



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

Electrorrotación de Micropartículas con Forma de Discoide
Bicóncavo, Glóbulo Rojo Rígido

Tesis presentada al

Colegio de Física

como requisito parcial para la obtención del grado de

LICENCIADO EN FÍSICA

por

Zulema Abigail Arias Neri

Asesorada por

Dr. José Eladio Flores Mena

y

Dr. Juan Pablo Flores Flores

Puebla Pue.
14 de octubre de 2022



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

Electrorrotación de Micropartículas con Forma de Discoide
Bicóncavo, Glóbulo Rojo Rígido

Tesis presentada al

Colegio de Física

como requisito parcial para la obtención del grado de

LICENCIADO EN FÍSICA

por

Zulema Abigail Arias Neri

Asesorada por

Dr. José Eladio Flores Mena

y

Dr. Juan Pablo Flores Flores

Puebla Pue.
14 de octubre de 2022

Título: Electrorotación de Micropartículas con Forma de Discoide Bicóncavo, Glóbulo Rojo Rígido

Estudiante: ZULEMA ABIGAIL ARIAS NERI

COMITÉ

Dr. Roberto Ramírez Sánchez
Presidente

Dra. Honorina Ruíz Estrada
Secretario

Dr. Juan Nieto Frausto
Vocal

Dr. Eduardo González Jiménez
Vocal

Dr. José Eladio Flores Mena
y
Dr. Juan Pablo Flores Flores
Asesores

Dedicatoria

"Porque de él, y por él, y para él, son todas las cosas. A él sea la gloria por los siglos."

Romanos 11: 36

Santa Biblia

A mi Familia y amigos ...

Agradecimientos

La conclusión de esta etapa de mi vida no habría sido posible sin la gracia de Dios que me ha sostenido hasta el día de hoy, estoy eternamente agradecida con él, y también con mi familia, que sin su apoyo incondicional nada de esto sería posible, por ello quiero agradecer a mi padre Joaquín Arias Morales y a mi madre María Elena Neri Bautista por confiar en mí; gracias por tantos años de provisión, orientación y paciencia, que no les quepa duda de que los amo. A mis hermanos Fátima e Isaac por su cariño y apoyo.

A mi regalo del cielo, Joab Abisaí Pérez Huerta, que sin su amor, su apoyo y su constante motivación este trabajo no sería posible. A mis abuelos, Francisco Neri y María Luisa Bautista, que ya están gozando de la eternidad, donde pronto nos reuniremos.

A todos mis amigos y compañeros que hicieron de la universidad una etapa inolvidable.

A mi jurado por su valiosa retroalimentación, Dr. Roberto Ramírez Sánchez, Dra. Honorina Ruíz Estrada, Dr. Juan Nieto Fraustro y Dr. Eduardo González Jiménez.

Finalmente le agradezco al Dr. José Eladio Flores Mena y al Dr. Juan Pablo Flores Flores por su paciencia, apoyo y dirección en el desarrollo de este trabajo.

A todos ustedes, muchas gracias.

Índice general

Resumen	XV
Introducción	XVII
1. Elementos de la electrocinética	1
1.1. Propiedades físicas de la sangre	1
1.1.1. Eritrocitos o glóbulos rojos	3
1.2. La leucemia	4
1.3. Electroestática	4
1.4. Microfluídica	5
1.5. Electrocinética	6
1.5.1. Doble capa eléctrica	7
1.5.2. Electroósmosis	9
1.5.3. Electroforesis	10
1.5.4. Dielectroforesis	11
1.6. Importancia de la electrorotación	11
1.7. Leyes de conservación de la hidrodinámica	12
1.8. Método de elemento finito	13
2. Formulación de la electrorotación de una partícula metálica	17
2.1. Planteamiento del problema	17
2.2. Interacción dipolo-campo aplicado	19
2.3. Solución analítica para la microesfera	20
2.4. Flujo electroosmótico, ICEO	21
2.5. Coeficiente viscoso γ	22
3. Resultados de la electrorotación	25
3.1. Simulación computacional	25
3.2. Potenciales eléctricos y perfil de velocidades	28
3.3. Polarizabilidades	30
3.4. Velocidad angular de rotación	30
3.5. Coeficiente viscoso	34
4. Conclusiones	37
A. Congreso Nacional de Física 2019	39
B. Congreso División Dinámica de Fluidos 2019	41
C. Congreso Nacional de Física 2020	43

x

ÍNDICE GENERAL

D. Congreso Internacional de Materiales 2022

45

Bibliografía

47

Índice de figuras

1.1.	Flujo de sangre de glóbulo rojo y plaquetas debido a un gradiente de presiones [16]. En (a) se muestran solo a los glóbulos rojos y plaquetas, mientras que, en (b) se muestran arriba un capilar sanguíneo con glóbulos rojos y glóbulos blancos esféricos; y otra vez glóbulos rojos y plaquetas.	2
1.2.	Forma Geométrica de un glóbulo rojo, discoide bicóncavo [10].	3
1.3.	Forma Geométrica de un glóbulo rojo en 3D, discoide bicóncavo [16].	3
1.4.	7
1.5.	Diagrama que muestra la capa de contriones fijos del electrodo, la capa de Stern, y la capa Difusa y sus correspondientes densidades de carga superficial. También es mostrada la variación del potencial eléctrico como función de la distancia y desde la superficie del electrodo, subrayando el potencial de la capa difusa ϕ_d y el potencial en el plano de deslizamiento hidrodinámico ζ , el potencial zeta [18]	8
1.6.	Laboratorio en un chip en el cual se ha utilizado la electroósmosis.	9
1.7.	Electroforesis capilar usada para pruebas de ADN.	10
1.8.	Dispositivos de Electrorrotación. Cuatro electrodos alimentados por corriente eléctrica alterna, desfasados por noventa grados. En la región central se encuentra la solución de micropartículas inmersas en una solución electrolítica, que al sentir el campo eléctrico rotante las micropartículas rotan [18].	12
2.1.	Configuración y diseño experimental. En la figura se aprecia de izquierda a derecha: (a) Configuración usada para generar el campo eléctrico en los experimentos de electrorrotación; (b) Configuración usada en los experimentos de electroorientación [20].	18
2.2.	19
3.1.	27
3.2.	28
3.3.	29
3.4.	30
3.5.	Espectro de Polarizabilidad para diferentes valores del parámetro β , considerando para esto una octava parte de una Lenteja (cilindro corto), ver figura 3.1(a)	31
3.6.	Espectros de Polarizabilidad, ImA y ImB para Lenteja (L) (una octava parte), Esferoide Prolato (EP) y Discoide Bicóncavo (DB), todas las micropartículas con el mismo valor del parámetro $\beta = 2.7$, de un glóbulo rojo.	32
3.7.	Espectro de velocidad angular de rotación de la microleiteja metálica (una octava parte de un cilindro corto), para diferentes valores de β , en la parte superior la contribución debido al flujo electroosmótico y abajo la contribución debido a la del dipolo eléctrico con el campo eléctrico aplicado.	33

3.8. Velocidad angular de rotacion DEP e ICEO de una micropartícula en forma de Lenteja, LO solo tomando una octava parte del cilindro corto y LT tomando todo el cilindro corto.	34
3.9. Espectros de velocidad angular de rotación DEP e ICEO para micropartículas con $\beta = 2.7$, en forma de Lenteja (L), Esferoide Prolato (EP) y en forma de Discoide Bicóncavo (DB).	35
A.1.	39
C.1. Congreso Nacional de Física. Morelia, Michoacán.	43
D.1. Congreso Interacional de Investigación en Materiales. Cancún, Quintana Roo.	45

Índice de tablas

1.1. Cantidad, forma, tamaño y concentración de eritrocitos, leucocitos y plaquetas en sangre humana normal [10].	2
3.1. Estudio 1, solución de la Ecuación de Laplace, obtenemos Potencial eléctrico Φ_z y Φ_y .	28
3.2. Estudio 2, solución de la Navier-Stokes, obtenemos Campo Velocidades y Vector Fuerza Cortante.	29
3.3. Coeficiente viscoso de las partículas conductoras.	35

Resumen

En este trabajo de tesis presentamos un estudio de la electrorrotación de una micropartícula conductora con forma de un Discoide Bicóncavo, “Glóbulo Rojo Rígido”, inmersa en una solución electrolítica acuosa, la cual es sometida a un campo eléctrico rotante de corriente alterna. En este sistema se presentan cuatro efectos relevantes, el primero es el torque eléctrico que ejerce el campo eléctrico externo sobre el dipolo eléctrico inducido, el segundo efecto relevante se debe a que los iones de la doble capa al sentir el campo eléctrico aplicado generan un flujo, llamado flujo electrosmótico, que aplica un torque sobre la micropartícula, el tercer efecto es el movimiento browniano de la micropartícula debido a la solución electrolítica donde está inmersa. Finalmente, el cuarto efecto es la influencia del substrato sobre la micropartícula. Dos efectos relevantes son considerados en este estudio, a saber, el torque eléctrico que ejerce el campo rotante sobre el dipolo inducido sobre la micropartícula en forma de lenteja y el torque que ejerce el flujo electrosmótico sobre la microlenteja, este último efecto se debe a la acción que ejerce el campo eléctrico sobre los perfiles de densidad de la doble capa eléctrica.

La motivación para realizar este trabajo de tesis se debe a que la leucemia se genera debido a la producción por parte de la médula espinal de células anormales de la sangre, en particular los glóbulos rojos anormales. Considerando a los glóbulos rojos como partículas conductoras, a través del fenómeno de electrorrotación, proponemos por medio de los espectros de electrorrotación y polarización caracterizar dichas partículas conductoras.

En condiciones estacionarias la velocidad angular de rotación de la microlenteja tiene dos partes, la que es debida al torque eléctrico y la que es debida al flujo electrosmótico (ICEO). Para la determinación de la velocidad angular de rotación debido al torque sobre el dipolo resolvemos la ecuación de Laplace, asumiendo la consideración de doble capa delgada. Con el potencial eléctrico calculado obtenemos las contribuciones del dipolo en el plano de rotación, llamadas A y B. Se encuentra que la velocidad angular debido al torque eléctrico es proporcional a la parte imaginaria de A y B. Mientras que, para la determinación de la velocidad angular ICEO hacemos uso de una expresión que es obtenida por aplicación del Teorema de Reciprocidad para fluidos, para lo cual resolvemos la ecuación de Navier-Stokes, bajo la condición de no deslizamiento.

