, no es efectiva en tejidos más profundos, debido a su dispersión y atenuación en este medio. Por otro lado, teniendo en cuenta el trabajo realizado por Hergt¹⁰, aunque los campos magnéticos son efectivos para tratar tejidos profundos, en el proceso de calentamiento las nano-partículas de óxido de hierro presentan una baja pérdida de

⁵ VERA HERNÁNDEZ, Arturo, *et al.* "Hipertermia electromagnética, una alternativa para el tratamiento del cáncer: antecedentes, aspectos físicos y biológicos". En: *Revista Mexicana de Ingeniería Biomédica*; Vol. XXII, No. 2 (abril-septiembre 2001); pp. 78 – 88

⁶ CHICHET, Adam, *et al.* "Hyperthermia – description of a method and a review of clinical applications". En: *Reports of Practical Oncology and Radiotherapy*; Vol. 12, No.5, 2007; pp. 267-275

⁷ CHEONG, Seong-Kyun; KRISHNAN, Sunil & CHO Sang H. "Modeling of plasmonic heating from individual gold nanoshells for near-infrared laser- induced thermal therapy". En: *Medical Physics*; Vol. 36, 2009; pp. 4664–4671. DOI: 10.1118/1.3215536

⁸ THOMAS, Reju; PARK, In-Kyu & JEONG, Yong Yeon. "Magnetic Iron Oxide Nanoparticles for Multimodal Imaging and Therapy of Cancer". En: *International Journal of Molecular Sciences*, Vol. 14 (8), 2013; pp. 15910-15930. DOI: 10.3390/ijms140815910

⁹ MARTÍN CORDERO, Jorge E. "Agentes Físicos Terapéuticos". La Habana: *Editorial Ciencias Médicas*, 2008; pp. 421-422

¹⁰ HERGT, Rudolf; *et al.* "Maghemite nanoparticles with very high AC-losses for application in RF-magnetic hyperthermia". En: *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Vol. 270 (3), 2004; pp. 345–357. DOI: 10.1016/j.jmmm.2003.09.001

energía específica (~600 W/g con un campo magnético de ~11 kA/m de amplitud), lo que implica que se requeriría aumentar su concentración a un nivel más alto del que se puede lograr dentro de un organismo.

Una alternativa para vencer las limitaciones mencionadas, consiste en el calentamiento de nano-partículas metálicas inmersas en una solución acuosa empleando un campo de radiofrecuencias. Entre los trabajos que abordan esta solución hay algunos, como el de Glazer¹¹, donde sólo realiza un procedimiento experimental para vincular los resultados con las ventajas de este método. Adicionalmente, en otros estudios, como el de Moran¹², se analiza cuál es el mecanismo encargado del calentamiento de la solución acuosa con nano-partículas metálicas. Moran¹³ plantea que el calentamiento es consecuencia del efecto de la Ley de Joule y esto lo constata mediante un procedimiento experimental y un soporte teórico. Con base en este planteamiento, se desarrolló el presente trabajo de grado.

Los resultados obtenidos en este trabajo de grado serían de interés para posteriores investigaciones en ingeniería biomédica en áreas como: el tratamiento hipertérmico de células cancerígenas que complementa otros tratamientos como la quimioterapia y la radioterapia; las terapias rápidas para el tratamiento de lesiones musculares en atletas; y el tratamiento de determinadas condiciones reumáticas.

Actualmente se desarrollan trabajos que permiten la caracterización electromagnética de soluciones con nano-partículas metálicas, en colaboración con grupos de investigación de las Escuelas de Química, Ingeniería Química de la Universidad Industrial de Santander y el grupo de Investigación RadioGIS.

¹¹ GLAZER, Evan S. & CURLEY, Steven A. "Non-invasive radiofrequency ablation of malignancies mediated by quantum dots, gold nanoparticles and carbon nanotubes". En: *Therapeutic Delivery*, Vol. 2 (10), 2011; pp. 1325–1330. PMID: PMC4090036

¹² MORAN, Christine H.; *et al.* "Size-Dependent Joule Heating of Gold Nanoparticles Using Capacitively Coupled Radiofrequency Fields". En: *Nano Research*, Vol. 2 (5), 2009; pp. 400-405. DOI: 10.1007/s12274-009-9048-1

¹³ MORAN Op. cit. p. 403.

1. GENERALIDADES DEL PROYECTO

1.1 DESCRIPCIÓN DEL PROYECTO

1.1.1 Formulación del problema. Uno de los retos en el tratamiento del cáncer con campos de radiofrecuencias utilizando nano-partículas metálicas es la definición del nivel de temperatura y del tiempo necesario de exposición al campo de radiofrecuencias. Debido a lo anterior, es importante comprender el mecanismo de calentamiento de las nano-partículas antes de poder establecer las características geométricas, electromagnéticas y térmicas que ayudan a cumplir estas condiciones en el tratamiento.

Entre los mecanismos planteados en la literatura, en Moran¹⁴ se resalta el efecto de la Ley de Joule en las nano-partículas metálicas y la dependencia relacionada con la concentración de las nano-partículas y su tamaño.

De esta manera, tomando como referencia los resultados obtenidos por Moran¹⁵ y la aproximación de las ecuaciones de Maxwell para el análisis en baja frecuencia¹⁶, se desea comprobar el efecto de la Ley de Joule como mecanismo de calentamiento, empleando como estrategia de análisis el desarrollo de unas simulaciones numéricas y tomando como referencia el procedimiento experimental en el trabajo de Moran ¹⁷.

1.1.2 Objetivo general. Evaluar mediante simulaciones numéricas el efecto de un campo electromagnético de radiofrecuencias en el calentamiento por efecto Joule de nano-partículas metálicas inmersas dentro de una solución acuosa.

¹⁴ MORAN. Op. cit. pp. 402-404.

¹⁵ Ibid.

¹⁶ MAKAROV, Sergey N.; Noetscher, Gregory M. & Nazarian, Ara. "Low-Frequency Electromagnetic Modeling for Electrical and Biological Systems Using MATLAB®". Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons, 2016; pp. 8-9.

¹⁷ MORAN. Op. cit. pp. 401-402.

1.1.3 Objetivos específicos. El cumplimiento del objetivo general del trabajo de grado comprende:

- Determinar las características geométricas, electromagnéticas y térmicas del sistema, el cual incorpora al modelo de nano-partículas metálicas inmersas dentro de una solución acuosa y al campo electromagnético de radiofrecuencias, según sus propiedades físicas y con base en los valores presentados en la literatura científica.
- Realizar en *CST Studio Suite* unas simulaciones numéricas multifísicas del modelo, que acople la incidencia del campo electromagnético de radiofrecuencias y los resultados de su comportamiento térmico.
- Analizar los resultados del comportamiento térmico del caso de estudio, con respecto a la variación de los parámetros que involucran al mecanismo de calentamiento por efecto Joule.

1.2 MARCO TEÓRICO

1.2.1 Efecto de la Ley de Joule. La descripción del mecanismo de calentamiento por el efecto de la Ley de Joule comienza cuando se considera que existe una nano-partícula metálica de cierto tamaño, d , expuesta a un campo electromagnético de baja frecuencia, $f = \omega/(2\pi)$ y su correspondiente longitud de onda, λ . De esta manera, las ecuaciones de Maxwell, que describen el fenómeno del campo electromagnético en la nano-partícula, se les realiza una aproximación estática para el análisis en baja frecuencia, es decir, despreciando las derivadas en el tiempo cuando se cumple la siguiente condición ¹⁸:

$$d \ll \lambda, \quad \lambda \equiv \frac{c}{f}, \quad c = \frac{1}{\sqrt{\mu\varepsilon}} \quad (1)$$

¹⁸ MAKAROV. Op. cit., p. 8.

A partir de esta aproximación y tomando en cuenta las ecuaciones de Poisson, Laplace y las condiciones de frontera de Neumann entre las superficies de dos medios, se establece que el campo eléctrico normal es discontinuo en la frontera entre dos medios de diferente conductividad, lo cual representa la existencia de una densidad de cargas libres $\sigma_s(\mathbf{r})$, en la superficie de frontera. Considerando el campo eléctrico $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ en un punto de observación \mathbf{r} en la superficie de frontera de cada nano-partícula, se obtiene una densidad de corriente eléctrica, $\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \sigma_{local}\mathbf{E}(\mathbf{r})$, donde σ_{local} es el valor local de la conductividad en el punto de observación. De esta manera es posible calcular la densidad de fuente de calor p_v y p_s , por unidad de volumen y unidad superficial respectivamente, mediante las siguientes fórmulas que se presentan en el manual de usuario del software CST Studio Suite ¹⁹:

$$p_v = \pi f \tan(\delta) \varepsilon_0 \varepsilon_r \int |\mathbf{E}|^2 \partial V \quad (2)$$

$$p_s = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi \mu f}{\sigma}} \int |\mathbf{H}_{tan}|^2 \partial S \quad (3)$$

Estos valores permiten el cálculo de la potencia disipada por las nano-partículas, cuando se aproximan como conductores de sección transversal constante ²⁰:

$$P = I^2 R \quad (4)$$

Por otra parte, este cálculo se puede obtener en función del diámetro de las nano-partículas d , su conductividad $\sigma(\omega)$, su área de sección transversal a y la magnitud del campo eléctrico $|\mathbf{E}|$ ²¹:

$$I^2 R = \sigma(\omega) * [a * d * |\mathbf{E}|^2] \quad (5)$$

¹⁹ CST Support Team. CST Studio Suite 2017 Help. [Manual de usuario]. Home / 3D Simulation / Post Processing / Post Processing Results / Loss and Q Calculation Overview [2017]

²⁰ MORAN. Op. cit. p. 403.

²¹ *Ibid.*

El valor de la potencia disipada es útil para evaluar la razón de cambio de temperatura con respecto a la variación del tiempo en función de la cantidad de nano-partículas metálicas inmersas en una solución acuosa n , el volumen de la suspensión v y la capacidad calorífica del agua c_w ²²:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{[\sigma(\omega) * [a * d * E^2]]}{v * c_w} * n \quad (6)$$

De esta manera, se puede observar que un mayor valor de la razón de cambio de temperatura, indica que se necesitará un tiempo menor para alcanzar un nivel de temperatura deseado y también, que a partir del modelo planteado existe una dependencia del aumento de temperatura en función del tamaño de las nano-partículas y su concentración.

1.2.2 Calentamiento del agua por efecto del campo electromagnético. Además del calentamiento por efecto Joule, es importante tomar en cuenta otros mecanismos que producen calentamiento en presencia de un disolvente como el agua y más aún, cuando no se considera la existencia de nano-partículas metálicas. Estos mecanismos, según Tang²³, tienen efecto según el valor del factor de pérdidas dieléctricas, dependen de la frecuencia en la que se desarrolla el problema y pueden presentarse por superposición.

Los dieléctricos se caracterizan por almacenar y disipar energía cuando están sujetos a un campo electromagnético. Este efecto sucede debido a las propiedades dieléctricas dadas por la permitividad dieléctrica relativa compleja ϵ_r , la cual se compone por la permitividad dieléctrica relativa, ϵ' y el factor de pérdidas relativo, ϵ'' .

²² MORAN. Op. cit. p. 404.

²³ TANG, Juming; HAO, Feng & LAU Ming. "Microwave heating in food processing". Department of Biological Systems Engineering, Washington State University. Pullman, Washington. En: *Advances in Bioprocessing Engineering*, Vol. 1, Chapter 1, 2002; pp. 1-44. DOI: 10.1142/9789812706584_0001

$$\varepsilon_r = \varepsilon' - j\varepsilon'' = |\varepsilon|e^{-j\delta} \quad (7)$$

Estas dos componentes forman un ángulo de pérdidas dieléctricas, δ , que se describe por medio de tangente de pérdidas dieléctricas:

$$\tan \delta = \frac{\varepsilon''}{\varepsilon'} \quad (8)$$

Mientras ε' define la habilidad de un material para almacenar energía y de polarizarse por efecto de un campo eléctrico externo, el valor de ε'' determina la habilidad de convertir la energía eléctrica en energía térmica según varios mecanismos. Esta conversión puede ser calculada por la fórmula de Goldblith ²⁴:

$$p_v = 5.56e^{-11} * f * \varepsilon'' * E^2 \quad (9)$$

En la Figura 1, en la cual se presenta una gráfica bajo una escala logarítmica, se muestran los mecanismos de calentamiento por conducción iónica, por el efecto Maxwell-Wagner y por el efecto de relajación para el agua ligada y el agua libre. Como se puede observar en esta figura, los diferentes mecanismos contribuyen al valor del factor de pérdidas relativo, ε'' , según la frecuencia de operación, siendo la conducción iónica y el efecto de relajación los mecanismos presentes en el rango de la radiofrecuencia. Es importante aclarar que el mecanismo por conducción iónica se manifiesta en soluciones salinas, mientras que el efecto de relajación para el agua ligada cuando hay alimentos que contienen agua y, por el contrario, el efecto de relajación para el agua libre cuando esta es el único material presente.

²⁴ GOLDBLITH, Samuel A. "Basic principles of microwave and recent developments". Contribution N° 889 Department of Nutrition and food science. Massachusetts Institute of Technology. Cambridge, Massachusetts. En: *Advances in Food Research*, Vol. 15, 1966; pp. 277-301. PMID: 4860243

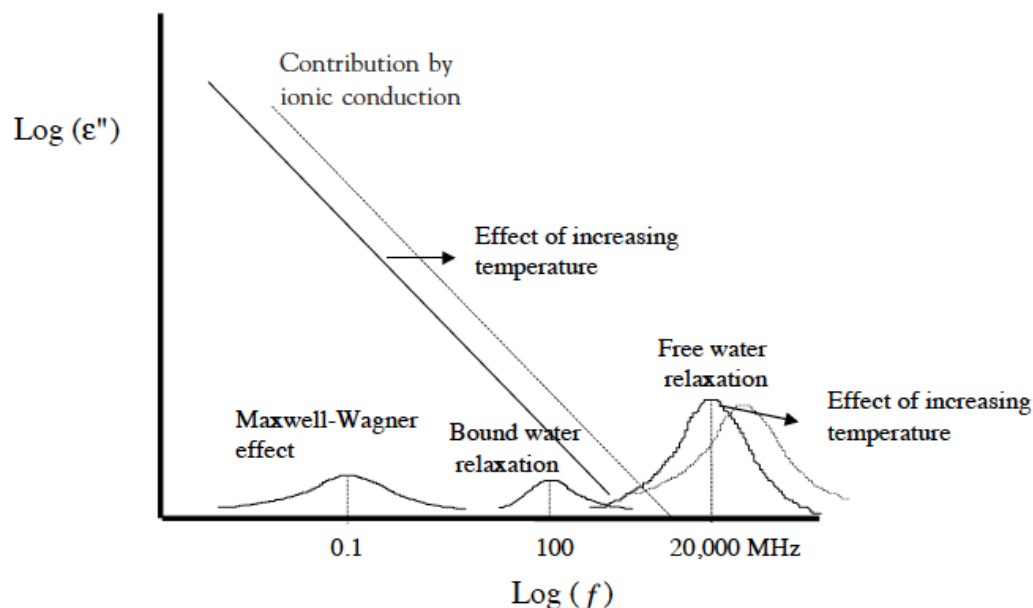


Figura 1. Contribución de los mecanismos de calentamiento al factor de pérdidas debido a la frecuencia de operación.²⁵

Según Chaplin²⁶, el efecto de relajación del agua libre se manifiesta por el fenómeno de polarización del agua en presencia de un campo electromagnético. Cuando este campo oscila, esto produce que las moléculas de agua se reorienten según la polaridad y al haber un retraso temporal entre la reorientación y la oscilación del campo, esto conlleva a un rozamiento molecular y a una pérdida de energía por calentamiento. El tiempo que determina el retraso o tiempo de relajación, τ , se calcula mediante la siguiente fórmula:

$$\tau = \frac{4\pi\eta r^3}{kT} \quad (10)$$

²⁵ TANG. Op. cit, p. 3.