Para la morfología de un glóbulo rojo, consideramos como primera aproximación la de un cilindro corto (Lenteja) de radio b y altura $2a$, de tal manera que el parámetro que caracteriza el tamaño de la lenteja es el coeficiente $\beta = b/a$. En esta aproximación hacemos un estudio de los espectros de electrorrotación y de polarización para varios valores del coeficiente β , en particular para los valores de $\beta = 2.3, 2.7$ y 3.2 . Como segunda aproximación a la morfología de un glóbulo rojo consideramos la de una partícula con forma de Esferoide Prolato (EP) para un valor de $\beta = 2.7$. Finalmente, consideramos para la morfología del glóbulo rojo la de una partícula con forma de Discoide Bicóncavo (DB), con $\beta = 2.7$, que es la forma aceptada para un glóbulo rojo.

Presentamos como resultados un análisis comparativo de los espectros de electrorrotación de las partículas consideradas en el párrafo anterior, así como el coeficiente viscoso de rotación de estas partículas.

Introducción

En la actualidad las teorías de gases y sólidos están mucho más desarrolladas que la teoría de líquidos; la interacción intensa entre partículas y el alto grado de desorden hacen que el análisis teórico de líquidos sea difícil. Las condiciones propicias para la existencia del estado líquido ocupan una región relativamente pequeña del enorme rango de temperaturas y presiones existentes en el universo. Los fluidos cargados son sistemas en estado líquido que abundan en la naturaleza. Las soluciones iónicas y los sistemas dispersos de micropartículas que de manera general son conocidos como coloides son ejemplos de fluidos cargados. Estos sistemas se suelen clasificar de diferentes maneras. Por la concentración, tamaño de las partículas, la carga de éstas, así como por algunas de sus características químicas. Todos estos sistemas presentan una fenomenología muy rica y compleja, y en esta fenomenología están contenidos algunos de los problemas fundamentales de la física moderna, como son el problema de potencial de largo alcance y el problema de la descripción de un sistema finito, es decir, limitado por fronteras físicas, en el cual sus partículas constituyentes interactúan con un potencial que no depende linealmente de la concentración de éstas [1].

El estudio de los líquidos es uno de los tópicos de gran relevancia y actualidad en la física estadística. La complejidad de los fenómenos relacionados con estos fluidos y la innumerable variedad de tecnologías y aplicaciones basadas en éstos, hacen de la teoría de líquidos un campo de la física sumamente atractivo y que presenta un enorme número de interrogantes para la ciencia básica. Este panorama se extiende aún más cuando consideramos a los fluidos cargados. En éstos, las fuerzas coulombianas de alcance largo introducen problemas adicionales en su tratamiento. Los fluidos cargados, también llamados sistemas coulombianos, tienen ciertas propiedades que están ausentes en fluidos compuestos de partículas neutras y muchas de las características que los distinguen están asociadas, de alguna manera, con el decaimiento r^{-1} del potencial de Coulomb. Dentro de los sistemas de fluidos cargados tenemos entre otros a los siguientes: sales fundidas, soluciones electrolíticas, coloides (solución coloidal o dispersión coloidal) y las suspensiones. En los dos primeros sistemas, los aniones y cationes son de tamaño y carga comparables, mientras que, los coloides son suspensiones estables que contienen macroiones y contraiones microscópicos, los macroiones que tienden a pegarse tienen un tamaño entre los 10 y 100 nanómetros; finalmente, las suspensiones son una mezcla heterogénea, sustancias compuestas por un sólido fino disperso en un líquido (micropartículas con tamaño mayor a 1 micra), que con el paso del tiempo tienden a sedimentar. Los sistemas que hemos enlistado varían ampliamente en carácter, pero ellos tienen dos rasgos importantes en común: primero, la electroneutralidad de la carga microscópica total y, segundo, la presencia de portadores de cargas móviles. La condición de neutralidad de la carga total impone una restricción en las concentraciones relativas de los iones. Este efecto da origen al fenómeno de apantallamiento. Así la introducción de una carga externa en el fluido provoca un rearrreglo, o polarización, de la densidad de carga que la rodea, de una manera tal, que el potencial electrostático neto debido a la carga externa y la nube de polarización decae mucho más rápido que el potencial de Coulomb desnudo [2] .

La presencia de portadores de carga móviles juega un papel importante en la determinación de las propiedades dinámicas de los fluidos iónicos. Esto lleva en particular, a nuevas clases de transporte, de las cuales la conducción eléctrica es el ejemplo más familiar. La dinámica o propiedades dependientes del tiempo de fluidos cargados exhibe también algunas características no encontradas en fluidos ordinarios.

En los años 1980 surgió un campo conocido como MEMS (sistemas microelectro - mecánicos). Son sistemas electromecánicos cuyo tamaño total varía aproximadamente entre 1 y 300 micrómetros. La historia en el campo de los MEMS es interesante. Con frecuencia, el año de 1959 es considerado el inicio de la historia de la micro- y nanotecnología. En diciembre de ese año, Richard P. Feynman pronunció un discurso visionario durante la reunión de la APS (American Physical Society) en Caltech. Él no veía ninguna razón física por la cual los 50 volúmenes de la Enciclopedia Británica no se pudieran inscribir en la cabeza de una aguja. Una letra solo debería tener menos de una docena de moléculas. Los primeros dispositivos MEMS se crearon una década después del discurso de Feynman. El primer microengrane fue creado en 1982, el primer micro resorte en 1988 y el primer micromotor se creó en 1989 [3].

Posteriormente, en los años 1990 los MEMS fueron fabricados para aplicaciones químicas, biológicas y biomédicas. Estos sistemas empleaban flujos de fluidos que operaban en condiciones inusuales e inexploradas, lo que naturalmente llevó a la necesidad de crear una nueva disciplina la microfluídica. La microfluídica se puede definir como el estudio de flujos simples o complejos, monofásicos o multifásicos, que son circulantes [4, 5].

Los MEMS empezaron a despegar en el periodo en que estaban hechos a base de silicio, no hubo obstáculos técnicos para hacer sistemas microfluídicos simples [6]. Por lo tanto, el primer sistema cromatográfico de gases en miniatura se creó alrededor de 1975. Este notable dispositivo hizo circular gas a través de microcanales grabados en silicio [6].

La miniaturización y los MEMS dieron origen a la microfluídica en la década de 1990 y hoy todavía constituyen una gran parte de esta joven disciplina. Hoy en día, prevalece una especie de maduración en el dominio de las MEMS, lo que lleva a dedicar menos tiempo a crear nuevos sistemas pero más tiempo dedicado a la investigación de aplicaciones concretas [4].

Una gran cantidad de nuevas tecnologías usan campos eléctricos para manipular y caracterizar pequeñas partículas que se encuentran dispersas en líquidos. Por ejemplo, la orientación y el desplazamiento de nanovarillas pueden ser controlados mediante señales eléctricas aplicadas a microelectrodos [4]; estas nanovarillas, a su vez, pueden ser usadas para la fabricación de transistores, con aplicaciones tan relevantes como la detección y caracterización de ADN [6].

El movimiento de micropartículas metálicas inmersas en un electrolito tiene su origen en la interacción del campo eléctrico con las cargas que se inducen en la interfase líquido-partícula (capa doble eléctrica) [2]. Los mecanismos que tienen lugar como consecuencia de esta interacción son los siguientes: (a) fuerzas y par de fuerzas que aparecen por la interacción del campo eléctrico con los dipolos inducidos, y (b) esfuerzos viscosos sobre la superficie de la partícula originados por la electroósmosis en la interfase líquido-partícula.

Por lo anterior, las técnicas de manipulación tradicionales para objetos macroscópicos no son eficientes para partículas de micro -nanoescala debido al efecto del tamaño. Por ello, se han desarrollado varias técnicas para manipular partículas en micro - nanofluídica. Por lo anterior, la manipulación eléctrica de partículas ha recibido un gran interés en los últimos años, debido al rápido progreso de la nanotecnología, paralelo al desarrollo de técnicas que permiten sintetizar

partículas de tamaño micrométrico y nanométrico. En este tipo de dispositivos que son para la manipulación de partículas son de importancia principal los llamados fenómenos electrocinéticos, en seguida mencionaremos los principales: La electroósmosis consiste en medir el movimiento de un fluido de iones bajo el efecto de un campo eléctrico externo. Mientras que, la electroforesis consiste en el estudio del movimiento de micropartículas cargadas inmersas en una solución electrolítica es actuada por un campo eléctrico externo intenso y un gradiente de presión, este escenario es tal que la movilidad de los componentes de los que está formada se separen, así este mecanismo es utilizado para separar moléculas en sus componentes. Por otra parte, la dielectroforesis se refiere al estudio del movimiento de micropartículas mediante la aplicación de un campo eléctrico no homogéneo, este mecanismo es utilizado en la separación de micropartículas dependiendo de su polarizabilidad y para manipular partículas neutras en microcanales, para inducir el movimiento de células, para atrapar o seleccionar células, o para bombear un fluido [7, 8, 9].

Dentro de las técnicas nuevas de manipulación de micropartículas se encuentra la electrorrotación, que es la rotación de partículas cuando están sujetas a la acción de un campo eléctrico rotante de corriente alterna. Las investigaciones recientes están orientadas al desarrollo de dispositivos para lograr la prevención de enfermedades y el diagnóstico en tiempo real de estas. En la actualidad, especialmente en los países menos desarrollados, hay ciertas demandas insatisfechas en lo que a salud se refiere: como los diagnósticos tardíos que imposibilitan o retrasan las medidas preventivas, los altos costos en tratamientos y los efectos secundarios [3].

La sangre es un fluido complejo el cual al ser bombeado por el corazón es un flujo no Newtoniano, la sangre es una suspensión que consiste esencialmente de elementos celulares : glóbulos rojos (eritrocitos RBC), glóbulos blancos (leucocitos WBC), plaquetas (trombocitos) y plasma, además de sales minerales y proteínas [10]. Una de las enfermedades que impactan en los niños es la leucemia, en esta enfermedad los glóbulos blancos y rojos sufren deformaciones, por lo que, si algún método de caracterización puede contribuir en la detección de estas células deformadas es de importancia fundamental. Los glóbulos rojos son esenciales en el transporte del oxígeno y de otros nutrientes, envueltos de una bicapa lipídica, con forma de esferoide prolato (pero cuya forma es muy flexible) con densidad de carga eléctrica en su superficie externa negativa [11, 12].