²⁶ CHAPLIN, Martin. Water and Microwaves. [En línea]. Water Structure and Science. Este trabajo es licenciado con Creative Commons Atributions-Noncommercial-No Derivative Works 2.0 UK: England & Wales License. (Actualizado el 6 de noviembre de 2017) (Consultado en diciembre 2017) Disponible en http://www1.lsbu.ac.uk/water/microwave_water.html

2. CONFIGURACIÓN DE LAS SIMULACIONES EN CST

CST Studio Suite es una plataforma que está compuesta por diferentes módulos de simulación, en los cuales es posible desarrollar modelos en 3D de procesos que involucren fenómenos físicos. Teniendo en cuenta la descripción del mecanismo de calentamiento por efecto de la Ley de Joule, se puede observar que están presentes fenómenos de tipo electromagnético y de difusión térmica. Por medio de esta plataforma computacional se realizó la configuración de las simulaciones a partir de la diferenciación de estos fenómenos en dos ambientes de simulación, uno electromagnético y otro térmico. De esta manera, fue necesario crear un proyecto principal en CST que actuó como puente de comunicación entre los ambientes mencionados, a partir de una simulación multifísica.

A continuación, se describe la configuración realizada en *CST* para cada uno de dichos ambientes.

2.1 DEFINICIÓN DEL PROYECTO PRINCIPAL

En esta etapa se creó un proyecto principal en *CST* desde el módulo *3D Simulation > High Frequency*, en el cual se definieron unos aspectos generales, se realizó la descripción del modelo en 3D de las partículas inmersas en una solución acuosa y, por último, la configuración de la simulación multifísica.

2.1.1 Aspectos generales. Esta configuración comprende la definición de las unidades de medida, del material del medio ambiente y del rango de frecuencias. En la Tabla 1 se muestran las unidades empleadas para representar los resultados de las simulaciones; estas se configuran desde la ventana principal del proyecto principal siguiendo la ruta desde la pestaña *Home > Settings > Units*.

Variable	Unidad	Abreviación
Dimensiones	Centímetros	cm
Temperatura	Celsius	°C
Frecuencia	Megahertz	MHz
Tiempo	Segundos	s
Voltaje	Voltios	V
Corriente	Amperios	A
Resistencia	Ohm	Ω
Conductancia	Siemens	S
Capacitancia	Picofarads	pF
Inductancia	Nanohenries	nH

Tabla 1. Unidades para los resultados de las simulaciones.

Por otro lado, en la Tabla 2 se describen las propiedades del aire, material del medio ambiente en el que se desarrollaron las simulaciones. Para realizar esta configuración se ingresa por la ruta de la pestaña *Modeling > Materials > Background*. Una vez dentro de la ventana de configuración, se sigue a *Properties > Copy Properties from Material* para proporcionar las propiedades del aire al medio ambiente de simulación.

Propiedad del aire	Valor
Permitividad eléctrica (ϵ)	1.00059
Conductividad térmica W/K/m	0.026
Capacidad calorífica kJ/K/kg	1.005

Tabla 2. Propiedades del aire.²⁸

Adicionalmente, en la Tabla 3 se muestran dos rangos de frecuencias que se tuvieron en cuenta para realizar el proceso de simulación, esta configuración se realiza siguiendo la pestaña *Simulation > Settings > Frequency*. Es importante

²⁸ CST Studio Suite 2017 [Software]. Material Library [2017]

resaltar que sin esta configuración no es posible realizar el proceso de mallado para el cálculo de los resultados e igualmente, definir un rango de frecuencia amplio o reducido produce que el tiempo de simulación disminuya o aumente respectivamente. El primer rango que se muestra en la tabla tiene una diferencia de sólo ± 0.5 MHz de la frecuencia de simulación de 13.56 MHz ²⁹, mientras que el segundo rango cuenta con una diferencia de ± 10 MHz.

Frecuencia mínima	Frecuencia máxima
13.06 MHz	14.06 MHz
3.56 MHz	23.56 MHz

Tabla 3. Rango de frecuencias.

Con el fin de seleccionar un rango de frecuencias, se realizaron dos simulaciones de prueba con su respectivo rango y empleando el modelo del caso de estudio 1, el cual se presentará en el siguiente capítulo. Teniendo en cuenta que ambas simulaciones se ejecutaron en el dominio del tiempo, se optó por analizar el tiempo de simulación. De esta manera, como el segundo rango de frecuencias es más amplio, esto contribuyó a que en el dominio temporal el procesamiento de la señal de excitación fuese de menor duración y por consiguiente se seleccionó el segundo rango para ejecutar las simulaciones correspondientes a los casos de estudio.

2.1.2 Descripción del modelo de simulación. El modelo de simulación consiste en un recipiente cilíndrico de cuarzo (1 cm de diámetro, 1.5 cm de altura) que contiene ~1.5 mL de solución acuosa ³⁰. El espesor del recipiente se definió de 0.05 cm y en el interior de la solución acuosa se modelaron partículas de diferentes materiales (oro, cobre o madera) y tamaño según cada caso de estudio, los cuales se presentarán más adelante. De esta forma, en la Tabla 4 se relacionan los

²⁹ MORAN. Op. cit. p. 401.

³⁰ *Ibíd.*

materiales empleados en el modelo de simulación. Para configurar estos materiales se sigue la ruta desde la pestaña *Modeling > Materials > Material Library > Load from Library*.

Asimismo, en la Figura 3 se presenta un modelo del caso de estudio 3, el cual se presentará más adelante y corresponde a un recipiente que contiene la solución acuosa con una partícula de oro. Para poder modelar cada uno de los sólidos según corresponda con cada caso de estudio, se utilizan las herramientas que se encuentran en la pestaña *Modeling > Shapes/Tools*.

Material	Cuarzo	Agua	Oro	Cobre	Madera
Permitividad relativa (ϵ_r)	3.75	78	-	-	2.689
Conductividad eléctrica S/m	0.0004	1.59	4.561e7	5.8e7	-
Conductividad térmica W/K/m	5	0.6	314	401	0.2
Capacidad calorífica kJ/K/kg	0.7	4.2	0.13	0.39	2
Densidad kg/m ³	2200	998.6	19320	8930	500

Tabla 4. Materiales del modelo de simulación.³¹

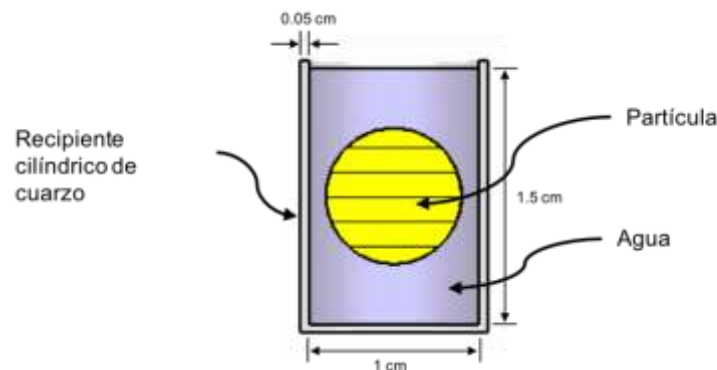


Figura 3. Modelo con partícula de oro para el caso de estudio 3.

³¹ CST Studio Suite 2017 [Software]. Material Library [2017]

2.1.3 Configuración de la simulación multifísica. Esta configuración permite enlazar las configuraciones de los aspectos generales y la geometría del modelo de simulación con los ambientes electromagnético y térmico; es decir, que estos ambientes son creados en sub-proyectos de *CST* con una configuración previa y también, comparten el mismo modelo de simulación en 3D que se define en el proyecto principal.

Además, se establece un vínculo unidireccional que parte desde el ambiente electromagnético en dirección al ambiente térmico, el cual enlaza el fenómeno electromagnético de pérdidas por efecto Joule con el fenómeno de difusión térmica. Esto indica que el proceso de simulación en el ambiente térmico dependerá de los resultados obtenidos en la simulación del ambiente electromagnético y no habrá dependencia en el sentido inverso.

Para poder habilitar esta configuración hay que pasar a la ventana *Schematic* del proyecto principal, y seguir la ruta desde la pestaña *Home > Simulation > Simulation Project > EM-Thermal Coupling > Uni-directional*. Una vez habilitada esta configuración, se prosigue a crear cada uno de los sub-proyectos mencionados siguiendo la ruta desde la pestaña *Simulation Project > Create Project > Create Simulation Project*. En la Figura 4 se presenta la configuración que se realizó para crear el sub-proyecto del ambiente electromagnético, mientras que la Figura 5 corresponde al sub-proyecto del ambiente térmico.

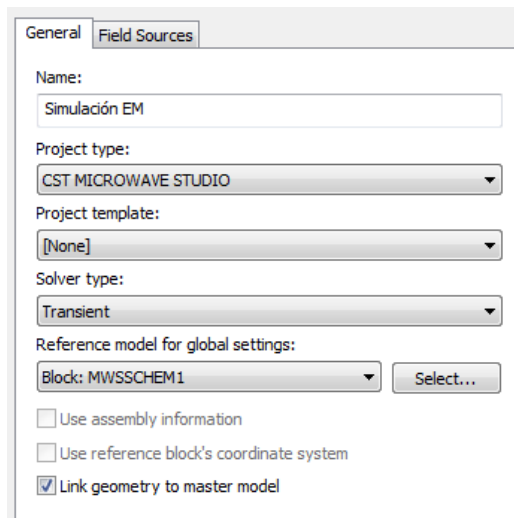


Figura 4. Configuración para creación del ambiente electromagnético.

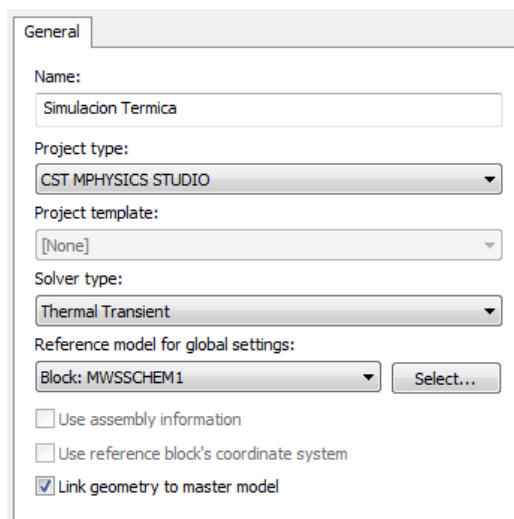
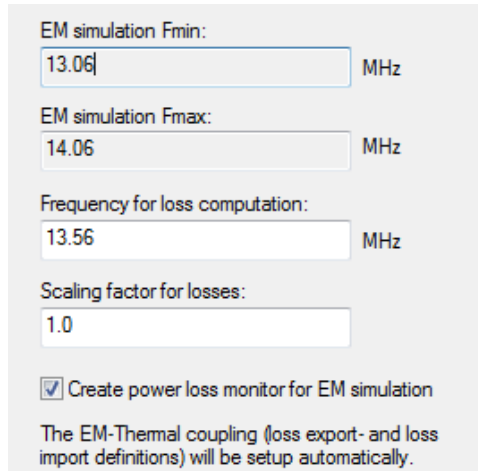


Figura 5. Configuración para creación del ambiente térmico.

Por último, en esta configuración también se determina el valor de la frecuencia de simulación para la computación de las pérdidas de energía electromagnéticas (13.56 MHz ³²), el factor de escala para estas pérdidas y se crean los monitores de

³² MORAN. Op. cit. p. 401.

campo eléctrico, campo magnético y de pérdidas para obtener los resultados en el proceso de simulación, como se presenta en la Figura 6.



The image shows a configuration window for an EM simulation. It contains four input fields and a checkbox. The first field is labeled 'EM simulation Fmin:' and contains the value '13.06' with 'MHz' to its right. The second field is labeled 'EM simulation Fmax:' and contains '14.06' with 'MHz' to its right. The third field is labeled 'Frequency for loss computation:' and contains '13.56' with 'MHz' to its right. The fourth field is labeled 'Scaling factor for losses:' and contains '1.0'. Below these fields is a checked checkbox labeled 'Create power loss monitor for EM simulation'. At the bottom, there is a note: 'The EM-Thermal coupling (loss export- and loss import definitions) will be setup automatically.'

Figura 6. Configuración para la computación de pérdidas electromagnéticas.

2.2 DEFINICIÓN DEL AMBIENTE ELECTROMAGNÉTICO

En esta etapa se creó un sub-proyecto en el módulo de simulación *CST Microwave Studio*, el cual está diseñado para simular problemas electromagnéticos en alta frecuencia. La configuración de este sub-proyecto está compuesta por la adición de nuevos componentes al modelo de simulación, la definición del mallado y las fronteras que delimitan al dominio computacional. Adicionalmente, el solucionador destinado para este proceso de simulación corresponde al Transitorio en el Dominio Temporal.

2.2.1 Componentes adicionales al modelo de simulación. Además del modelo de simulación que se enlaza desde el proyecto principal, se añadieron dos placas paralelas de cobre circulares (15 cm de diámetro), ubicadas equidistantemente y centradas con el modelo de simulación (7.5 cm de distancia con el centro del modelo), tal como se muestra en la

2.2.2 Figura 7. Cabe resaltar, que el modelamiento de las placas se realiza de manera similar al de los demás solidos del modelo de simulación.

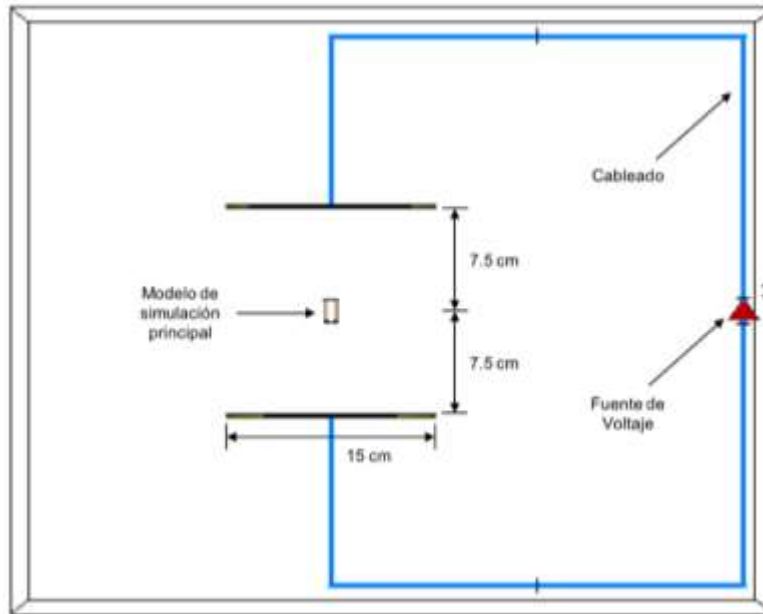


Figura 7. Modelo de simulación con placas de cobre, cableado y fuente de voltaje en el ambiente electromagnético.

De esta forma, las placas paralelas se alimentaron con una fuente de voltaje de 2250 V la cual se puede configurar desde la pestaña *Simulation > Sources and Loads > Discrete Port*, y además, produce un campo electromagnético entre estas de ~15 kV/m con una señal de excitación Gaussiana (señal por defecto), la cual se presenta en la Figura 8. El valor de la fuente de voltaje se definió mediante la fórmula para el hallar el valor del potencial entre dos placas paralelas, $V = E * d$; siendo d la distancia de separación entre las placas. Para lograr alimentar las placas se empleó la herramienta de cableado.

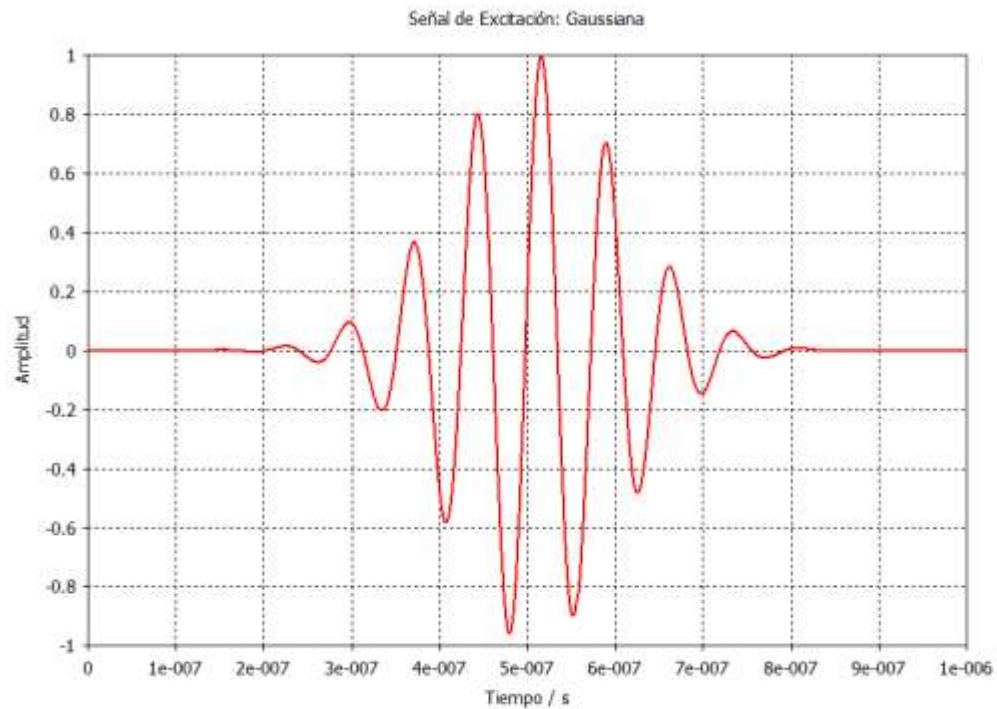


Figura 8. Señal de excitación Gaussiana.