En este proyecto de tesis estudiamos el fenómeno de electrorrotación y electro-orientación de una micropartícula conductora, con forma de un Discoide Bicóncavo (Glóbulo Rojo Rígido), por medio de campos eléctricos AC, usando el software comercial COMSOL que usa el método de elemento finito [13]. Se busca entender los fenómenos electrocinéticos los cuales están determinados por la formación de una corriente eléctrica inducida; estos fenómenos están implicados en la manipulación de micropartículas metálicas usando campos eléctricos alternos, estando las micropartículas inmersas en una solución electrolítica. Con este estudio se busca entender el comportamiento de un glóbulo rojo que se asemeja su forma al de una Discoide Bicóncavo, y poder así obtener sus características eléctricas.

En este trabajo de tesis nos propusimos los siguientes objetivos:

- **OBJETIVO GENERAL.** Estudiar la rotación de una micropartícula metálica con forma de Discoide Bicóncavo que es sometida a campos eléctricos alternos, y su interacción con el flujo electroosmótico.
- **OBJETIVOS PARTICULARES.**
 1. Calcular las polarizaciones en las direcciones Y y Z, de una micropartícula conductora con forma de Lenteja, Esferoide Prolato y Discoide Bicóncavo como función de la frecuencia del campo eléctrico.

2. Calcular la velocidad angular con la que rota la micropartícula en forma de Lenteja, Esferoide Prolato y Discoide Bicóncavo, debido al par eléctrico como función de la frecuencia del campo eléctrico rotante.
3. Calcular la velocidad angular con la que rota la micropartícula en forma de Lenteja, Esferoide Prolato y Discoide Bicóncavo debido al par aplicado por el flujo electroosmótico como función de la frecuencia del campo eléctrico rotante.
4. Describir cómo cambian las velocidades anteriores en función de la relación de aspecto geométrico.
5. Calcular el coeficiente de fricción de la micropartícula en diversas formas geométricas.
6. Publicar los resultados en un congreso o foro.

Todos estos objetivos se han cumplido.

El material contenido en esta tesis está organizado de la siguiente forma: En el capítulo uno se hace una breve descripción de los conceptos y de las leyes físicas necesarias para el desarrollo del presente manuscrito de tesis, por ejemplo los elementos más importantes de la microfluídica y la electrocinética. En seguida, en el capítulo dos se presenta la descripción teórica y numérica de nuestro trabajo de tesis, así como la descripción del planteamiento del problema de electrorotación para una microlenteja y el método de solución numérica por medio de la simulación por computadora usando COMSOL. Posteriormente en el capítulo tres se muestran los resultados numéricos y se comparan con resultados teóricos disponibles en la literatura, y se hace una discusión sobre ellos. Finalmente en la sección de conclusiones presentamos lo que a nuestra consideración representan las conclusiones más relevantes de nuestro trabajo de tesis.

Capítulo 1

Elementos de la electrocinética

En este capítulo se presenta una descripción breve de los conceptos relacionados con el desarrollo del presente documento de tesis, tomando en cuenta que el objetivo de este trabajo es obtener el espectro de electrorotación de partículas con la forma de un glóbulo rojo. En la primera sección se presenta una descripción de elementos asociados a la composición de la sangre, en particular sobre algunas características de los glóbulos rojos. En seguida, en la sección 2 describimos una enfermedad relacionada con los glóbulos rojos en niños y adultos mayores, la leucemia, aportar una manera de caracterizar los glóbulos rojos sanos y enfermos es la motivación de este trabajo de tesis. En la tercera sección se revisan brevemente algunos conceptos de la electrostática, dipolo eléctrico, ecuación de Poisson. En seguida en la cuarta sección hablamos de la Doble Capa, un fenómeno que tiene gran relevancia en el estudio de fluidos cargados, electrolitos, sales fundidas, sistemas coloidales y suspensiones acuosas. En la quinta sección revisamos brevemente lo relevante con el área de la Microfluídica, donde los Fenómenos Electrocinéticos son de importancia fundamental, tales como la electroforesis, dielectroforesis y la electrorotación, ésto para entender los mecanismos relacionados con la manipulación de micropartículas inmersas en solución acuosa. En seguida, en la sexta sección, revisamos algunos conceptos relevantes con la teoría de mecánica de fluidos, esto debido a que en el presente trabajo de tesis las micropartículas están inmersas en una solución acuosa en movimiento, ya que, en la electrorotación aparecen flujos. Se revisan los conceptos asociados a la ecuación de Navier-Stokes, ya que se requiere obtener los perfiles de velocidad. Finalmente, se hace una revisión de los conceptos asociados a la técnica de elemento finito, esto porque para obtener la solución numérica se usa el software comercial COMSOL, que se basa en esta técnica para resolver las ecuaciones de la física involucrada.

1.1. Propiedades físicas de la sangre

En el cuerpo humano una parte muy importante es el transporte de sustancias esenciales para la vida, uno de los sistemas vitales es el sistema circulatorio, conformado por el corazón y la red de arterias, venas y capilares, ver figura 1.1 . En esta red que forma el sistema circulatorio fluye la sangre, que es una suspensión formada de elementos celulares que incluyen glóbulos rojos (eritrocitos), glóbulos blancos (leucocitos) y plaquetas (trombocitos). Una persona promedio tiene entre 4.5 y 6 litros de sangre, lo que representa aproximadamente 6 - 8 % del peso corporal en humanos normales y sanos.

En la tabla 1.1 se muestra el número por mm^3 de los eritrocitos, leucocitos y plaquetas, se puede notar que en la sangre hay una mayoría de glóbulos rojos que de glóbulos blancos y de plaquetas. Se muestra también la forma y dimensiones de estas células, en particular nos interesa la forma geométrica de los glóbulos rojos que es de Discoide Bicóncavo. Y finalmente se muestra el porcentaje que ocupan estas células en la sangre [10].

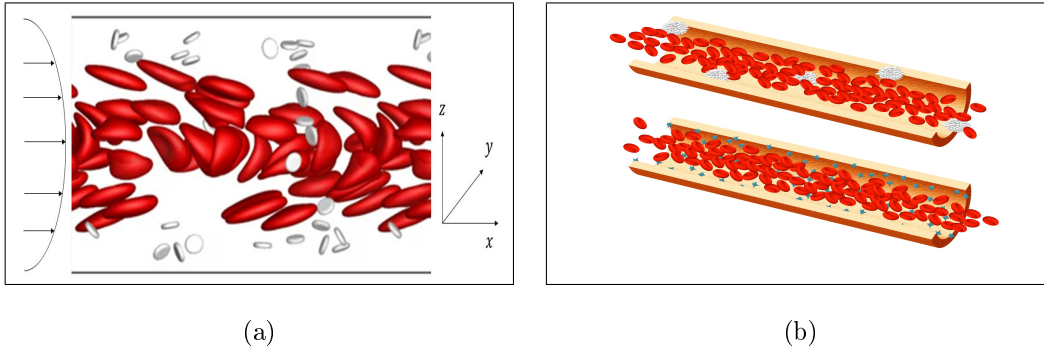


Figura 1.1: Flujo de sangre de glóbulo rojo y plaquetas debido a un gradiente de presiones [16]. En (a) se muestran solo a los glóbulos rojos y plaquetas, mientras que, en (b) se muestran arriba un capilar sanguíneo con glóbulos rojos y glóbulos blancos esféricos; y otra vez glóbulos rojos y plaquetas.

Célula	Número por mm^3	Forma y dimensiones (μm)	Concentración (%) de volumen en la sangre
Eritrocitos	$4 - 6 \times 10^6$	Disco bicóncavo $8 \times 1 - 3$	45
Leucocitos	$4 - 11 \times 10^3$	Aproximadamente esférico $7 - 22$	1
Plaquetas	$250 - 500 \times 10^3$	Redondo u ovalado $2 - 4$	1

Tabla 1.1: Cantidad, forma, tamaño y concentración de eritrocitos, leucocitos y plaquetas en sangre humana normal [10].

La viscosidad de la sangre es una de las características de la sangre que afecta el trabajo requerido para hacer que la sangre fluya a través de las arterias, esta viscosidad está en el rango de 3 a 6 cP (1centiPoise = $10^{-3}Pa \cdot s$). La sangre es un fluido no newtoniano, lo que significa que la viscosidad de la sangre no es una constante con respecto al esfuerzo cortante. Además del esfuerzo cortante, la viscosidad de la sangre depende de la temperatura y del volumen que ocupan los glóbulos rojos. Al porcentaje del volumen de sangre que es ocupado por eritrocitos se le llama hematocrito, y es un parámetro importante que afecta la capacidad de la sangre para transportar oxígeno y dióxido de carbono. Un hematocrito normal en hombres humanos es de 42 a 45 por ciento, cuando está por debajo del 40 por ciento se asocia con anemia. Aquellos mayores del 50 por ciento están asociados con una condición llamada policitemia en la cual el número de glóbulos rojos en un individuo aumenta por encima de lo normal.

Como se ha dicho anteriormente, la sangre es una suspensión de elementos celulares, estos elementos celulares están inmersos en una solución acuosa llamada Plasma, la cual es una solución electrolítica conformada principalmente de agua (aproximadamente 90 – 92 %) en la que se disuelven sustancias orgánicas e inorgánicas, varias proteínas y muchos otros componentes. Su función fisiológica central es transportar estas sustancias, nutrientes, desechos y los elementos celulares formados a través del sistema circulatorio. También desempeña un papel importante en la capacidad que tiene el cuerpo para mantener y regular sus condiciones internas, y en la coagulación.

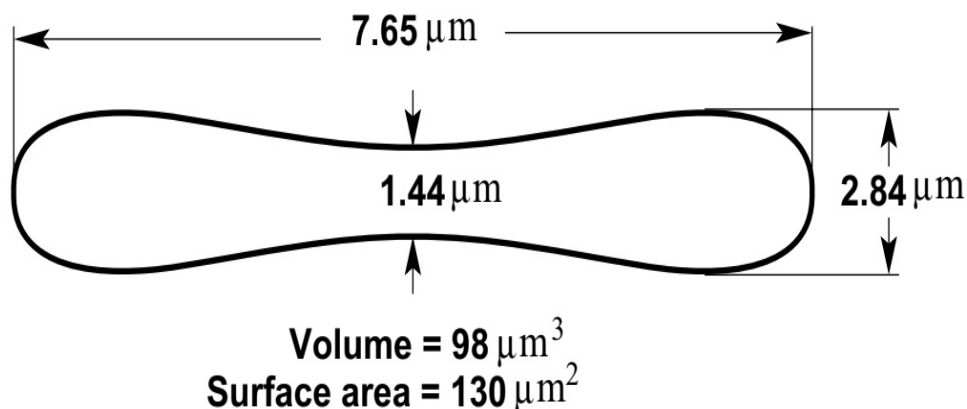


Figura 1.2: Forma Geométrica de un glóbulo rojo, discoide bicóncavo [10].