En la Figura 9 se puede observar el corte transversal de la intensidad de campo eléctrico generado entre las placas paralelas de 15 cm de diámetro. Adicionalmente, en la Figura 10 se obtiene la gráfica del valor absoluto de la intensidad de campo eléctrico medido entre las placas, a lo largo de una línea perpendicular al centro de las mismas, con un valor promedio de 15.22 kV/m.

Con el fin de observar el resultado de la intensidad de campo eléctrico cuando el tamaño de las placas paralelas es mayor, se aumentó su diámetro a 60 cm, como se puede observar en la Figura 11. De esta manera, si se compara el resultado del valor absoluto del campo eléctrico medido entre las placas en la Figura 10 cuando las placas tienen un diámetro de 15 cm, con el resultado mostrado en la Figura 12 cuando las placas tienen un diámetro de 60 cm, se puede observar que el campo es más uniforme y presenta un valor promedio de 15.18 kV/m; esto se atribuye a la relación entre la distancia de separación y el tamaño de las placas paralelas, en cuanto mayor sea el tamaño con respecto a la separación de las placas, es posible

despreciar el efecto borde de las placas para considerar la uniformidad del campo eléctrico entre estas.

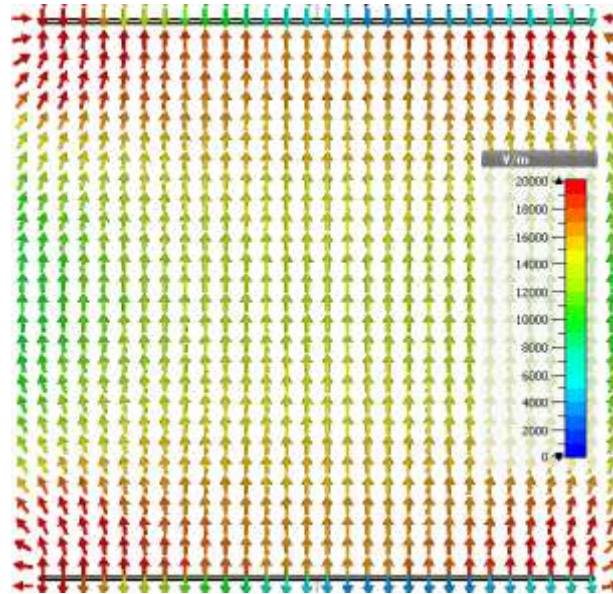


Figura 9. Sección transversal del Campo Eléctrico entre las placas paralelas de 15 cm.

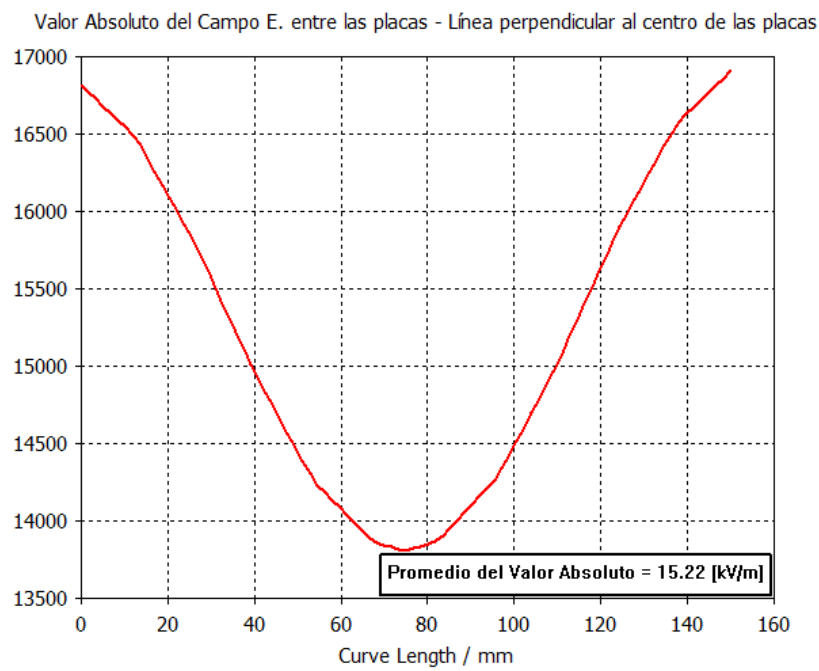


Figura 10. Valor Absoluto del Campo Eléctrico medido entre las placas de 15 cm.

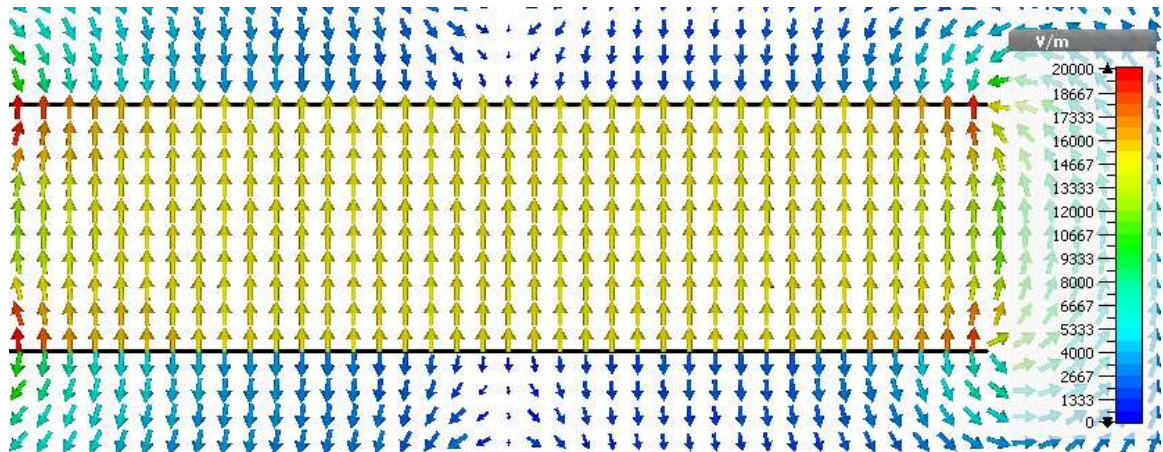


Figura 11. Sección transversal del Campo Eléctrico entre las placas paralelas de 60 cm.

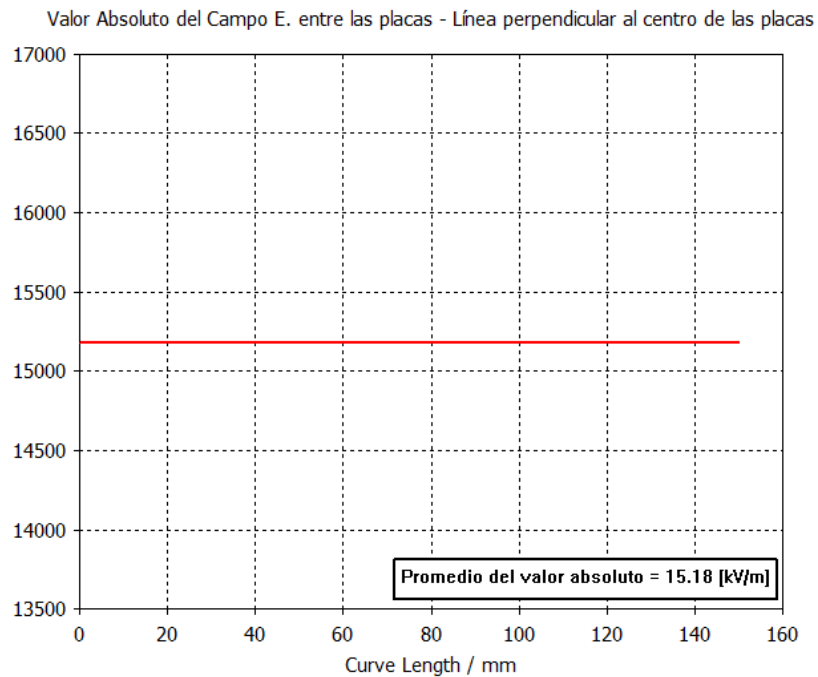


Figura 12. Valor Absoluto del Campo Eléctrico medido entre las placas de 60 cm.

2.2.3 Configuración del mallado del ambiente electromagnético. Esta configuración corresponde con la discretización del dominio computacional para poder representar la solución a las ecuaciones de Maxwell, al realizar el proceso de simulación del ambiente electromagnético. La configuración del mallado cumple un

papel importante en la simulación, que tiene consecuencias en la cantidad de datos a procesar y, por lo tanto, en el tiempo de ejecución y también, en la exactitud de los resultados.

Para efectuar esta configuración se sigue la ruta desde la pestaña *Simulation > Mesh > Global Properties*. Se utilizará la configuración de una malla Hexaédrica, la cual divide el volumen computacional en cubos rectangulares que corresponden a cada celda del mallado. Cuantas más celdas de mallado se generen, más exacto será el cálculo de los campos electromagnéticos, pero también aumentará el tiempo de simulación y viceversa. En la Figura 13 se presenta una muestra de la vista de sección transversal del mallado del modelo de simulación en el ambiente electromagnético.

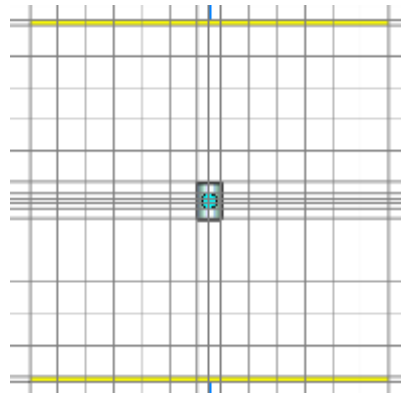


Figura 13. Sección transversal del mallado en el ambiente electromagnético.

2.2.4 Fronteras de simulación. Antes de dar inicio al solucionador Transitorio en el Dominio Temporal, se establecieron las fronteras de simulación, las cuales corresponden a los planos normales a los ejes cartesianos que encierran el dominio computacional. La configuración permite determinar entre una frontera eléctrica, magnética o abierta, y se puede realizar desde la pestaña *Simulation > Settings > Boundaries*.

Por un lado, la frontera eléctrica funciona como un conductor eléctrico perfecto, es decir, elimina la componente tangencial del campo eléctrico y la componente normal del campo magnético. De manera contraria, la frontera magnética actúa como un conductor magnético perfecto, de manera que elimina la componente normal del campo eléctrico y la componente tangencial del campo magnético. Por otro lado, la frontera abierta extiende la frontera hacia el infinito, es decir no impide el paso de ninguna componente de campo eléctrico o magnético y produce la más mínima reflexión de onda. En la Figura 14 se puede observar un ejemplo de las fronteras mencionadas, siendo la eléctrica de color verde, la abierta de color fucsia y la magnética de color azul. Para los casos de estudio que se presentarán más adelante, se realizó la configuración de todas las fronteras como tipo abierta.

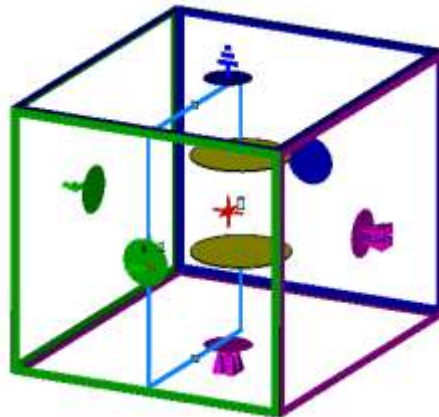


Figura 14. Ejemplo de las fronteras eléctrica, magnética y abierta

2.3 DEFINICIÓN DEL AMBIENTE TÉRMICO

Esta etapa se desarrolló en el módulo de simulación *CST MPhysics Studio*, el cual está diseñado para simular problemas de fenómenos térmicos y de mecánica estructural. La configuración de este sub-proyecto se compone de la definición de la señal de excitación, la definición del dominio computacional, sus fronteras y la configuración de los monitores que permiten la obtención de resultados.

2.3.1 Señal de excitación del sistema. Como señal de excitación se definió una señal constante de valor unitario, la cual se presenta en la Figura 15, tiene un tiempo de duración de 2 minutos³³ y se configura desde la pestaña *Simulation > Sources and Loads > Signal*. De esta manera la señal va a excitar al sistema con los resultados de las pérdidas de energía electromagnética durante el tiempo determinado y con un factor de multiplicación unitario, con el fin de obtener la simulación del fenómeno de difusión térmica.

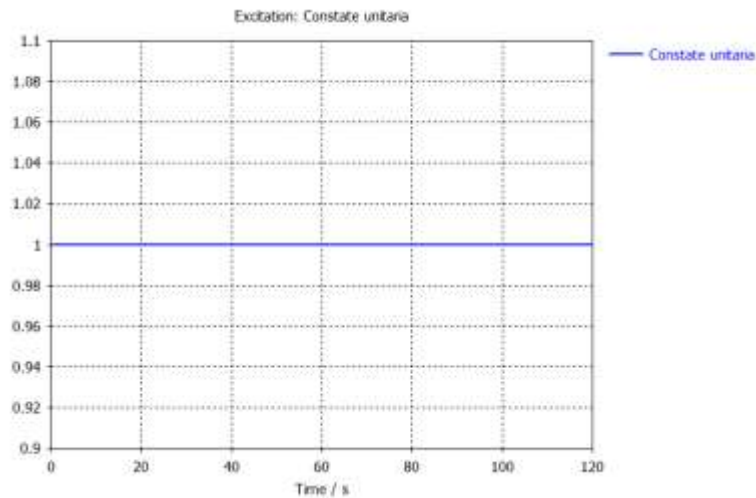


Figura 15. Señal de excitación Constante unitaria.

2.3.2 Definición del dominio computacional térmico y sus fronteras. Se definió una distancia de separación de 1 cm entre el modelo y las fronteras del dominio computacional térmico, con el fin de omitir el efecto de las placas paralelas de cobre en esta etapa y de igual manera, disminuir el tiempo de simulación. En este ambiente se pueden definir fronteras de tipo isotérmicas, adiabáticas o abiertas.

Por un lado, las fronteras isotérmicas establecen un valor constante de temperatura en los límites del dominio computacional, mientras permiten el paso del flujo de

³³ MORAN. Op. cit. p. 402.

calor; estas se utilizan cuando el modelo se encuentra dentro de un ambiente de temperatura controlada. De manera contraria, las fronteras adiabáticas permiten la variación de temperatura en estos límites e impiden el paso del flujo de calor; estas se establecen cuando la estructura del modelo continúa después de la frontera, por ejemplo, cuando se emplean puertos de guía de onda. Por último, las fronteras abiertas permiten tanto la variación de temperatura, como el paso del flujo de calor; estas se emplean cuando se tiene espacio libre alrededor del modelo. En la Figura 16 se presentan un ejemplo de las fronteras mencionadas, siendo de color verde la frontera isotérmica, azul la adiabática y fucsia la abierta. Para los casos de estudio, se realizó la configuración de todas las fronteras de tipo abierta desde la pestaña *Simulation > Settings > Boundaries*.