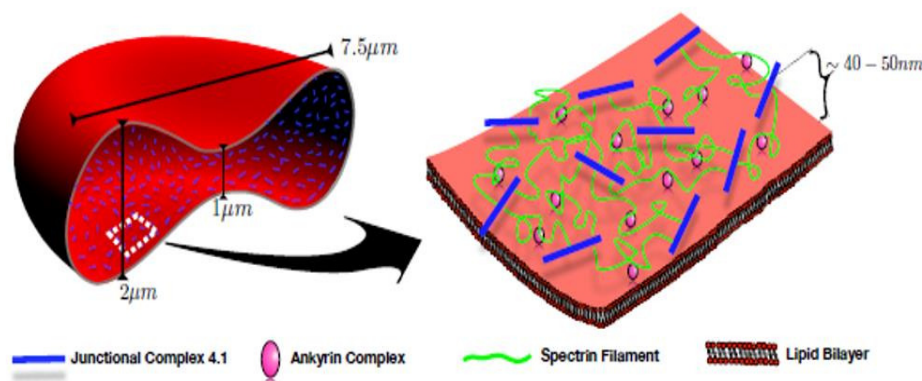


Figura 1.3: Forma Geométrica de un glóbulo rojo en 3D, discoide bicóncavo [16].

1.1.1. Eritrocitos o glóbulos rojos

Los eritrocitos son células muy flexibles llenas con una solución casi saturada de hemoglobina en agua, así como de elementos inorgánicos. La hemoglobina es la proteína dentro de los glóbulos rojos que da a la sangre su color rojo y está involucrada principalmente en el transporte de oxígeno y dióxido de carbono entre los pulmones y los tejidos del cuerpo. Éstos tienen la mayor influencia en las propiedades mecánicas de la sangre. Las propiedades de un eritrocito cambian a medida que envejecen, su vida útil normal en la sangre humana es de 100 a 120 días. La forma de un eritrocito normal es de un discoide bicóncavo con un diámetro de 6 a $8 \mu\text{m}$, un área superficial aproximada de $130 \mu\text{m}^2$ y un volumen aproximado de $98 \mu\text{m}^3$, ver figura 1.2. Su forma se puede cambiar como resultado de efectos mecánicos, químicos o térmicos. Bajo una carga hemodinámica normal, la forma de los glóbulos rojos cambia dramáticamente de un disco bicóncavo a un elipsoide. Esto hace posible que los glóbulos rojos se deformen en gran medida sin una tensión significativa en comparación con una célula de forma esférica. De hecho, las membranas de glóbulos rojos no pueden soportar más del 5 al 10% del área sin hemólisis. [10]

La forma del glóbulo rojo en tres dimensiones es la de un discoide bicóncavo, como se puede ver en la figura 1.3, en ésta se muestran las dimensiones junto con el espesor de la membrana que recubre al glóbulo rojo. Las dimensiones de las figuras 1.2 y 1.3, difieren ligeramente, pero esto es aceptable, ya que, las dimensiones de los glóbulos rojos varían en dimensiones ligeramente entre 6 a $8 \mu\text{m}$.

1.2. La leucemia

La leucemia es una enfermedad asociada a los glóbulos blancos, rojos y plaquetas, ésta es un tipo de cáncer de la sangre que comienza en la médula ósea, el tejido blando que se encuentra en el centro de los huesos, donde se forman las células sanguíneas. El término leucemia significa sangre blanca. Las células cancerosas impiden que se produzcan glóbulos rojos, plaquetas y glóbulos blancos maduros (leucocitos) saludables [14, 15].

La médula ósea produce células que se convertirán en glóbulos blancos, glóbulos rojos y plaquetas. Cada tipo de célula tiene un trabajo diferente:

1. Los glóbulos blancos ayudan a su cuerpo a combatir las infecciones
2. Los glóbulos rojos transportan oxígeno desde sus pulmones a sus tejidos y órganos
3. Las plaquetas ayudan a formar coágulos para detener el sangrado

Cuando se tiene leucemia, la médula ósea produce una gran cantidad de células anormales. Este problema afecta con mayor frecuencia a los glóbulos blancos. Estas células anormales se acumulan en la médula ósea y la sangre, desplazando a las células sanguíneas sanas y dificultando que las células y la sangre hagan su trabajo.

Existen diferentes tipos de leucemia. El tipo de leucemia que tenga depende del tipo de glóbulo que se convierte en cáncer y de si crece rápida o lentamente. El tipo de glóbulo puede ser:

1. Linfocitos: Un tipo de glóbulo blanco
2. Células mieloides: Células inmaduras que se convierten en glóbulos blancos, glóbulos rojos o plaquetas

El presente trabajo de tesis pretende contribuir en la caracterización de los glóbulos rojos, de tal manera que podamos distinguir entre los glóbulos rojos normales y enfermos. Esto se pretende por medio de los espectros de electrorotación, que dependen de la forma geométrica de la partícula en estudio.

1.3. Electroestática

La electroestática trata con los fenómenos donde las cargas fuentes están en estado estacionario (aunque las cargas de prueba pueden estar en movimiento). La ley de Coulomb y el principio de superposición constituyen el insumo físico de la electroestática, lo demás, excepto por las propiedades especiales de la materia, es la elaboración matemática de estas reglas fundamentales.

Con base en lo anterior las ecuaciones diferenciales de los fenómenos que trata la electroestática se basan en las siguientes expresiones, que son consecuencia de la ley de Coulomb y el principio de superposición.

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}, \quad \nabla \times \mathbf{E} = 0, \quad (1.1)$$

donde ρ es la densidad de carga libre y ϵ_0 es la permitividad eléctrica en el vacío. De la segunda expresión se deduce que $\mathbf{E} = -\nabla\Phi$, donde Φ es el Potencial Eléctrico, y sustituyendo esta última expresión en la primera, se obtiene

$$\nabla^2\Phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (1.2)$$

Esta es la llamada ecuación de Poisson, la cual en ausencia de carga libre se reduce a la ecuación de Laplace, que está dada como

$$\nabla^2\Phi = 0 \quad (1.3)$$

Materiales La materia que nos rodea existe en tres estados: fase sólida, fase líquida y fase gaseosa. Esta materia en relación a sus propiedades eléctricas se divide en: materiales conductores, dieléctricos (aislantes) y semiconductores. En los materiales conductores los átomos de estos materiales, los electrones más externos, están débilmente ligados a su correspondiente núcleo de tal manera que electrones a temperatura ambiente se separan de su correspondiente núcleo, mientras que, en los átomos de los materiales aislantes los electrones están fuertemente ligados a temperatura ambiente, así no hay electrones libres. Sin embargo, en los aislantes bajo la acción de campos eléctricos externos se polarizan, debido a un desplazamiento microscópico de la carga en cada átomo, dando origen a dipolos inducidos.

Conductores Debido a lo anterior, en los materiales conductores en condiciones estáticas se presentan las siguientes propiedades:

1. $\mathbf{E} = 0$ el campo eléctrico dentro de un conductor.
2. $\rho = 0$ dentro de un conductor.
3. Cualquier carga neta reside en la superficie.
4. Un conductor es equipotencial.
5. \mathbf{E} es perpendicular a la superficie, solamente fuera del conductor.

Dieléctricos En los dieléctricos, como ya dijimos, los electrones están fuertemente ligados a sus correspondientes átomos, de tal manera que bajo la aplicación de un campo externo aplicado en cada átomo aparece un dipolo, dando origen a una polarización y a una densidad de carga superficial y de volumen, pero a estas cargas se les denomina densidades de carga ligadas. Ya que, estas densidades no se trasladan, de tal manera que el dieléctrico sigue estando eléctricamente neutro.

Fuerza y Torque sobre un dipolo En un dieléctrico en cada átomo polarizado, la carga positiva se mueve ligeramente hacia un extremo, y la carga negativa hacia el otro extremo. De este modo el átomo tiene un dipolo eléctrico \mathbf{p} , el cual apunta en la misma dirección que el campo eléctrico aplicado \mathbf{E} , típicamente este dipolo inducido es proporcional al campo eléctrico aplicado.

$$\mathbf{p} = \alpha \mathbf{E} \quad (1.4)$$

la constante de proporcionalidad α es llamada la polarizabilidad atómica.

Un dipolo en un campo eléctrico aplicado, experimenta un torque \mathbf{N} y una fuerza eléctrica, dado por

$$\mathbf{N} = \mathbf{p} \times \mathbf{E}, \quad \mathbf{F} = (\mathbf{p} \cdot \nabla) \mathbf{E}, \quad (1.5)$$

1.4. Microfluídica

La historia del campo de los Sistemas Microelectromecánicos (MEMS) es interesante. El año de 1959 es considerado el principio de la historia de las Micro y Nano Tecnologías. En diciembre de ese año un discurso visionario fue dado por Richard P. Feynman durante el Encuentro de la American Physical Society en Caltech. Este discurso fue titulado "there is plenty of room at the bottom". El inicio del discurso fue el siguiente:

Me gustaría describir un campo, en el cual poco se ha hecho, pero en el cual en principio pueden hacerse una enorme cantidad de cosas. Este campo no es completamente el mismo como otros, ya que este no nos diría mucho de la física fundamental sino que éste es más como física del estado sólido en el sentido de que este puede decirnos mucho del gran interés acerca del fenómeno extraño que ocurre en situaciones complejas. Más aún, un punto que es más importante es que

éste podría tener un enorme número de aplicaciones. [4]

Posteriormente se refiere más concretamente a las escalas del campo por explorar, nano- y micrómetros:

Cuántas veces cuando estamos trabajando en alguna cosa frustrantemente pequeña como el reloj de pulsera de tu esposa, te dices a ti mismo, ' Si pudiera entrenar a una hormiga para hacer esto'. Lo que me gustaría sugerir es la posibilidad de entrenar una hormiga para que entrene a un ícaro para que haga esto. ¿Cuáles son las probabilidades de que una máquina pequeña se mueva? Ellas podrían ser o no ser útiles, pero seguramente sería divertido hacerlas [4].

Después de este discurso en los años ochentas surge la disciplina de los llamados MEMS, pero es hasta los años noventas cuando se diversifican las aplicaciones en aplicaciones de la química, biología y ciencias biomédicas. En estas aplicaciones la sustancia que trabaja son flujos de fluidos y es así que de manera natural surge el área de Microfluidos.

Pero ¿qué debemos entender por el concepto de Micro en Microfluidos?, ¿o los Microfluidos están determinados por el tamaño de los dispositivos o por la cantidad de fluido que este sistema puede tomar? Para MEMS es verdad que el tamaño de los dispositivos deben estar en la escala de submilímetros. Sin embargo, la percepción de encoger todo a escalas pequeñas es engañoso para Microfluidos. Los dispositivos Microfluídicos no necesitan ser de silicio, es decir, fabricados con tecnología de micromaquinado de silicio. La ventaja principal de microfluidos es utilizar leyes de scaling para nuevos efectos y mejor funcionamiento. Estas ventajas son derivadas de cantidades microscópicas del fluido en un dispositivo Microfluídico. Independientemente del tamaño de la instrumentación que lo rodea y el material del cual el dispositivo está hecho, únicamente el espacio donde el fluido es procesado tiene que ser miniaturizado. La miniaturización del sistema entero, lo cual ofrece beneficios, no es un requisito de los sistemas microfluídicos. La cantidad microscópica de fluido es el asunto clave en microfluidos. *El término microfluido es usado aquí no para ligar la mecánica de fluidos a una longitud particular, tal como micras, sino más bien se refiere en general a situaciones en las cuales la escala de tamaños pequeños provocan cambios en algún comportamiento del fluido de lo cual se puede obtener un beneficio.* [4]

Los Microfluidos pueden ser definidos como el estudio de flujos que son simples a complejos, monofásicos o multifásicos, los cuales circulan en microsistemas naturales o artificiales. Las dimensiones de los Microfluidos están en el rango de aproximadamente 0.1 a 300 micrómetros. Las tecnologías para fabricar sistemas en miniatura ya existían en los años 70, como son Fotolitografías, Deposición, Micromojado y Microimpresión.

¿Por qué nos deberían importar los Microfluidos?, una cualidad es que no tienen partes móviles que se desgasten, y dentro de las aplicaciones que inciden en la calidad de vida, por mencionar algunos, son los Suministradores de Medicamentos, los Microsistemas de Análisis total y los Sistemas de Microfluidos que aparecen en la Naturaleza, ver Figuras 1.4 .

1.5. Electrocinética

Electrocinética es un término general que se asocia con el movimiento relativo entre dos fases cargadas. Los fenómenos electrocinéticos se producen cuando se intenta desprender la parte móvil de la doble capa eléctrica. Entonces, como la superficie cargada tiende a moverse en la dirección apropiada, los iones en la parte móvil de la doble capa eléctrica se someten a una migración neta en la dirección opuesta, llevando disolvente junto con ellos, provocando de este modo el movimiento del disolvente. Del mismo modo, un campo eléctrico se crea si la superficie cargada y la parte difusa de la capa doble están hechos para moverse uno respecto al otro. Entre los muchos tipos de fenómenos que pueden ocurrir como resultado del movimiento relativo entre fases y electrolitos

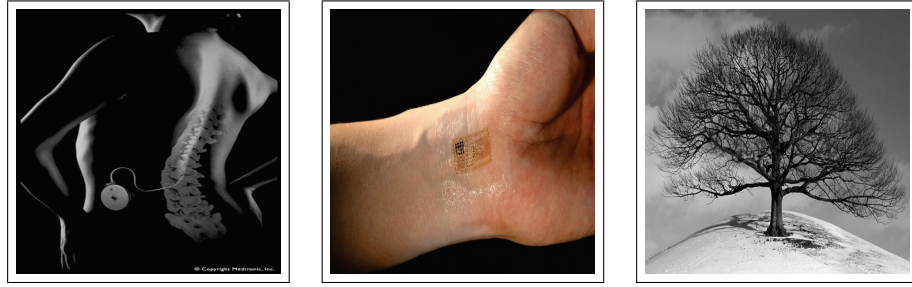


Figura 1.4: De izquierda a derecha, Suministradores de Medicamentos, Microsistemas de Análisis Total y Microfluidos en la Naturaleza [4]

cargados, cuatro tipos de fenómenos electrocinéticos son más comúnmente encontrados: doble capa, electroósmosis, electroforesis, y dielectroforesis. Estos cuatro tipos de fenómenos electrocinéticos son descritos brevemente a continuación:

1.5.1. Doble capa eléctrica

En general, las superficies sólidas tienden a ganar cargas superficiales cuando se ponen en contacto con soluciones iónicas acuosas. Las interacciones electrostáticas entre las superficies cargadas y los iones atraen contra-iones y repelen co-iones de la superficie cargada. Como resultado se forma una capa delgada con más contra-iones cerca de la superficie cargada, conocida como doble capa eléctrica. Ésta a su vez consiste de dos capas, la capa de Stern y la capa difusa. Los iones dentro de la capa de Stern se inmovilizan debido a que hay una fuerza electrostática muy fuerte; los iones dentro de la capa difusa son libres de moverse.

En la figura 1.5 se muestra lo que ocurre cuando una superficie cargada se sumerge en un electrolito, las cargas móviles del electrolito se moverán para neutralizar la carga de tal superficie. Si la superficie está cargada positivamente, los iones positivos serán repelidos por ella, mientras que los negativos se verán atraídos.

El potencial eléctrico producido por la carga neta dentro de la capa difusa obedece a la ecuación de Poisson [5]:

$$-\epsilon_0 \epsilon_f \nabla^2 \phi = \sum_{i=1}^n F z_i c_i, \quad (1.6)$$

donde ϵ_0 es la permitividad absoluta del vacío; ϵ_f es la permitividad relativa del fluido; ϕ es el potencial eléctrico en el fluido; F es la constante de Faraday; z_i es la valencia de la i -ésima especie iónica; c_i es la concentración molar de la i -ésima especie iónica; y n es el número total de especies iónicas. En la ecuación (1.6) aparecen dos cantidades físicas desconocidas, a saber el potencial eléctrico ϕ y la concentración de iones de especie i -ésima c_i , por lo que se requiere una ecuación adicional para poder resolver la expresión (1.6). Debido a que se trabaja a temperaturas ambientes, y el potencial eléctrico es la contribución más relevante en este sistema. Se puede considerar la hipótesis de Boltzmann que consiste en que la concentración de iones de especie i -ésima está dado como sigue:

$$c_i = c_{i0} \exp\left(-z_i \frac{F\phi}{RT}\right) \quad (1.7)$$

donde c_{i0} es la concentración del bulto de la i -ésima especie. Sustituyendo la ecuación (1.7) en la ecuación (1.6), se obtiene la famosa ecuación Poisson-Boltzmann y se consideran una solución electrolítica acuosa z-z, una solución iónica simétrica binaria,

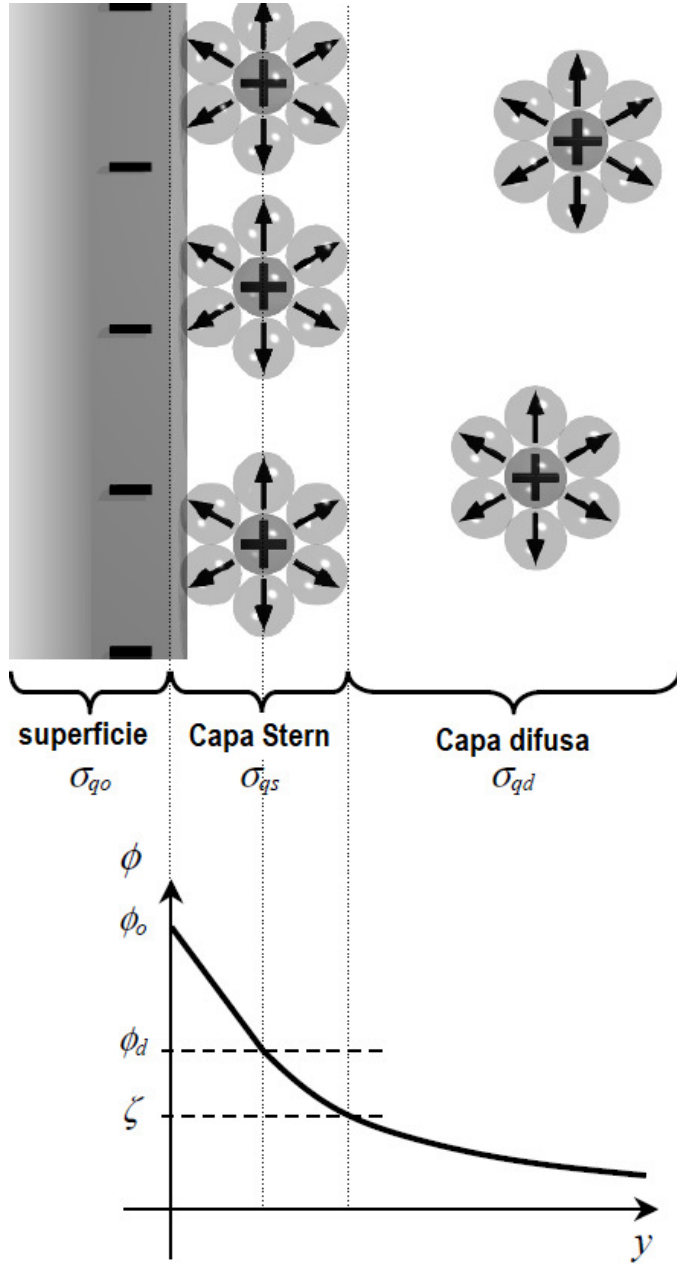


Figura 1.5: Diagrama que muestra la capa de contriones fijos del electrodo, la capa de Stern, y la capa Difusa y sus correspondientes densidades de carga superficial. También es mostrada la variación del potencial eléctrico como función de la distancia y desde la superficie del electrodo, subrayando el potencial de la capa difusa ϕ_d y el potencial en el plano de deslizamiento hidrodinámico ζ , el potencial zeta [18]

$$\nabla^2 \frac{zF\phi}{RT} = \frac{1}{\lambda_D^2} \sinh \frac{zF\phi}{RT} \quad (1.8)$$

Aquí $z = |z_i|$ y $\lambda_D = \sqrt{\epsilon_0 \epsilon_f RT / \sum_{i=1}^2 F^2 z_i^2 c_{i0}}$ es la longitud de Debye.