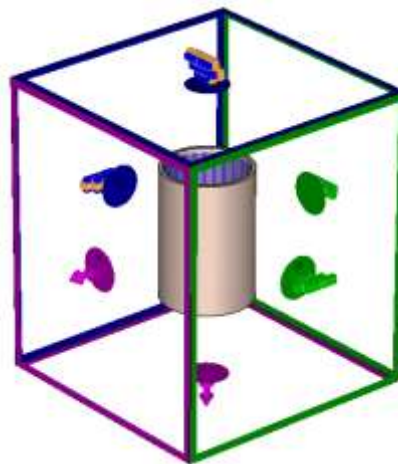


Figura 16. Ejemplo de las fronteras isotérmica, adiabática y abierta.

2.3.3 Configuración de los monitores de temperatura. Se define un monitor para obtener la distribución de temperatura en todo el dominio computacional térmico; este se caracteriza por realizar la medición correspondiente, durante el tiempo establecido por la señal de excitación y se configura desde la pestaña *Simulation > Monitors > Field Monitor*. Como se puede observar en la Figura 17, se establece un delta de tiempo entre cada medición equivalente a 1 segundo, iniciando desde un tiempo inicial igual a 0 segundos.

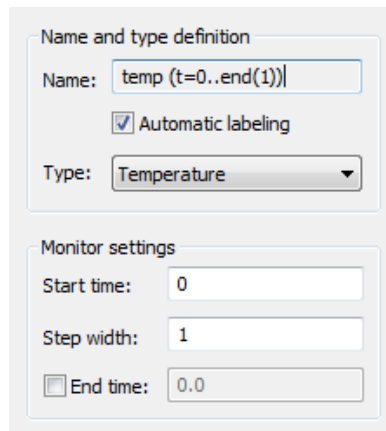


Figura 17. Configuración del monitor de distribución de temperatura.

Adicionalmente, se configuraron 3 monitores puntuales en diferentes coordenadas (x, y, z) medidas en centímetros, mediante los cuales se obtiene el valor de la temperatura durante el tiempo de simulación en cada uno de los puntos; estos se configuran desde la pestaña *Simulation > Monitors > Monitor at Point*. Se escogieron las coordenadas (0, 0, 0), (0.45, 0, 0) y (0.4, 0, -0.65) correspondientes al Monitor Central, el Monitor Extremo Central y el Monitor Extremo Inferior del modelo respectivamente; estas se pueden observar en la Figura 18.

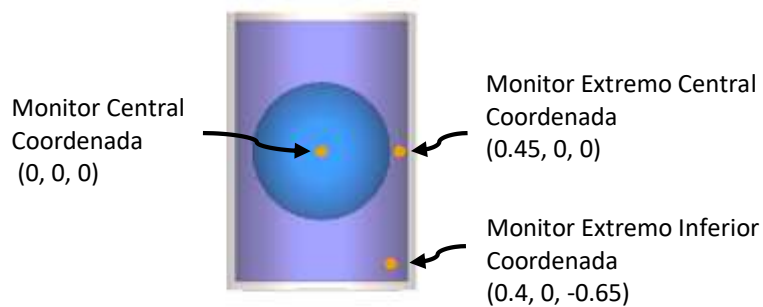


Figura 18. Monitores de temperatura para diferentes coordenadas.

3. RESULTADOS

Teniendo en cuenta las configuraciones realizadas para cada ambiente de simulación, se varió el tamaño de las partículas, su material y su concentración en la solución acuosa para obtener los resultados de los casos de estudio que se presentan a continuación.

3.1 CASO DE ESTUDIO 1: MODELO DE CONTROL

3.1.1 Descripción. Para el primer caso de estudio se realizó la construcción del modelo de simulación conformado únicamente por el recipiente de cuarzo y el agua en su interior, como se puede observar en la Figura 19.

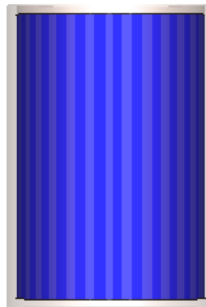


Figura 19. Modelo de control sin partículas.

3.1.2 Resultados en el ambiente electromagnético. En la Figura 20 se puede observar que, según la escala de medición en V/m, hay atenuación de la intensidad de campo eléctrico en el espacio cercano al modelo de control y en su interior, como era de esperarse de acuerdo al fenómeno de polarización del agua. Según Purcell³⁴, este fenómeno sucede cuando se somete la muestra a un campo eléctrico uniforme creado entre las placas paralelas, E_0 . De esta manera, en el espacio próximo a la

³⁴ PURCELL, Edward M. "Electricidad y magnetismo, Berkeley physics course – Volumen 2" Edición en español, Barcelona: Editorial Reverté, 1988. pp. 368, 369

muestra el campo eléctrico dependerá de E_0 y de un campo E' debido al agua polarizada, teniendo como resultado:

$$E = E_0 + E' \quad (11)$$

Considerando que la polarización se presenta de manera uniforme al interior de la muestra, E' se puede expresar como:

$$E' = -\frac{P}{3\varepsilon_0} \quad (12)$$

y teniendo en cuenta que se debe cumplir que $P = \chi_e E = \varepsilon_0(\varepsilon - 1)E$, se puede hallar la siguiente relación entre el campo uniforme E_0 y el campo próximo a la muestra, E :

$$E = E_0 - \frac{P}{3\varepsilon_0} = E_0 - \frac{\varepsilon - 1}{3} E \quad (13)$$

$$E = \left(\frac{3}{2 + \varepsilon} \right) E_0 \quad (14)$$

Como el valor ε tiene un valor mayor que la unidad, esta relación indica que el campo E será menor que el campo generado entre las placas paralelas.

Adicionalmente, se realiza un corte transversal de la muestra y se representa la magnitud de las pérdidas por efecto del campo eléctrico en la Figura 21. De acuerdo a esta gráfica en dos dimensiones se registra un valor máximo de pérdidas de 346 kW/m³ en el agua el espacio central del modelo, es decir, en este espacio el efecto de relajación ocasiona que, por la reorientación de la polaridad de cada molécula de agua, haya mayor rozamiento molecular y por consiguiente mayores pérdidas.

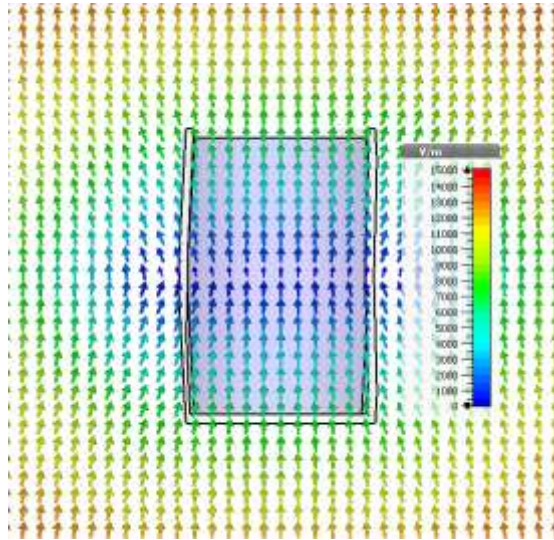


Figura 20. Sección transversal del Campo Eléctrico en el modelo de control.

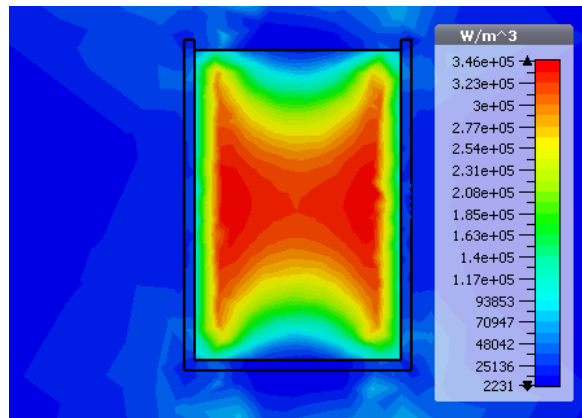


Figura 21. Perfil de pérdidas electromagnéticas en el modelo de control.

3.1.3 Resultados en el ambiente térmico. Los valores calculados de las pérdidas se importan en el ambiente térmico para excitar al sistema y de esta manera obtener el aumento de la temperatura del modelo según el tiempo de simulación, como se presenta en el Anexo A. Adicionalmente, se obtienen las curvas de variación de temperatura de los tres monitores puntuales configurados según la sección 2.3.3, las cuales se muestran en la Figura 22. De la misma manera, se presenta una temperatura máxima ($T_{\text{máx.}}$) de ~ 31.25 °C, ~ 30.50 °C y ~ 30.12 °C en los monitores Central, Externo Central y Externo Inferior respectivamente.

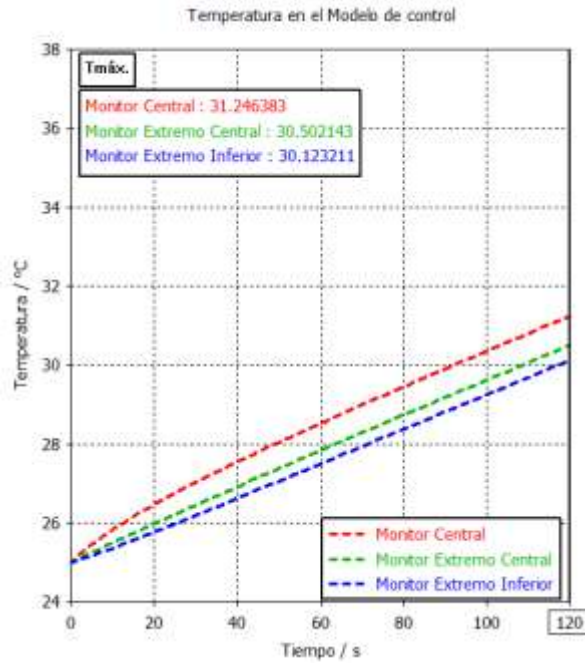


Figura 22. Temperatura medida en el modelo de control.

3.2 CASO DE ESTUDIO 2: PARTÍCULAS DE 0.8 CENTÍMETROS DE DIÁMETRO

3.2.1 Descripción. En este caso de estudio se realiza la descripción de un modelo de simulación que contiene una partícula de 0.8 cm de diámetro y para la cual se varia su material de composición entre oro, cobre y madera. Para cada modelo de diferente material, se realiza el procedimiento de simulación que se ejecutó en el caso de estudio de control. En la Figura 23 se puede apreciar una muestra del modelo con una partícula de oro, correspondiente al presente caso de estudio.

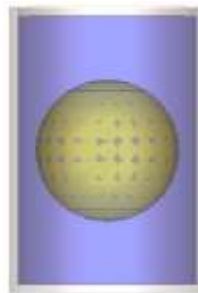


Figura 23. Modelo con una partícula de oro 0.8 cm de diámetro.

3.2.2 Resultados en el ambiente electromagnético. Como primer resultado, se obtiene el perfil de campo eléctrico para cada partícula de diferente material, como se muestra en la Figura 24. La escala de medición de estos resultados se establece con un límite superior de 15 kV/m y el corte transversal para estos resultados se realiza en el centro del modelo de simulación. Como se puede observar en esta figura, no hay campo eléctrico al interior de las partículas metálicas de oro y cobre, mientras que en la partícula de madera si hay presencia de campo eléctrico en su interior debido a su naturaleza dieléctrica.

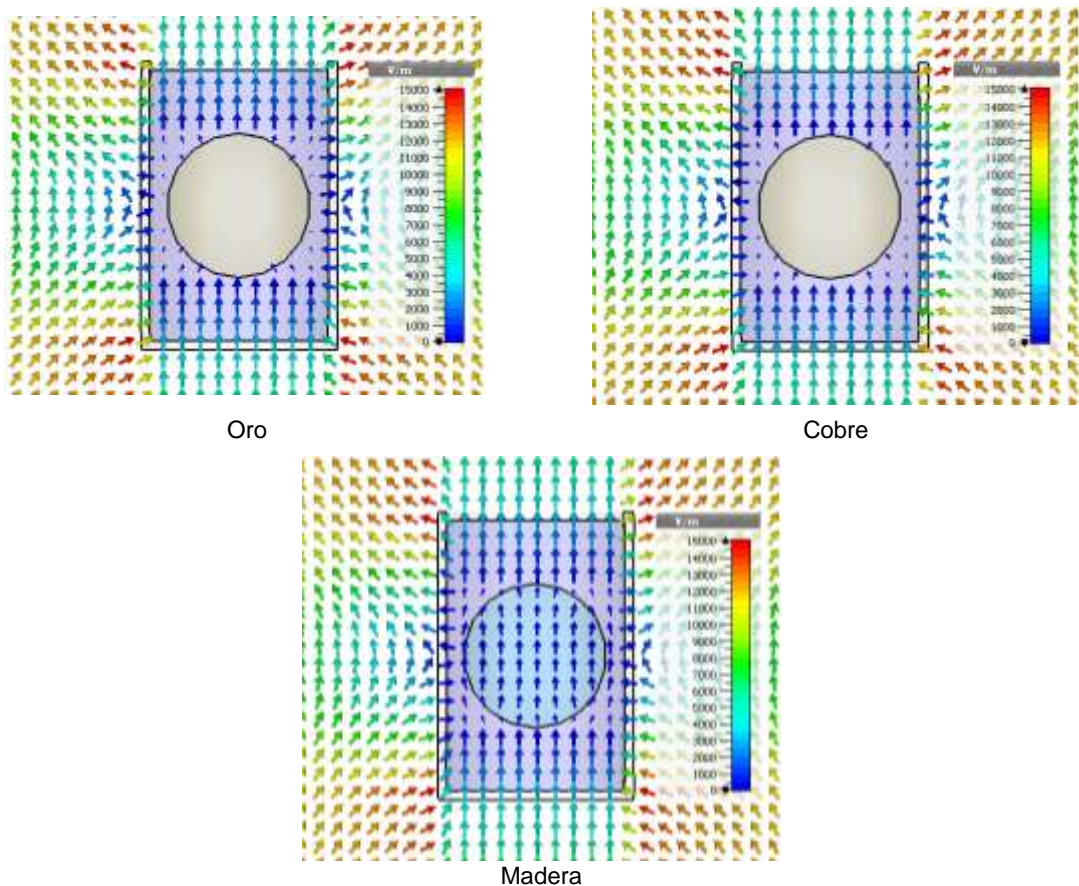


Figura 24. Sección transversal del Campo Eléctrico en los modelos con partículas de 0.8 cm de diámetro.

Por otro lado, para los modelos de las partículas conductoras de oro y cobre, también se obtuvieron los resultados de la densidad de corriente superficial inducida que se muestran en la Figura 25. Es importante aclarar que en esta figura los

vectores cuya magnitud se mide en unidades de A/m, forman una esfera, es decir no se encuentran dentro de la partícula sino en la superficie frontal a la figura. Adicionalmente, en la superficie lateral derecha de ambas esferas se evidencia una mayor densidad corriente superficial siendo de magnitud 2.904 A/m para el Oro y 2.907 A/m para el cobre. Esta figura se obtuvo en la fase en que el campo eléctrico generado entre las placas es mínimo y el campo magnético es máximo. Por último, es importante agregar que la fuente que alimenta las placas paralelas se posiciona hacia la derecha, influyendo en la densidad de corriente inducida sobre las esferas por medio del campo magnético.

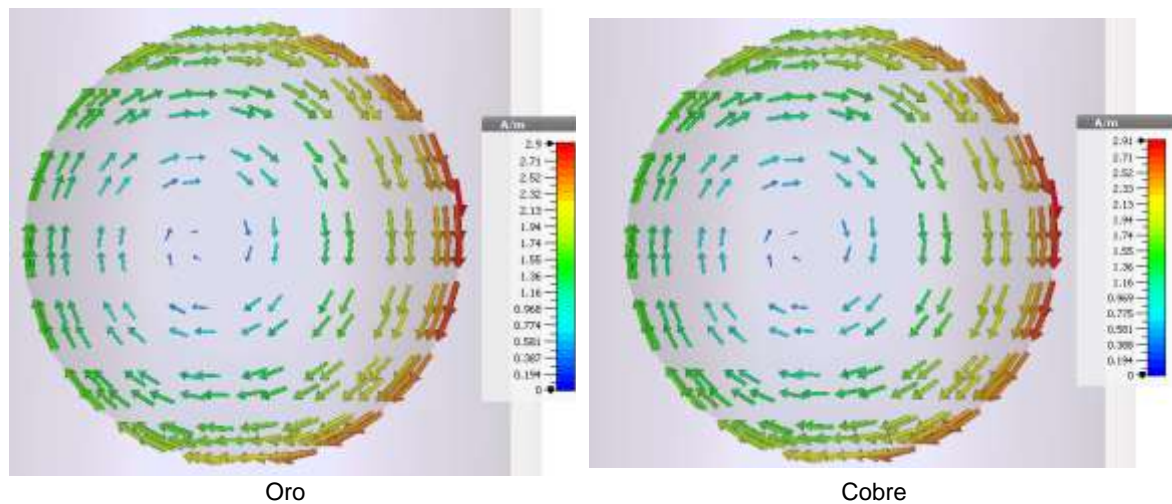


Figura 25. Corriente superficial en las partículas conductoras.