Cuando $\phi \ll \frac{RT}{zF}$, la ecuación (1.8) puede ser linealizada utilizando la aproximación Debye-Huckel:

$$\nabla^2 \frac{zF\phi}{RT} = \frac{1}{\lambda_D^2} \frac{zF\phi}{RT} \quad (1.9)$$

como un resultado, la distribución del potencial eléctrico se deriva como:

$$\phi = \zeta \exp\left(-\frac{x}{\lambda_D}\right) \quad (1.10)$$

donde ζ es el potencial zeta para el plano de corte, definido como la interfase entre la capa de Stern y la capa difusa; x es la distancia desde el plano de corte. La ecuación 1.9 es válida cuando el potencial zeta es relativamente pequeño.

Si $\phi \gg \frac{RT}{zF}$ la solución de la ecuación de Poisson-Boltzmann está dada por la expresión, distribución Gouy-Chapman,

$$\phi = 4\frac{RT}{zF}a \tanh\left[\tanh\left(\frac{zF\zeta}{4RT}\right)\exp\left(-\frac{x}{\lambda_D}\right)\right] \quad (1.11)$$

1.5.2. Electroósmosis

La electroósmosis se utiliza para el bombeo de electrolitos y tampones en microistemas. Consiste en un modo de bombeo difícil y poco útil para sistemas macrométricos, pero sencillo y elegante de utilizar en sistemas miniaturizados. La electroósmosis hace posible el transporte de objetos sin el efecto de la dispersión hidrodinámica. El bombeo electroosmótico se ha integrado en el primer dispositivo de laboratorio en un chip comercializado, y a menudo se incluye en dispositivos miniaturizados de separación electroforética [5], ver figura 1.6.

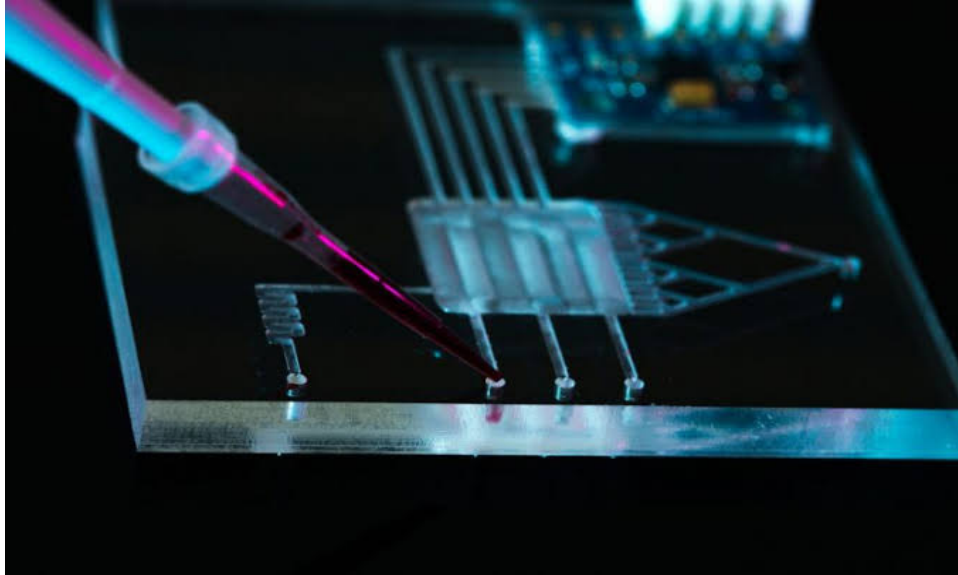


Figura 1.6: Laboratorio en un chip en el cual se ha utilizado la electroósmosis.

Cuando se aplica un campo eléctrico externo paralelo a una superficie de carga puntual, el exceso de contra-iones dentro de la doble capa eléctrica migran hacia el electrodo de carga opuesta, arrastrando el líquido viscoso con ellos. El movimiento de flujo inducido que surge de la interacción electrostática entre la carga neta dentro de la doble capa eléctrica y el campo eléctrico aplicado, se llama electroósmosis. La fuerza electrocinética actuando sobre el líquido se escribe de la siguiente manera:

$$F = E \sum_{i=1}^n F z_i c_i = -\epsilon_0 \epsilon_f \nabla^2 \phi \mathbf{E} \quad (1.12)$$

donde E es el campo eléctrico externo aplicado. Por lo tanto, el movimiento del fluido es gobernado por la ecuación modificada de Navier-Stokes

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \nabla u \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 u - \epsilon_0 \epsilon_f \nabla^2 \phi E \quad (1.13)$$

y la ecuación de continuidad

$$\nabla \cdot u = 0 \quad (1.14)$$

donde ρ es la densidad del fluido; u es la velocidad del fluido; p es la presión; y μ es la viscosidad dinámica del fluido. Asumiendo que

$$\mu \frac{d^2 u}{dy^2} = \epsilon_0 \epsilon_f \frac{d^2 \phi}{dy^2} E_x \quad (1.15)$$

donde u es la componente x de la velocidad del fluido; E_x es el campo eléctrico impuesto. Usando las condiciones de frontera $u(y=0) = 0$, $\frac{du}{dy}(y \rightarrow \infty) = 0$, $\phi(y=0) = \zeta$, $y \frac{d\phi}{dy}(y \rightarrow \infty) = 0$, la ecuación (1.15) puede integrarse fácilmente para obtener

$$u = \frac{\epsilon_0 \epsilon_f E_x}{\mu} [\phi(y) - \zeta] \quad (1.16)$$

En esta ecuación la solución exacta de $\phi(y)$ está dada por la ecuación (1.11). Como el potencial eléctrico debido a la carga superficial decae a cero en la región del bulto, la velocidad en esa región permanece constante, $u = \frac{\epsilon_0 \epsilon_f E_x \zeta}{\mu}$. El grosor de la doble capa eléctrica es del orden de nanómetros, que es mucho más pequeño que la longitud de los dispositivos microfluídicos.



Figura 1.7: Electroforesis capilar usada para pruebas de ADN.

1.5.3. Electroforesis

La electroforesis se refiere a la migración de micropartículas cargadas en una solución acuosa sometida a un campo eléctrico externo. La superficie cargada es estacionaria; sin embargo, es movable en electroforesis. La velocidad de la partícula electrorotética se puede escribir de la siguiente manera

$$U_p = \eta E \quad (1.17)$$

donde η es la movilidad de la partícula electroforética.

Uno de los principales usos de la electroforesis consiste en separar moléculas ionizadas, que migran a diferentes velocidades a lo largo de un capilar. Esta técnica se llama "electroforesis capilar", y actualmente utilizan esa técnica los órganos judiciales franceses para las pruebas de ADN, ver figura 1.7.

1.5.4. Dielectroforesis

La dielectroforesis se refiere al movimiento de las micropartículas polarizables inmersas en una solución acuosa sometida a un campo eléctrico no uniforme.

$$F_{DEP} = 2\pi r^3 \epsilon_0 \epsilon_f \operatorname{Re} [K(\omega)] \nabla E_{rms}^2 \quad (1.18)$$

donde ω es la frecuencia del campo eléctrico de corriente alterna, y E_{rms} es el valor eficaz del campo eléctrico. Al aplicar un campo eléctrico $E = -\nabla\phi$ que es relativo al potencial eléctrico, se satisface la ecuación de Laplace:

$$\nabla \cdot (\epsilon \nabla \phi) = 0 \quad (1.19)$$

$\operatorname{Re} [K(\omega)]$ representa la parte real de el factor de Clausius - Mossotti, que está dado de la siguiente manera:

$$K(\omega) = \frac{\epsilon_p - \epsilon_f}{\epsilon_p + 2\epsilon_f} \quad (1.20)$$

En esta ecuación, $\epsilon_k = \epsilon_0 \epsilon_k - i \frac{\delta_k}{\omega}$ es la permitividad compleja, con δ_k denotando la conductividad correspondiente.

1.6. Importancia de la electrorrotación

La microfluídica se pueden definir como el estudio de flujos simples o complejos, monofásicos o multifásicos, que son circulantes. La microfluídica se diferencia de los microfluidos en que los elementos de superficie son más importantes que los de volumen, por tanto, aparecen nuevos fenómenos.

Una de las increíbles creaciones de la microfluídica son las microbombas. En comparación con la tecnología tradicional, las microbombas brindan una mejora importante desde el punto de vista del cirujano, así como una significativa comodidad para el paciente. El primer producto microfluídico comercializado a gran escala fue la impresora de inyección de tinta. Hoy en día, se escriben y leen miles de millones de documentos gracias a estas impresoras. Paralelo a los cabezales de inyección, también se pueden construir dispensadores de gotas. En este caso, el destino de estas gotas no son hojas de papel, sino placas que contienen recipientes utilizados para análisis químicos o biológicos. Los dispensadores de gotitas constituyen en este momento una parte sustancial de la actividad comercial en el campo de los microfluidos. Actualmente, los chips se producen por millones y permiten realizar una gran cantidad de pruebas en paralelo, permitiendo la entrega de grandes cantidades de datos que ayudan en la caracterización de un producto. Hoy, este tipo de tecnología es crucial en la búsqueda de nuevos tipos de tratamientos médicos.

El transporte y manipulación de partículas sintetizadas a micro - nanoescala y biopartículas para aplicaciones biomédicas se han convertido en temas críticos en micro- nanofluidos. La sangre es una mezcla compleja de varias células, incluye glóbulos rojos, glóbulos blancos y plaquetas. Si solamente se requiere analizar los glóbulos rojos, éstos tienen que ser separados de los glóbulos

blancos y de las plaquetas, y ser concentrados y atrapados en un dispositivo microfluídico antes de un análisis genómico adicional o de un diagnóstico clínico. La electrocinética se refiere al uso de campos eléctricos para ejercer fuerzas electrostáticas en fluidos cargados o polarizables y partículas suspendidas, que a su vez inducen el movimiento de fluidos y partículas. Según el tipo de campo eléctrico aplicado, los fenómenos electrocinéticos pueden ser categorizados de corriente continua y de corriente alterna. Nos fijaremos en la electrocinética de corriente continua, en particular la electroósmosis, la electroforesis, dielectroforesis, y la electrocinética de carga inducida.