Al igual que con el caso de estudio del modelo de control, también se obtuvieron los perfiles de las pérdidas volumétricas que se presentan en la Figura 26 y se registran unos valores máximos de estas pérdidas de 983 kW/m³, 974 kW/m³ y 4.29 MW/m³ en los modelos con partículas de oro, cobre y madera respectivamente. Según los resultados de esta figura, es importante observar que el mayor valor de pérdidas en el modelo con las partículas metálicas de oro y cobre se ubica en los extremos superior e inferior de estas, mientras para el modelo con la partícula de madera este valor se encuentra en los costados y, además, que estos valores no están presentes dentro de las partículas, sino en el agua que se sitúa alrededor de estos puntos.

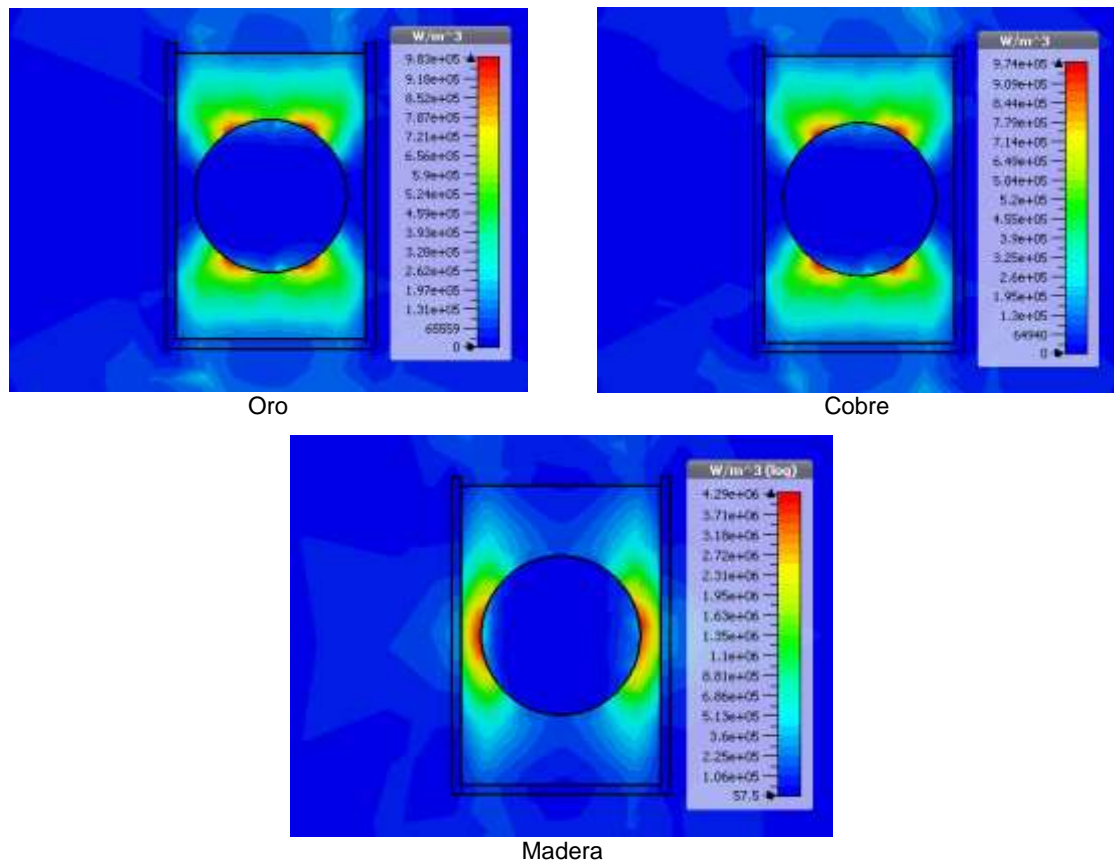


Figura 26. Perfil de pérdidas electromagnéticas en los modelos con partículas de 0.8 cm de diámetro.

3.2.3 Resultados en el ambiente térmico. Siguiendo el mismo procedimiento realizado para el caso de estudio de control, en la Figura 27 se presentan los resultados correspondientes a la medición de temperatura en cada uno de los monitores puntuales configurados según la sección 2.3.3. En las gráficas de esta figura también se presentan los valores de temperatura máximos medidos en cada monitor para cada modelo según la partícula de diferente material. Adicionalmente, en los anexos: Anexo B, Anexo C y Anexo D se presentan los perfiles de distribución de temperatura, según varía el tiempo de simulación, para los modelos del presente caso de estudio. Como se puede observar en las gráficas de la Figura 27, el modelo con la partícula de madera presenta la mayor diferencia de temperatura en el tiempo de simulación.

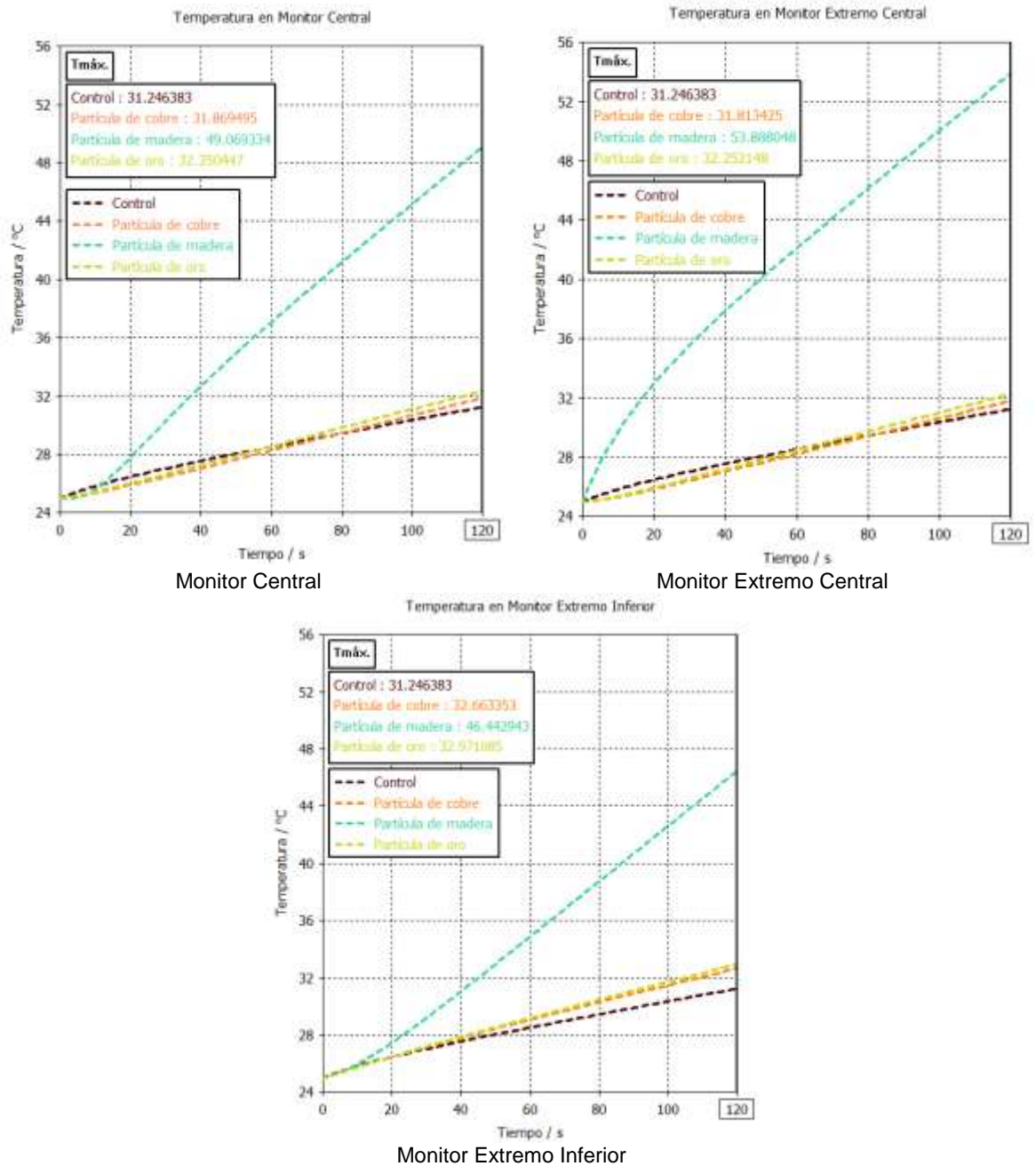


Figura 27. Temperatura medida en los modelos con partículas de 0.8 cm de diámetro.

3.3 CASO DE ESTUDIO 3: PARTÍCULAS DE 0.01 CENTÍMETROS DE DIAMETRO

3.3.1 Descripción. El presente caso de estudio consiste en obtener los resultados de simulación respecto al aumento de la concentración de las partículas en la solución acuosa, manteniendo constante su tamaño.

De esta forma, se incorporaron partículas de oro de un tamaño equivalente al grosor de un cabello (0.01 cm) en el modelo de simulación. Se comenzó insertando una sola partícula ubicada en el centro del modelo y se continuó aumentando la cantidad de partículas hasta llegar a 80, como se puede observar en la Figura 28.

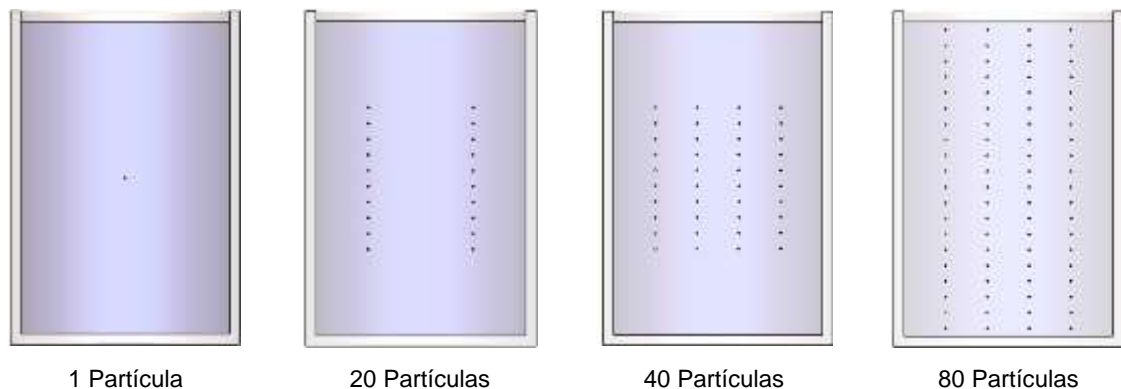


Figura 28. Modelos con partículas de 0.01 cm de diámetro.

3.3.2 Resultados en el ambiente electromagnético. De manera similar al caso de estudio de control, se obtuvo el perfil de pérdidas electromagnéticas debidas al campo eléctrico para cada modelo del caso de estudio, con su respectiva cantidad de partículas de 0.01 cm, como se puede observar en la Figura 29. Primeramente, es importante tener en cuenta que el valor de las pérdidas electromagnéticas dentro de las de las partículas metálicas es cero por la ausencia de campo electromagnético al interior. Igualmente, también cabe observar que, como el mayor valor de estas pérdidas se ubica alrededor de las partículas y, como el agua, siendo el dieléctrico presente en cada modelo, presenta pérdidas por efecto de relajación, es en estos puntos donde hay mayor rozamiento entre las moléculas de agua.

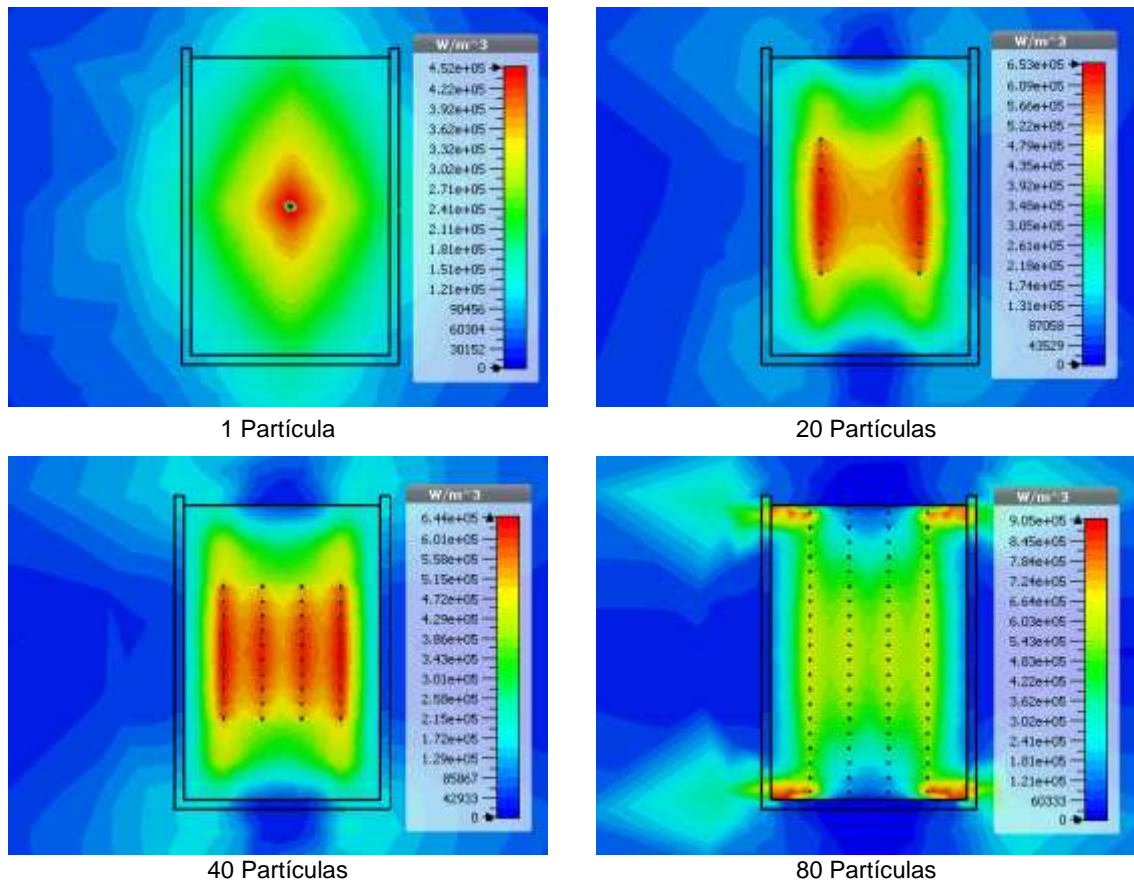


Figura 29. Perfil de pérdidas electromagnéticas en los modelos con partículas de 0.01 cm diámetro.

3.3.3 Resultados en el ambiente térmico. Teniendo en cuenta los resultados de las pérdidas electromagnéticas, se prosigue a obtener los resultados de temperatura siguiendo el mismo procedimiento de simulación que se realizó en el caso de estudio de control. Los perfiles de distribución de temperatura, según el tiempo de simulación, para cada uno de los modelos del presente caso de estudio se pueden observar en los anexos: Anexo E, Anexo F, Anexo G y Anexo H.

En la Figura 30 se presentan las gráficas de la medición de temperatura para cada uno de los monitores puntuales, al igual que los valores de temperatura máxima medida en cada uno de ellos ($T_{m\acute{a}x.}$). Cabe distinguir que, en estas gráficas, las líneas que representan el aumento de temperatura para modelo de control, en café, y para el modelo con una sola partícula, en verde, están ligeramente superpuestas.