En la figura 1.8 se muestra la configuración utilizada en los experimentos de electrorotación, en los cuales se hace lo siguiente: se colocan cuatro electrodos con cierta separación entre ellos, se aplica un potencial a los electrodos con una diferencia de fase de 90 grados entre dos electrodos consecutivos, creciente si se mueven en sentido antihorario.

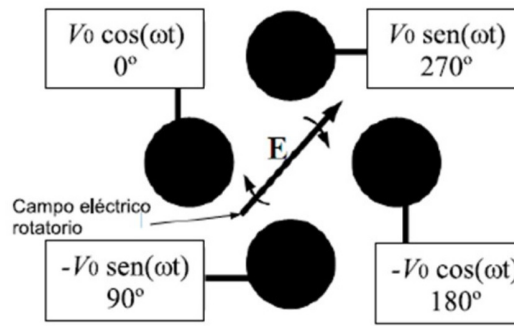


Figura 1.8: Dispositivos de Electrorotación. Cuatro electrodos alimentados por corriente eléctrica alterna, desfasados por noventa grados. En la región central se encuentra la solución de micropartículas inmersas en una solución lectrolítica, que al sentir el campo eléctrico rotante las micropartículas rotan [18].

1.7. Leyes de conservación de la hidrodinámica

En los fenómenos electrocinéticos las micropartículas están inmersas en fluidos, estos fluidos están en movimiento. Por lo que, es necesario considerar las leyes que rigen la mecánica de fluidos, en particular las llamadas leyes de la Hidrodinámica. La hidrodinámica nos proporciona las leyes y conceptos relacionados con el movimiento de los fluidos, donde la hipótesis de continuidad es la base de sus leyes, la descripción hidrodinámica pierde su validez cuando la hipótesis de continuidad deja de ser válida. De manera más precisa la hidrodinámica es una descripción de la materia que es válida solamente a escalas de longitud y tiempo más grandes que las longitudes y tiempos característicos a niveles moleculares, de esta manera la materia es considerada como un continuo sin estructura. Las condiciones anteriores donde es válida la Hidrodinámica se expresan como sigue:

$$k l_c \ll 1 \quad \omega \tau_c \ll 1$$

donde $k = \frac{k2\pi}{\lambda}$ es el vector de onda, l_c es la longitud de trayectoria libre media de las moléculas, $\omega = \frac{2\pi}{T}$ la frecuencia angular de la onda (T el periodo de la onda) y τ_c es el tiempo de colisión medio entre moléculas que componen en este caso el líquido.

En este trabajo de tesis nos interesa estudiar el flujo electroosmótico alrededor de la micropartícula, por lo que, el cálculo del campo de velocidad de la solución electrolítica lo obtenemos de las ecuaciones de conservación de la hidrodinámica, a saber, la conservación de la masa, del momento lineal y de la energía. En particular, este trabajo tesis se considera principalmente la conservación

del momento lineal, que como veremos es la llamada ecuación de Navier-Stokes. Para un fluido de una componente molecular la densidad local asociada con la variable de conservación es la densidad de masa $\rho(\mathbf{r}, t)$, densidad de energía $E(\mathbf{r}, t)$ y densidad de momentum $\rho\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$. Las leyes para la densidad local tienen la forma [1]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}) = 0 \quad (1.21)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\mathbf{v}) + \nabla \cdot [\rho\mathbf{v}\mathbf{v} - \boldsymbol{\sigma}] = \mathbf{f} \quad (1.22)$$

$$m \frac{\partial}{\partial t} E + \nabla \cdot [E\mathbf{v} - \boldsymbol{\sigma}\mathbf{v} + \mathbf{q}] = \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} \quad (1.23)$$

donde \mathbf{q} es el vector flujo de calor y \mathbf{f} representa las fuerzas externas actuando sobre el volumen de control. La energía total E está dada por

$$E = \rho(e + \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}/2) \quad (1.24)$$

e es la energía específica interna, $\boldsymbol{\sigma}$ es el tensor de esfuerzo que viene dado por,

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \boldsymbol{\tau} \quad (1.25)$$

p es la presión, \mathbf{I} es el tensor unitario, $\boldsymbol{\tau}$ es el tensor de esfuerzo viscoso que está definido como

$$\boldsymbol{\tau} = \mu[\nabla\mathbf{v} + (\nabla\mathbf{v})^T] + \zeta(\nabla \cdot \mathbf{v})\mathbf{I} \quad (1.26)$$

en esta μ es el coeficiente de fricción de corte, ζ es el coeficiente de fricción de bulo.

El presente trabajo de tesis se basa fundamentalmente en la ecuación de Navier-Stokes, conservación del momento lineal (1.22). Esta forma no es muy conocida, una forma más conocida es la forma siguiente

$$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{v} + \left(\frac{\eta}{3} + \zeta\right) \nabla(\nabla \cdot \mathbf{v}) + \mathbf{f} \quad (1.27)$$

donde la derivada material está definida como sigue,

$$\rho \frac{D}{Dt} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \quad (1.28)$$

En el estudio que hacemos la velocidad de flujo alrededor de la micropartícula es pequeña, así los efectos de calentamiento por efecto Joule son despreciables. También, como la solución electrolítica acuosa es un líquido, es decir, es un fluido incompresible, esta condición se expresa por medio de la relación

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0. \quad (1.29)$$

1.8. Método de elemento finito

El método de elemento finito es utilizado por el programa comercial COMSOL, y debido a que usamos este programa es conveniente tener nociones de cómo este programa resuelve las ecuaciones diferenciales involucradas que describen la física del sistema o fenómeno en estudio. El método de elemento finito representa una aproximación numérica bien establecida y extensa para resolver ecuaciones diferenciales parciales en la física y en la ingeniería. Una ventaja del método de elemento finito sobre el método de diferencias finitas es que las geometrías irregulares pueden adaptarse fácilmente. El método de elemento finito está basado en dos conceptos importantes [19]:

1. Formulación de la PDE subyacente en términos de su denominada forma débil.
2. Aproximando la variable dependiente en la forma débil usando una suma finita de funciones básicas.

Para ilustrar el método se considera el ejemplo simple de difusión en una dimensión, este fenómeno es descrito por la ecuación diferencial siguiente,

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (1.30)$$

Que debe resolverse con las siguientes condiciones de frontera:

$$c(x, 0) = c_0(x) ; c(0, t) = p(t) ; D \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_x = q(t) \quad (1.31)$$

Las expresiones (1.30) y (1.31), se denominan la *forma fuerte del problema* físico a tratar. Para este ejemplo la *forma débil del problema* se expresa de la siguiente manera:

$$\frac{d}{dt} \int_0^1 c \phi dx + \int_0^1 D \frac{\partial c}{\partial x} \frac{d\phi}{dx} dx = q(t) \phi(1) \quad (1.32)$$

Esta forma débil del problema es una ecuación integro-diferencial, donde ya están incluidas las condiciones de frontera. Pero además se han incorporado las funciones de prueba $w(x)$, que tienen la forma siguiente:

$$w_i(x) = \begin{cases} \frac{x-x_{i-1}}{x_i-x_{i-1}} & \text{si } x_{i-1} \leq x < x_i \\ \frac{x_{i+1}-x}{x_{i+1}-x_i} & \text{si } x_i \leq x < x_{i+1} \\ 0 & \text{si } x < x_{i-1}, x \geq x_{i+1} \end{cases} \quad (1.33)$$

Estas funciones de prueba nos permiten escribir la solución de la siguiente manera:

$$c(x, t) \approx \sum_{i=1}^N c_i(t) \phi(x) \quad (1.34)$$

Discretizando la ecuación integro diferencial, se obtiene la siguiente ecuación matricial:

$$\begin{bmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \frac{h}{6} & \frac{2h}{3} & \frac{h}{6} & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{h}{6} & \frac{2h}{3} & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \frac{2h}{3} & \frac{h}{6} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \frac{h}{6} & \frac{h}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{dc_1}{dt} \\ \vdots \\ \frac{dc_i}{dt} \\ \vdots \\ \frac{dc_N}{dt} \\ \frac{d\lambda}{dt} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{D}{h} & \frac{-D}{h} & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 \\ \frac{-D}{h} & \frac{2D}{h} & \frac{-D}{h} & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{-D}{h} & \frac{2D}{h} & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \frac{2D}{h} & \frac{-D}{h} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \frac{-D}{h} & \frac{D}{h} & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_i \\ \vdots \\ c_N \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ q \\ p \end{bmatrix} \quad (1.35)$$

Esta ecuación matricial (1.35) es un sistema de $N+1$ ecuaciones algebraicas para $N+1$ incógnitas y con $c_0 h_i, i = 1, \dots, N$ como valores iniciales, en esta expresión, nótese que ya están incorporadas las condiciones de frontera e iniciales.

Proceso a seguir en COMSOL para una simulación

- Elegir la física a resolver y si el problema es estacionario o no.
- Elegir si la geometría es una, dos o tres dimensiones.
- Definir los parámetros o constantes, y variables conocidas en el sistema a estudiar.
- Construir la geometría del sistema o importarla.
- Dar las condiciones de frontera y las condiciones iniciales de la física a resolver.
- Elegir el mallado de la geometría.
- Elegir el tipo de estudio y la precisión y el método para resolver la física involucrada.
- El postproceso, es decir, obtener cantidades físicas a partir de las ecuaciones de la física resuelta.

Capítulo 2

Formulación de la electrorotación de una partícula metálica

En este capítulo estudiamos la electrorotación de una partícula conductora inmersa en una solución electrolítica acuosa. Nos interesa el estudio de la electrorotación como una manera de caracterizar una partícula con base en su forma geométrica, nos motiva el caracterizar una partícula de forma de un glóbulo rojo, debido a su importancia en la enfermedad de la leucemia. Como es bien sabido el glóbulo rojo es una célula que cambia su forma debido a la flexibilidad de su membrana, no obstante en nuestro estudio consideramos al glóbulo rojo como una partícula metálica rígida, para lo cual consideramos tres formas geométricas. Así este capítulo está estructurado de la siguiente manera, en la primera sección de este capítulo presentamos el planteamiento del problema, donde se exponen las consideraciones y las cantidades a obtener. En seguida, en la sección dos, desarrollamos la formulación matemática de nuestro problema, presentando las expresiones matemáticas para las cantidades físicas más relevantes de la electrorotación de la micropartícula metálica. Posteriormente, en la sección tres, presentamos cómo calculamos la contribución a la velocidad angular debido al flujo electroosmótico, por medio del uso del teorema de reciprocidad para flujos. Finalmente, en la última sección de este capítulo presentamos cómo calculamos el coeficiente de fricción, que depende fuertemente de la geometría de la partícula.