Adicionalmente, se puede observar una correspondencia de mayores valores de temperatura cuando hay mayor cantidad de partículas y menores valores de temperatura cuando la cantidad es menor.

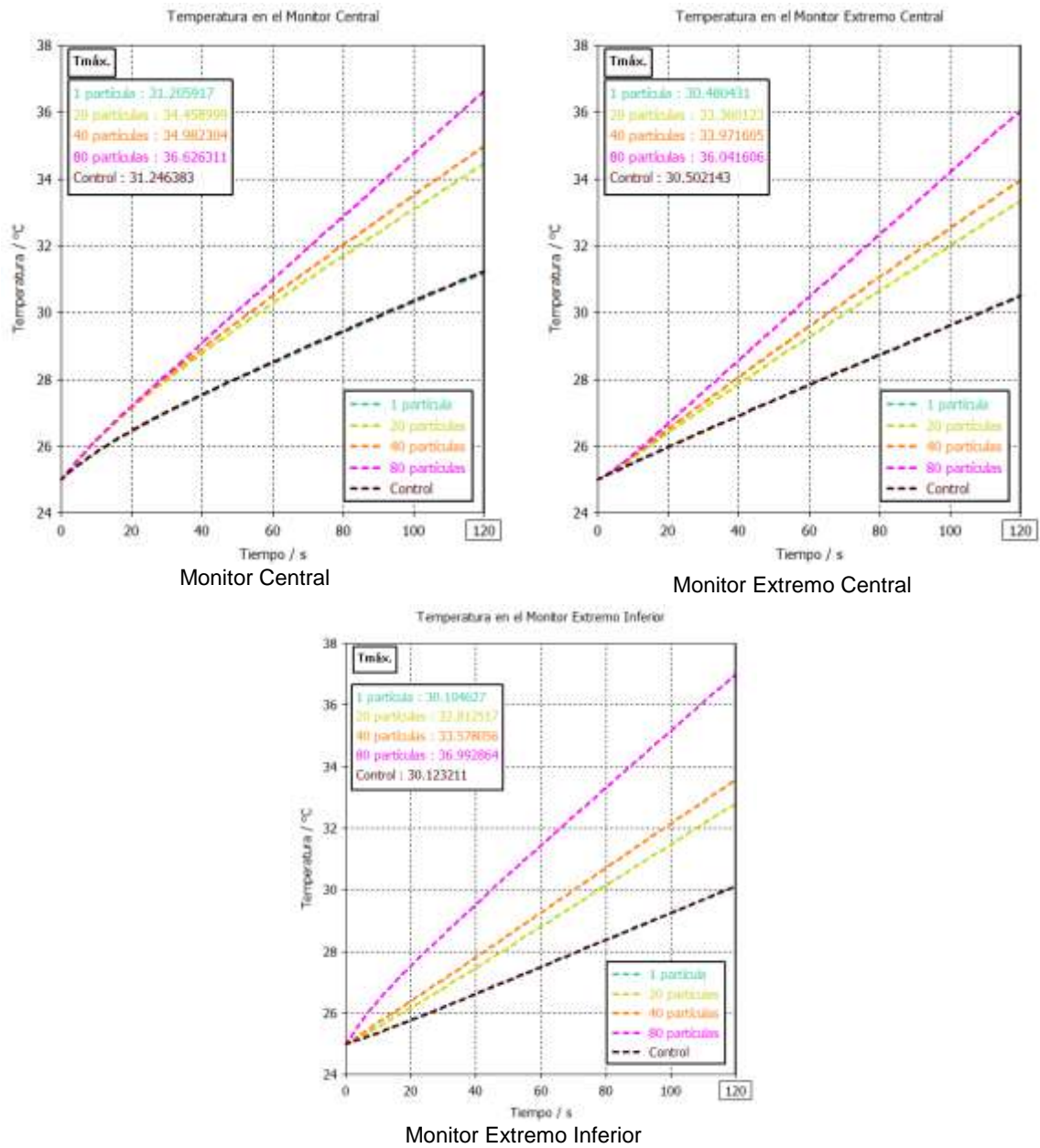


Figura 30. Temperatura medida en los modelos con partículas de 0.01 cm de diámetro.

4. ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS

4.1 MODELO DE CONTROL

Analizando los resultados obtenidos a partir de la simulación del modelo de control en la Figura 20 y la Figura 21, se evidencia que, debido al efecto de relajación mencionado en la sección 3.1.2, se presentan pérdidas volumétricas y como consecuencia, se manifiesta un aumento de temperatura desde el centro del modelo de simulación, esto se puede comprobar en la Figura 22 observando que el monitor central presenta una temperatura máxima mayor que los demás monitores. Además, si se aplica una regresión lineal a las gráficas de la Figura 22 y luego se calcula su derivada con respecto al tiempo, se obtiene el valor de la pendiente que corresponde a la tasa de aumento de temperatura en el tiempo para cada monitor puntual; en la Tabla 5 se presentan dichos valores calculados. Asimismo, es posible indicar que para el modelo de control hay una tasa promedio de aumento de temperatura igual a $0.04573 \text{ }^\circ\text{C/s}$ según los valores de los tres monitores puntuales.

Monitores del modelo de control	Monitor Central	Monitor Extremo Central	Monitor Extremo Inferior	Promedio
Tasa de aumento de temperatura $^\circ\text{C/s}$	0.05366	0.04637	0.04253	0.04573

Tabla 5. Tasa de aumento de temperatura en el modelo de control.

Tomando como referencia los valores que se presentan en la tabla anterior, se realizará el análisis de los demás casos de estudio, teniendo también en cuenta que para estos casos se realizó una variación de concentración de la solución o del material por el que están compuestas las partículas.

Adicionalmente, es importante resaltar que si se observa el perfil de pérdidas volumétricas de la Figura 21 y el perfil de variación de temperatura del Anexo A, se puede distinguir una correspondencia con la zona donde se concentra la mayor cantidad de pérdidas y la zona en donde empieza a aumentar la temperatura, lo

cual demuestra como las pérdidas volumétricas tienen gran relevancia en el aumento de temperatura.

4.2 VARIACIÓN DEL MATERIAL EN LAS PARTÍCULAS DE 8 MILIMETROS DE DIÁMETRO

Entre los resultados obtenidos en el presente caso de estudio, se cuenta con la intensidad de campo eléctrico que se observa en la Figura 24, en ella se muestra la sección transversal de este campo vectorial. A partir de este resultado se realizó el cálculo del valor absoluto de la intensidad de campo eléctrico al interior cada una de las partículas de diferente material, siguiendo una línea vertical que va desde el extremo superior hasta el extremo inferior de las partículas y tiene como longitud su diámetro, tal como se muestra en la Figura 31. Los valores hallados se presentan en la gráfica de la Figura 32.

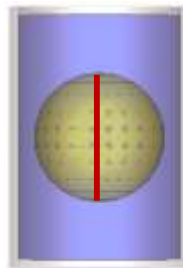


Figura 31. Representación de la línea donde se mide el valor absoluto de la intensidad de campo eléctrico al interior de una partícula.

Adicionalmente, en la Figura 32 se muestra también el valor absoluto del campo eléctrico en el centro de las partículas, siendo 0 V/m en las partículas de oro y cobre y ~13.12 V/m en la partícula de madera. Cabe aclarar que las gráficas para los modelos con las partículas de oro y cobre, se encuentran superpuestas y, además, que según las mismas gráficas, el campo eléctrico no es completamente cero en todo el interior de las partículas, ya que se observa un ligero aumento de su valor en los extremos, lo cual evidencia penetración del campo eléctrico en dichas partículas metálicas.

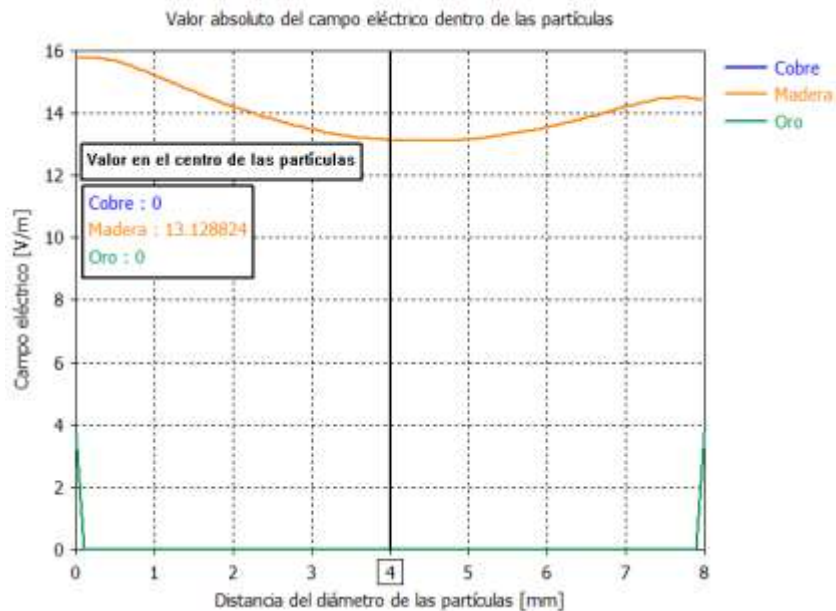


Figura 32. Valor absoluto de la intensidad de campo eléctrico al interior de las partículas de 0.8 cm de diámetro.

Por otro lado, se evaluó el valor de las pérdidas volumétricas en el interior de cada partícula, siguiendo la misma línea vertical de la Figura 31 mencionada anteriormente; este resultado se encuentra representado en la Figura 33. Como se puede observar en esta figura, el valor de pérdidas volumétricas no es nulo en el centro la partícula de madera, pero si lo es para las partículas de oro y cobre. Por otro lado, estas últimas presentan pérdidas volumétricas en los extremos superior e inferior debido a la leve penetración que tiene el campo eléctrico en este punto.

Con respecto a los resultados en el ambiente térmico presentados en la Figura 27, correspondientes a la temperatura medida en los monitores puntuales, los modelos presentan diferentes tasas de aumento de temperatura, los cuales se muestran en la Tabla 6. Para el cálculo de estos valores se realiza el mismo procedimiento de regresión lineal y cálculo de la derivada efectuado para el modelo control en la sección anterior.

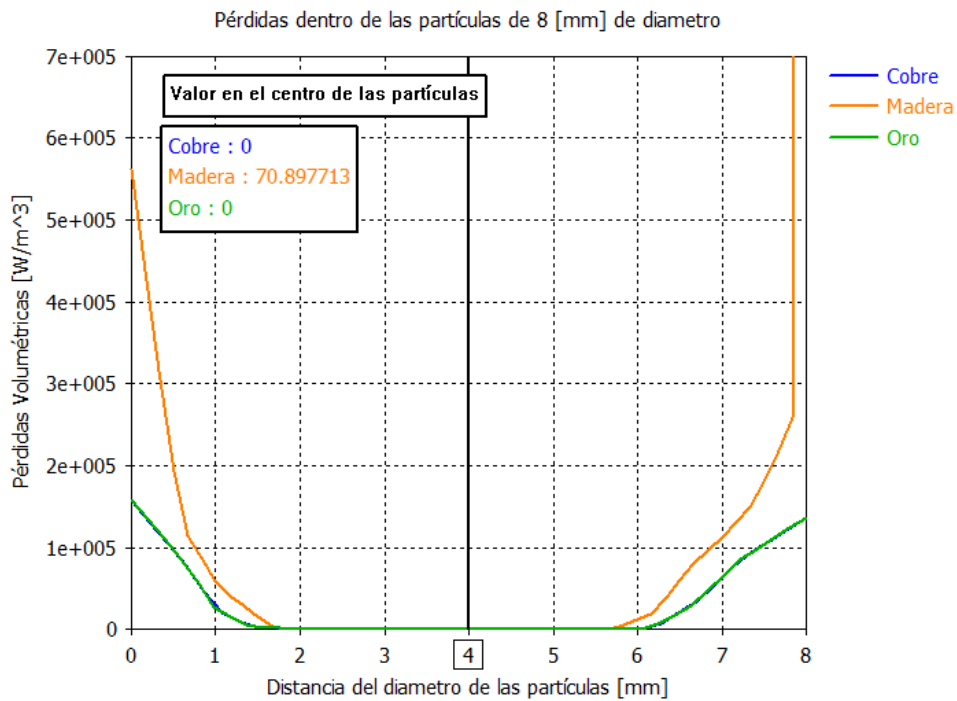


Figura 33. Valor de pérdidas al interior de las partículas de 0.8 cm de diámetro.

Tasa de aumento de temperatura °C/s	Monitor Central	Monitor Extremo Central	Monitor Extremo Inferior	Promedio
Partícula de Oro	0.06125	0.06043	0.06642	0.06270
Partícula de Cobre	0.05724	0.05677	0.06386	0.05929
Partícula de Madera	0.20057	0.24073	0.17869	0.20666

Tabla 6. Tasa de aumento de temperatura en los modelos de partículas de oro, cobre y madera de 0.8 cm de diámetro

4.3 VARIACIÓN DE LA CONCENTRACIÓN DE PARTÍCULAS DE 0.01 CENTÍMETROS DE DIÁMETRO

Para los resultados del presente caso de estudio se representó la cantidad de partículas presentes en la solución con una unidad de concentración. De esta manera se realizó el cálculo de la fracción volumétrica del oro de acuerdo al cociente entre el volumen que ocupan las partículas de oro y el volumen total de la solución.

En la Tabla 7 se presentan los valores calculados para la concentración del oro en los modelos del caso de estudio.

$$\text{Fracción volumétrica}_{\text{oro}} = \frac{\text{Volumen de las partículas de oro}}{\text{Volumen Total}} \quad (15)$$

Cantidad de partículas	1	20	40	80
Fracción volumétrica $\left[\frac{m^3}{m^3}\right] \times 10^{-6}$	0.444	8.889	17.778	35.556

Tabla 7. Concentración de oro en los modelos con partículas de 0.01 cm de diámetro.

Adicionalmente, para cada uno de los valores de concentración se realizó el cálculo de la tasa de aumento de temperatura en los respectivos tres monitores puntuales y adicionalmente su promedio, siguiendo el mismo procedimiento realizado para el modelo de control. De esta manera, en la Tabla 8 se presentan dichos valores calculados y en la Figura 34 se presenta la gráfica que relaciona el valor promedio de la tasa de aumento de temperatura con la concentración de oro.

Fracción volumétrica $\frac{m^3}{m^3} \times 10^{-6}$	Tasa de aumento de temperatura en los monitores puntuales °C/s			Tasa de aumento de temperatura promedio °C/s
	Monitor Central	Monitor Extremo Central	Monitor Extremo Inferior	
0.444	0.05284	0.04608	0.04250	0.04714
8.889	0.08111	0.07082	0.06492	0.07229
17.778	0.08547	0.07603	0.07151	0.07767
35.556	0.09704	0.09272	0.10114	0.09697

Tabla 8. Tasa de aumento de temperatura en los modelos con partículas de 0.01 cm de diámetro.

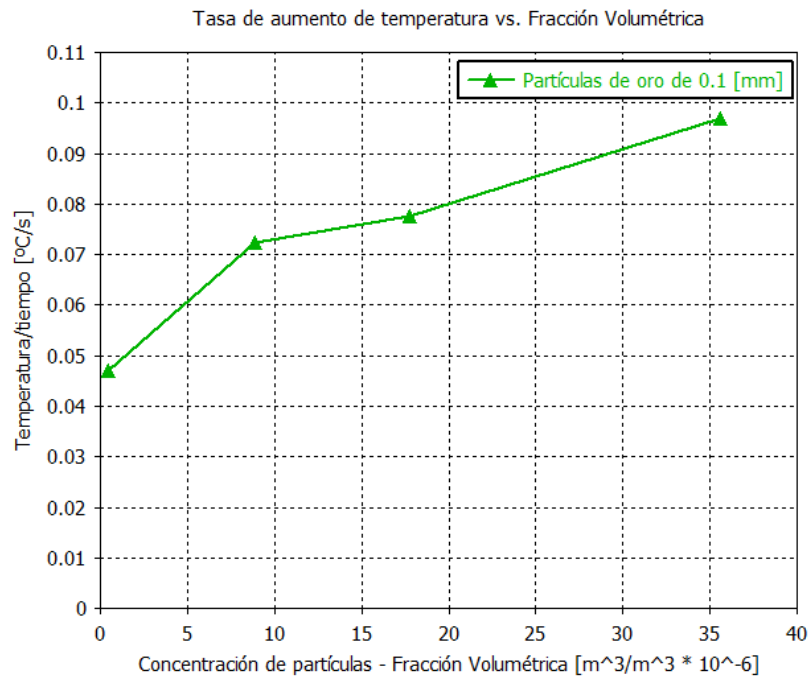


Figura 34. Tasa de aumento de temperatura promedio en relación con la concentración de oro.

5. CONCLUSIONES

Tras haber desarrollado el proceso previo de configuración y posterior ejecución de las simulaciones, al igual que la obtención de los resultados para su análisis, se llegan a las conclusiones expuestas a continuación.

Cuando se expone una muestra que contiene algún tipo de material, ante un campo de radiofrecuencias generado entre dos placas paralelas, hay manifestación de algún tipo de mecanismo que ocasiona el aumento de temperatura. Esto se evidencia en todos los casos de estudios aquí expuestos por medio de las gráficas presentadas en los Anexos y los resultados en el ambiente térmico correspondientes, tanto en las muestras compuestas por material dieléctrico, como aquellas que se componen por material dieléctrico y al menos una partícula metálica. Adicionalmente, haciendo una comparación entre las gráficas de pérdidas electromagnéticas y las presentadas en los Anexos, se evidencia una gran correspondencia de las zonas donde hay mayores pérdidas y las zonas donde hay mayor temperatura.

A partir del caso de estudio del modelo de control, se comprueba la manifestación del efecto de relajación por la polarización de la muestra de agua, la cual se somete al campo eléctrico generado por las placas paralelas y el cual varía a una frecuencia determinada, en este caso, 13.56 MHz. Debido a esta manifestación la muestra se calienta a una tasa de temperatura 0.04573 °C/s.

Con respecto a la variación del material empleado para las partículas del caso de estudio 2, se puede evidenciar, a partir de las Figuras 32 y 33, que el campo eléctrico penetra en las partículas metálicas y debido a esta penetración se obtienen pérdidas volumétricas medidas en W/m^3 por efecto joule. De acuerdo a las tasas de aumento de temperatura calculadas y presentadas en la Tabla 6, se tienen unos valores promedio de 0.06270 y 0.05929 °C/s para los modelos con una partícula de oro y cobre de 0.8 cm, respectivamente. Sin embargo, aunque la manifestación del efecto

joule es evidente, si se comparan estos últimos valores con la tasa de aumento de temperatura del modelo que contiene la partícula de madera de 0.8 cm, es evidente que la manifestación del efecto de relajación cuando se polariza este último modelo es mucho mayor, con un valor de 0.20666 °C/s, es decir, casi 4 veces mayor. Por lo anterior, se puede decir que, en cuanto a efectos que producen aumento de temperatura, el efecto de relajación en los dieléctricos tiene mayor presencia que el efecto de joule, este último no aporta de manera significativa al aumento de temperatura, es decir, ambos efectos están presentes, pero es el efecto de relajación el más presente en los resultados.

Sin embargo, no se puede excluir que efectivamente se puede obtener un aumento de temperatura de una solución acuosa que contiene partículas metálicas y esto se puede afirmar gracias al análisis de los resultados obtenidos en el caso de estudio 3. De manera positiva, de acuerdo a la gráfica de la Figura 34, se obtiene una mayor tasa de aumento de temperatura conforme aumenta la concentración de partículas metálicas, llegando a obtener una tasa cercana al 0.1 °C/s. Este resultado es relevante para analizar en aplicaciones, por ejemplo, médicas para el tratamiento de cáncer por hipertermia, en donde es importante entrar a analizar, en futuras investigaciones, factores adicionales como el tiempo de exposición a la radiofrecuencia o el límite máximo de concentración de partículas que puede suministrarse a un paciente.

BIBLIOGRAFIA

CHAPLIN, Martin. Water and Microwaves. [En línea]. Water Structure and Science. Este trabajo es licenciado con Creative Commons Atributions-Noncommercial-No Derivative Works 2.0 UK: England & Wales License. (Actualizado el 6 de noviembre de 2017) (Consultado en diciembre 2017) Disponible en http://www1.lsbu.ac.uk/water/microwave_water.html

CHEONG, Seong-Kyun; KRISHNAN, Sunil & CHO Sang H. “Modeling of plasmonic heating from individual gold nanoshells for near-infrared laser- induced thermal therapy”. En: *Medical Physics*; Vol. 36, 2009; pp. 4664–4671. DOI: 10.1118/1.3215536

CHICHET, Adam, *et al.* “Hyperthermia – description of a method and a review of clinical applications”. En: *Reports of Practical Oncology and Radiotherapy*; Vol. 12, No.5, 2007; pp. 267-275

COLLINS, Christian B.; *et al.* “Radiofrequency heating pathways for gold nanoparticles”. En: *Nanoscale*, Vol. 6 (15), 2014; pp. 8459-8472. DOI: 10.1039/c4nr00464g

CST Studio Suite 2017 [Software]. Material Library [2017]

CST Support Team. CST Studio Suite 2017 Help. [Manual de usuario]. En: *Home / 3D Simulation / Post Processing / Post Processing Results / Loss and Q Calculation Overview* [2017]

GLAZER, Evan S. & CURLEY, Steven A. “Non-invasive radiofrequency ablation of malignancies mediated by quantum dots, gold nanoparticles and carbon nanotubes”. En: *Therapeutic Delivery*, Vol. 2 (10), 2011; pp. 1325–1330. PMID: PMC4090036

GOLDBLITH, Samuel A. “Basic principles of microwave and recent developments”. Contribution N° 889 Department of Nutrition and food science. Massachusetts Institute of Technology. Cambridge, Massachusetts. En: *Advances in Food Research*, Vol. 15, 1966; pp. 277-301. PMID: 4860243

HERGT, Rudolf; *et al.* “Magnemite nanoparticles with very high AC-losses for application in RF-magnetic hyperthermia”. En: *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Vol. 270 (3), 2004; pp. 345–357. DOI: 10.1016/j.jmmm.2003.09.001

MAKAROV, Sergey N.; Noetscher, Gregory M. and Nazarian, Ara. “Low-Frequency Electromagnetic Modeling for Electrical and Biological Systems Using MATLAB®”. Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons, 2016.

MARTÍN CORDERO, Jorge E. “Agentes Físicos Terapéuticos”. La Habana: *Editorial Ciencias Médicas*, 2008.

MORAN, Christine H.; *et al.* “Size-Dependent Joule Heating of Gold Nanoparticles Using Capacitively Coupled Radiofrequency Fields”. En: *Nano Research*, Vol. 2 (5), 2009; pp. 400-405. DOI: 10.1007/s12274-009-9048-1

PURCELL, Edward M. “Electricidad y magnetismo, Berkeley physics course – Volumen 2” Edición en español, Barcelona: Editorial Reverté, 1988.

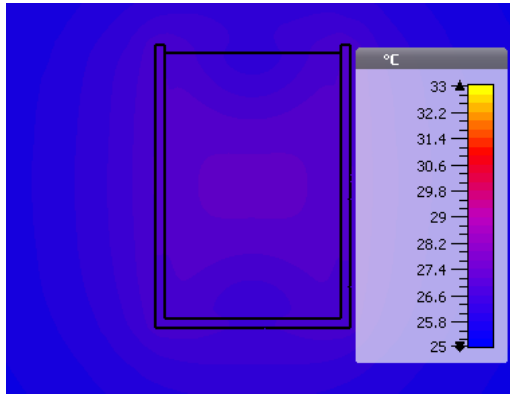
TANG, Juming; HAO, Feng & LAU Ming. “Microwave heating in food processing”. Department of Biological Systems Engineering, Washington State University. Pullman, Washington. En: *Advances in Bioprocessing EGINEERING*, Vol. 1, Chapter 1, 2002; pp. 1-44. DOI: 10.1142/9789812706584_0001

THOMAS, Reju; PARK, In-Kyu & JEONG, Yong Yeon. “Magnetic Iron Oxide Nanoparticles for Multimodal Imaging and Therapy of Cancer”. En: *International Journal of Molecular Sciences*, Vol. 14 (8), 2013; pp. 15910-15930. DOI: 10.3390/ijms140815910

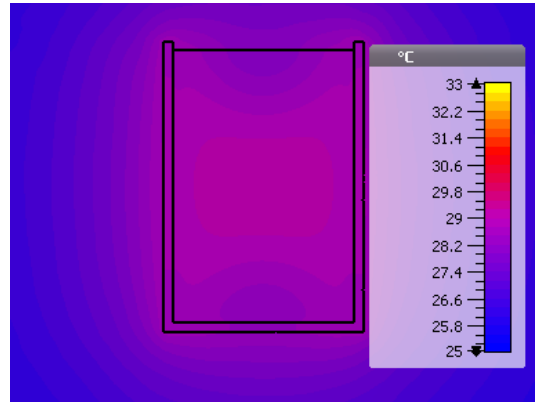
VERA HERNÁNDEZ, Arturo, *et al.* “Hipertermia electromagnética, una alternativa para el tratamiento del cáncer: antecedentes, aspectos físicos y biológicos”. En: *Revista Mexicana de Ingeniería Biomédica*; Vol. XXII, No. 2 (abril-septiembre 2001); pp. 78 – 88

ANEXOS

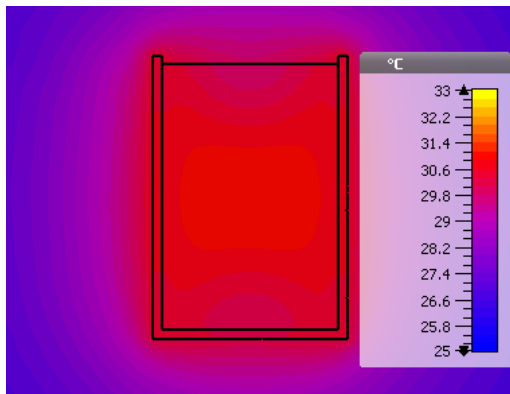
Anexo A. Perfiles de variación de temperatura en el modelo de control.



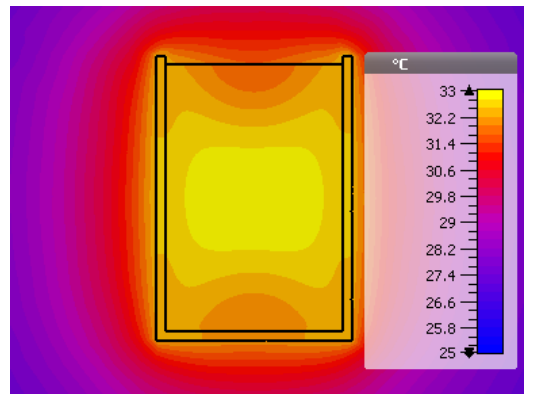
30 segundos



60 segundos

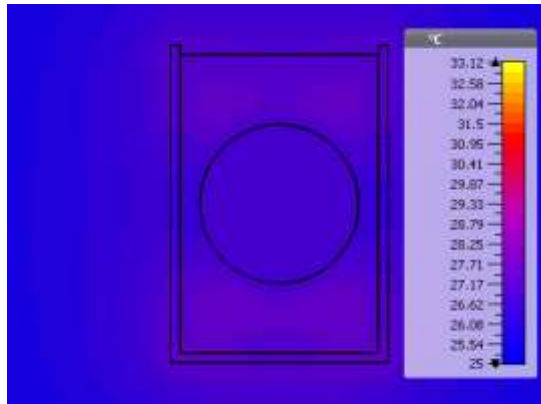


90 segundos

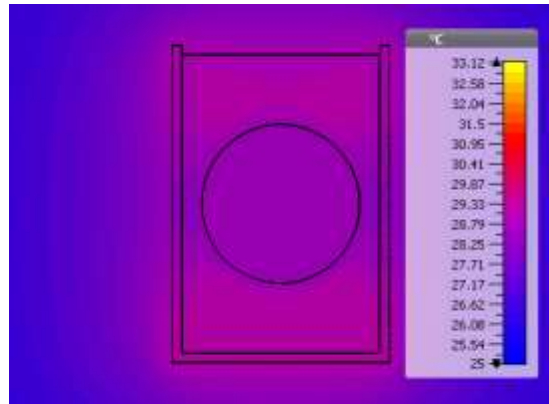


120 segundos

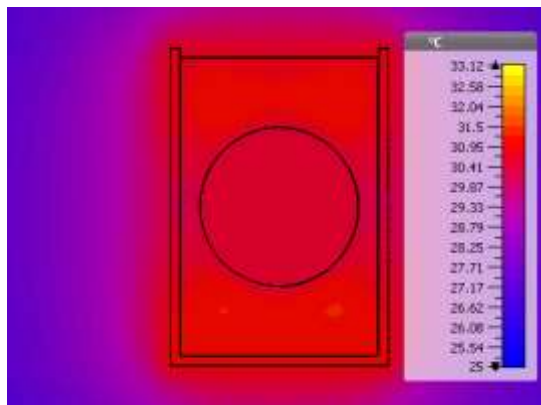
Anexo B. Perfiles de variación de temperatura en el modelo con una partícula de oro.



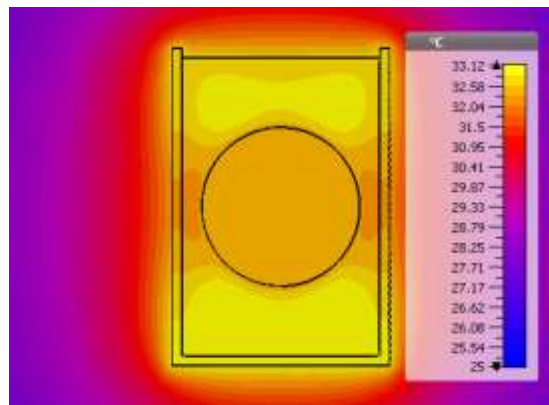
30 segundos



60 segundos

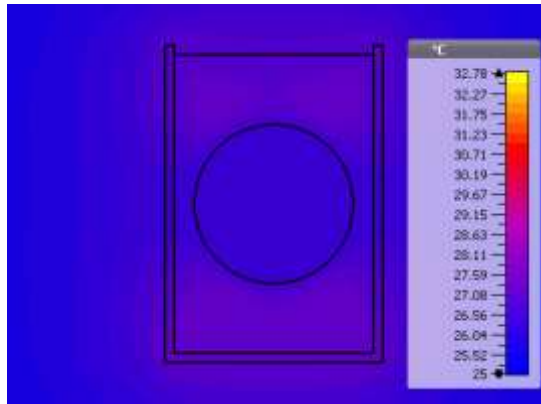


90 segundos

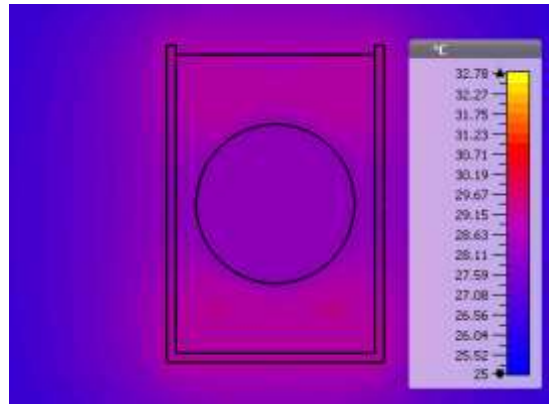


120 segundos

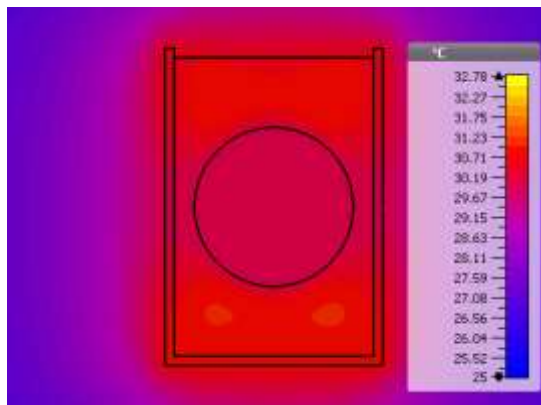
Anexo C. Perfiles de variación de temperatura en el modelo con una partícula de cobre.



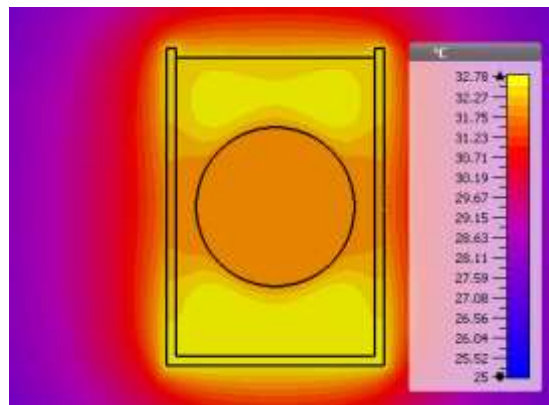
30 segundos



60 segundos

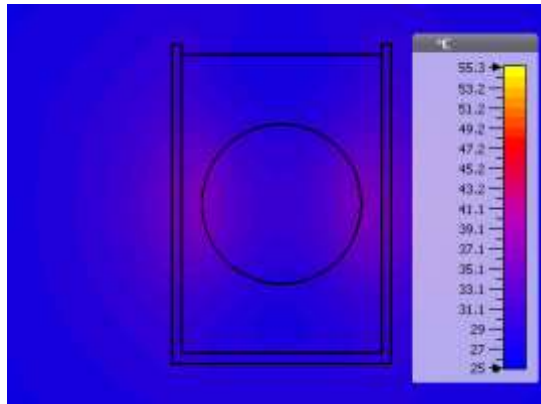


90 segundos

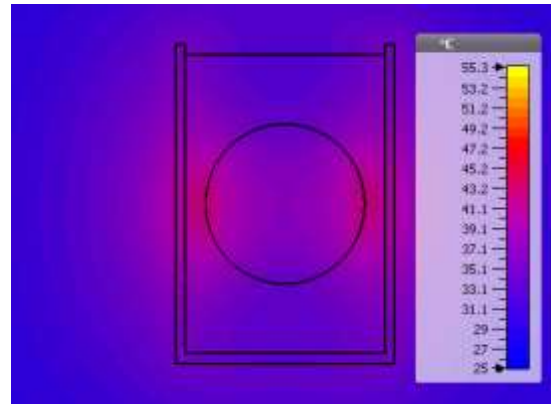


120 segundos

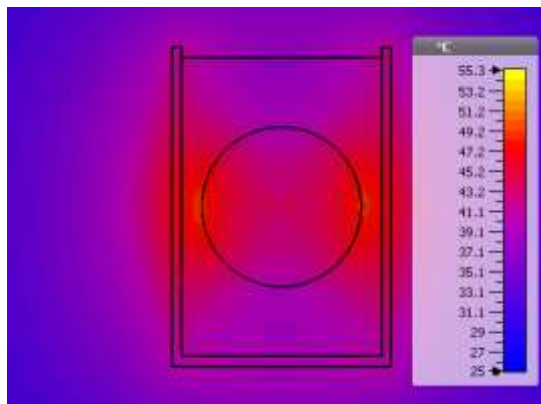
Anexo D. Perfiles de variación de temperatura en el modelo con una partícula de madera.



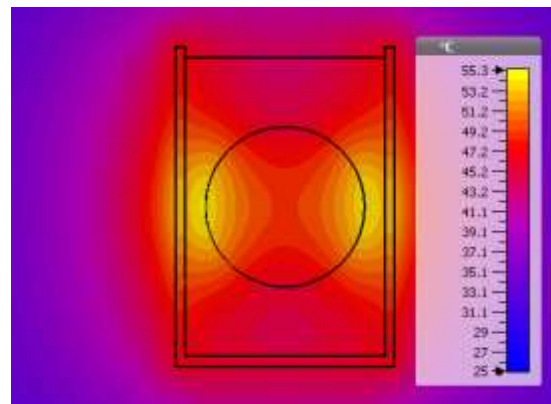
30 segundos



60 segundos

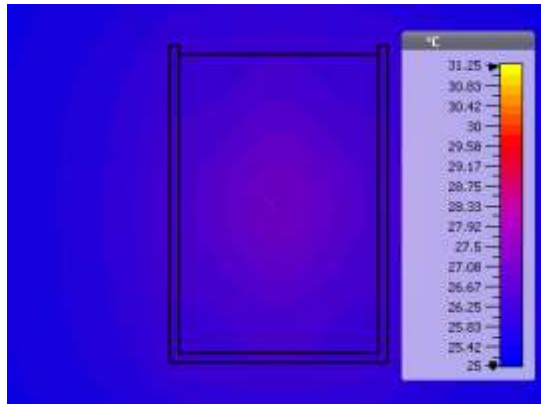


90 segundos

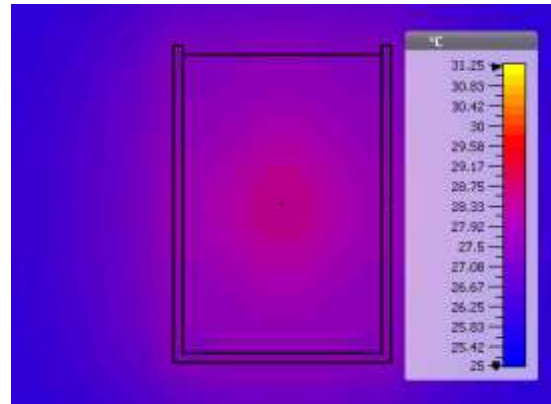


120 segundos

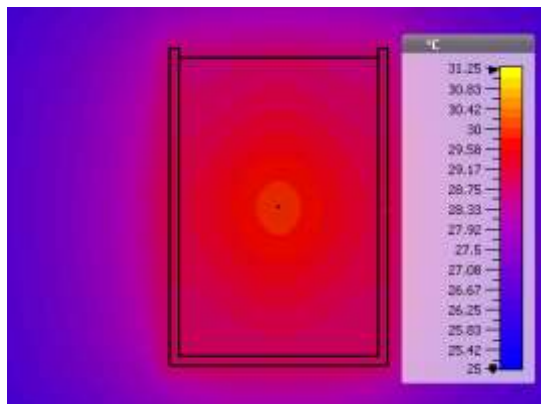
Anexo E. Perfiles de variación de temperatura en el modelo con 1 partícula de 0.01 cm de diámetro.



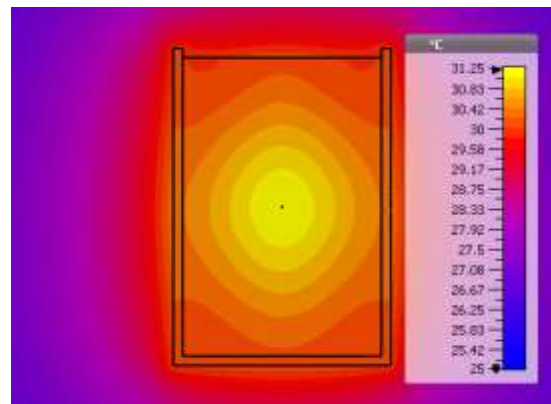
30 segundos



60 segundos

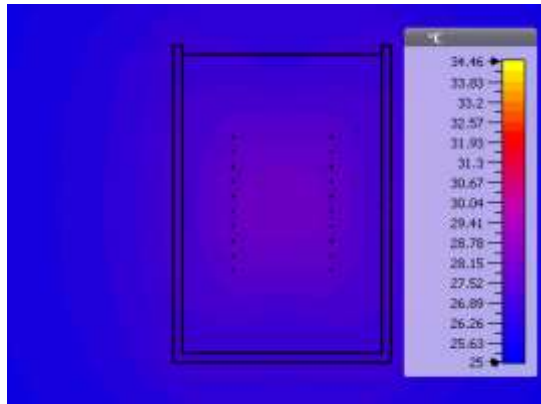


90 segundos

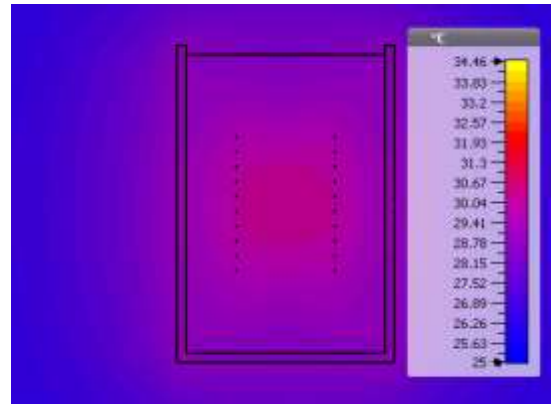


120 segundos

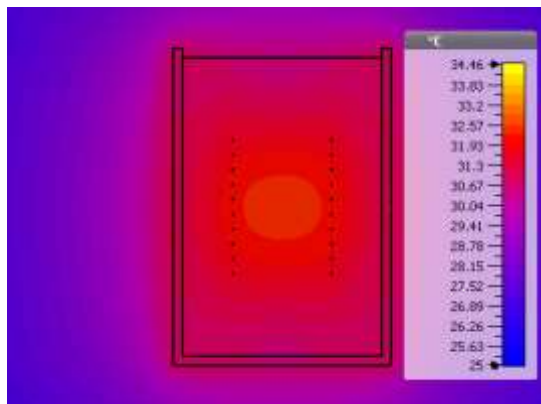
Anexo F. Perfiles de variación de temperatura en el modelo con 20 partículas de 0.01 cm de diámetro.



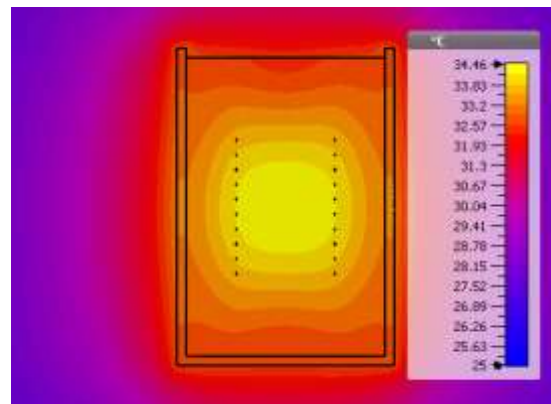
30 segundos



60 segundos

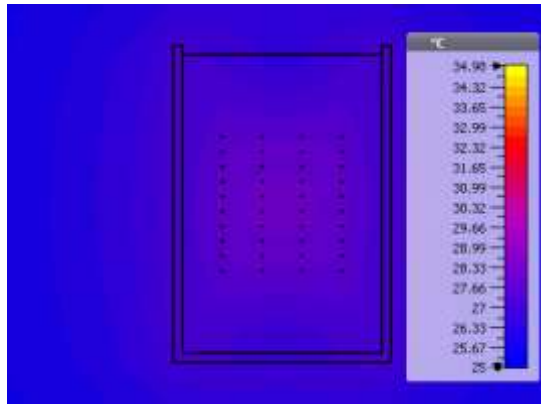


90 segundos

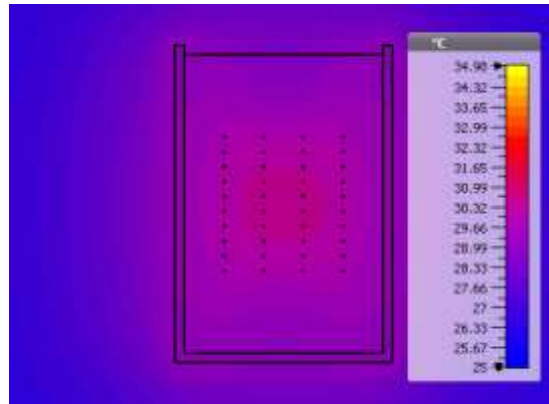


120 segundos

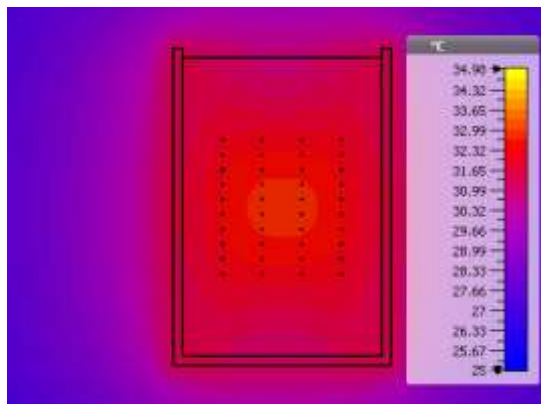
Anexo G. Perfiles de variación de temperatura en el modelo con 40 partículas de 0.01 cm de diámetro.



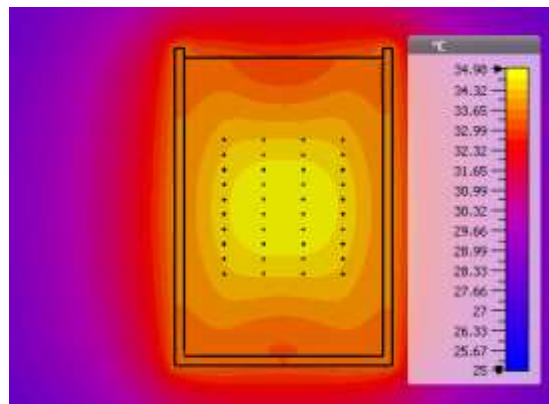
30 segundos



60 segundos

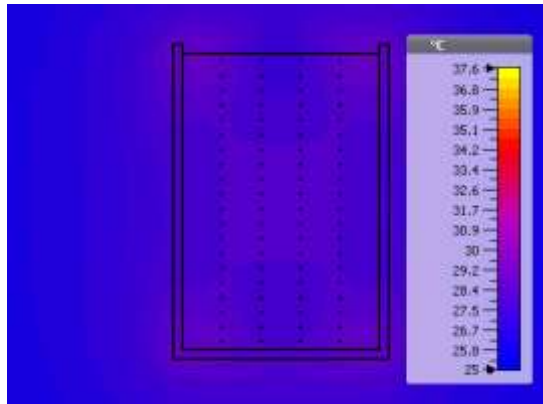


90 segundos

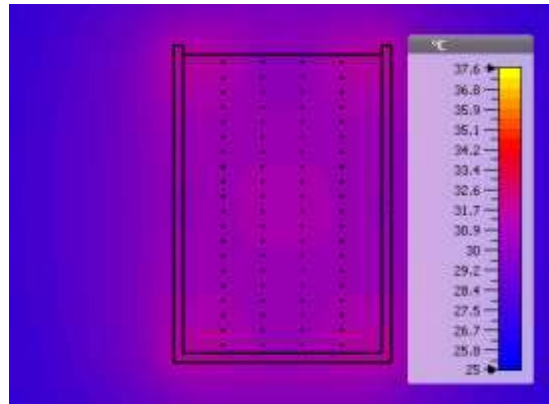


120 segundos

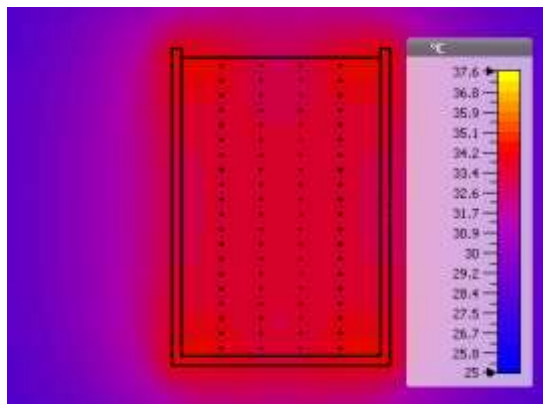
Anexo H. Perfiles de variación de temperatura en el modelo con 80 partículas de 0.01 cm de diámetro.



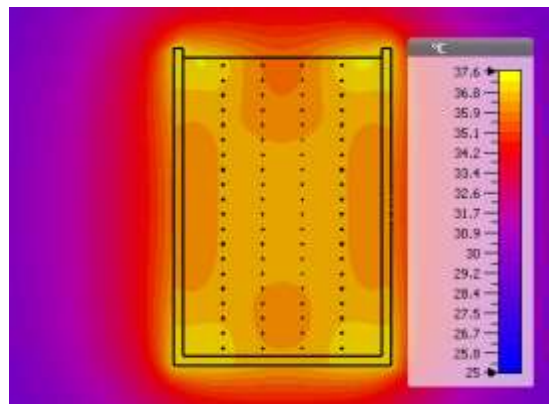
30 segundos



60 segundos



90 segundos



120 segundos