2.1. Planteamiento del problema

En la sección 1.6 hemos descrito brevemente cómo se logra hacer que partículas inmersas en una solución acuosa roten, aquí detallamos cómo se efectúa el experimento. Primero, la electrorotación de micropartículas se lleva a cabo preparando una suspensión de micropartículas inmersas en una solución electrolítica acuosa, por ejemplo, microesferas de titanio en una solución electrolítica de KCl. En segundo lugar, se coloca esta dispersión bajo la acción de un campo eléctrico rotante, el cual es creado por medio de cuatro electrodos colocados simétricamente, como se muestra en la figura 2.1, los cuales son alimentados con corriente alterna, desfasados en noventa grados. Con la cámara que está acoplada con el microscopio se observa la rotación de las micropartículas, por medio de un video, posteriormente se analiza el video y se determina la velocidad angular con la que rotan las micropartículas, para una determinada frecuencia ω . Este proceso se hace variando la frecuencia de la corriente alterna, y de este conjunto de mediciones se obtienen los espectros de electrorotación. Además, debido a que este campo eléctrico rotante depende de la frecuencia con la que se alimentan los electrodos, se encuentra que en el espacio entre los electrodos aparecen regiones donde el campo eléctrico aplicado es rotante (en el centro) y regiones cercanas a los electrodos donde el campo eléctrico deja de ser rotante.

Formulación de la electrorotación de una partícula metálica

2.1 Planteamiento del problema

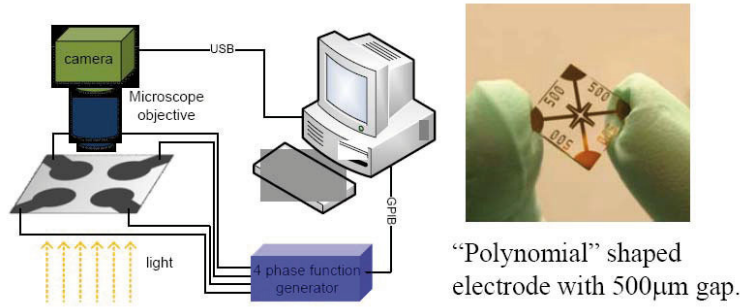


Figura 2.1: **Configuración y diseño experimental.** En la figura se aprecia de izquierda a derecha: (a) Configuración usada para generar el campo eléctrico en los experimentos de electrorotación; (b) Configuración usada en los experimentos de electroorientación [20].

En el fenómeno de electrorotación están presentes cuatro influencias sobre la micropartícula. La primera influencia consiste en que debido al campo eléctrico aplicado se induce un dipolo eléctrico en la micropartícula, este dipolo interactúa con el campo aplicado, produciendo sobre la micropartícula un par eléctrico, Γ_e . La segunda interacción que se presenta, es que debido a que la micropartícula está inmersa en una solución electrolítica, alrededor de la micropartícula se forma una doble capa de tamaño λ_D , entonces el campo eléctrico aplicado actúa sobre la carga eléctrica que se encuentra en la doble capa y se genera un flujo electroosmótico alrededor de la micropartícula, que a su vez ejerce un par sobre la micropartícula, Γ_{iceo} . Un tercer efecto sobre la micropartícula es debido a la presencia de la pared que confina la dispersión. Y el último efecto es el movimiento Browniano, de acción de vibración térmica de las partículas de la solución electrolítica que rodean a la micropartícula esférica. En nuestro estudio hacemos las siguientes consideraciones:

- Debido a que la suspensión es diluida, las micropartículas están separadas una de otra por lo que la dispersión se mantiene un tiempo grande que mantiene alejadas a las micropartículas lejos de las paredes del contenedor, la interacción de la micropartícula con las paredes no la consideramos. Y como las micropartículas que se consideran son mayores a una micra, el movimiento Browniano es muy pequeño en comparación con las dos primeras interacciones, por lo que el efecto Browniano no lo consideramos por el momento.
- Suponemos que la doble capa eléctrica es delgada, lo que significa que $\lambda_D \ll L$, siendo L la dimensión más pequeña de la micropartícula. Con base en esta consideración, incluimos la información de la doble capa como condición de frontera.

Por lo anterior, la velocidad angular de las micropartículas que estudiamos está constituida por dos términos, uno donde se toma en cuenta el par eléctrico, interacción del dipolo inducido con el campo externo aplicado, y el par debido al flujo electroosmótico. Así que con estas consideraciones buscamos la velocidad angular de rotación de la micropartícula esférica metálica:

$$\Omega_{rot}^t = \Omega_{rot}^e + \Omega_{rot}^{iceo} \quad (2.1)$$

En el presente trabajo de tesis buscamos calcular la velocidad angular y el coeficiente de fricción viscoso de una micropartícula conductora con forma rígida de un glóbulo rojo, inmersa en una solución electrolítica. Para lo cual, como aproximación cero consideramos la forma de una Lenteja (cilindro corto), posteriormente como aproximación de orden uno la de una partícula con forma de Esferoide Prolato y como aproximación más cercana a un glóbulo rojo es la de un Discoide Bicóncavo [11], ver figura 2.2.

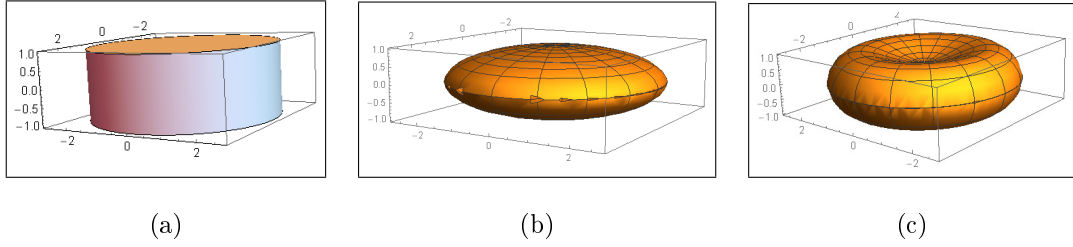


Figura 2.2: De izquierda a derecha, (a) Micropartícula en forma de cilindro corto, Lenteja, (b) Micropartícula con forma de Esferoide Prolato y (c) Micropartícula rígida metálica con forma de Discoide Bicóncavo, forma más cercana a la de un glóbulo rojo [11].

2.2. Interacción dipolo-campo aplicado

En esta sección presentamos de manera breve la formulación de los dos fenómenos que tomamos en cuenta en la electrorotación de micropartículas conductoras inmersas en solución electrolítica acuosa, a saber, la interacción del dipolo inducido en la micropartícula con el campo eléctrico aplicado y el efecto del flujo electroosmótico sobre la micropartícula [7]. También, tomamos en cuenta el par viscoso sobre la micropartícula debido al fluido viscoso.

Consideremos una micropartícula metálica inmersa en una solución electrolítica 1:1, el campo eléctrico rotante debido a los cuatro electrodos alimentados con corriente alterna desfazados en noventa grados, con amplitud E_0 y frecuencia angular ω . En un sistema de referencia fijo en el centro de la microsfera podemos escribir este campo eléctrico en el plano YZ como,

$$E(t) = E_0 \text{Re}[(\hat{\mathbf{e}}_z - i\hat{\mathbf{e}}_y)e^{i\omega t}]. \quad (2.2)$$

Este campo eléctrico rotante induce un dipolo eléctrico $\tilde{\mathbf{p}}$ en la micropartícula metálica, este dipolo se escribe como sigue,

$$\tilde{\mathbf{p}} = 4\pi\epsilon a^3 E_0 (A\hat{\mathbf{e}}_z - iB\hat{\mathbf{e}}_y), \quad (2.3)$$

donde A y B son las polarizabilidades en las direcciones $\hat{\mathbf{e}}_z$ y $\hat{\mathbf{e}}_y$, respectivamente, y están dadas por las expresiones siguientes [7],

$$A(\omega) = \frac{3}{4\pi} \oint \frac{(\Phi_z + z)z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} d\mathbf{S} \quad (2.4)$$

$$B(\omega) = \frac{3}{4\pi} \oint \frac{(\Phi_y + y)y}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} d\mathbf{S}, \quad (2.5)$$

aquí $\Phi_z + z$ es el potencial debido al dipolo en la dirección paralela (en este caso en la dirección z) y $\Phi_y + y$ el potencial debido al dipolo en la dirección perpendicular (en este caso en la dirección y). En las expresiones (2.4) y (2.5), la integral se efectúa sobre una superficie cerrada que contenga al dipolo, por ejemplo una esfera. Las expresiones (2.4) y (2.5) nos permiten calcular numéricamente las polarizabilidades, que como se puede ver se requiere el conocimiento de los potenciales eléctricos Φ_z y Φ_y , los cuales son obtenidos resolviendo la ecuación de Laplace.

Ahora bien, un campo eléctrico que actúa sobre un dipolo puntual ejerce un par de fuerzas que viene dado por: $\mathbf{\Gamma} = \mathbf{p} \times \mathbf{E}$. En el caso de un campo eléctrico alterno actuando sobre un dipolo debe considerarse el promedio temporal del par eléctrico, por lo que se tiene que,

$$\langle \mathbf{\Gamma}_e \rangle = \frac{1}{2} \text{Re}[\tilde{\mathbf{p}} \times \tilde{\mathbf{E}}^*], \quad (2.6)$$

Formulación de la electrorotación de una partícula metálica
2.3 Solución analítica para la microesfera

en la ecuación anterior el símbolo $*$ denota el complejo conjugado. El presente cálculo es únicamente válido cuando el rango de variación del campo eléctrico es mucho mayor que el tamaño de la partícula, esta aproximación es conocida como la *Aproximación de Dipolo Puntual* [18, 20].

Sustituyendo las expresiones (2.2) y (2.3) en la ecuación (2.6) obtenemos el par eléctrico. Y como simultáneamente actúa un par viscoso, $\Gamma_v = \gamma\Omega$, se tiene que cuando ambos pares se equilibran se obtiene una condición estacionaria de la rotación de la micropartícula de tal manera que la micropartícula adquiere una velocidad angular Ω_{rot}^e dada por la expresión,

$$\Omega_{rot}^e = -\frac{2\pi}{\gamma} a^3 E_0^2 \text{Im}(A + B) \hat{\mathbf{e}}_x \quad (2.7)$$

en esta expresión γ es el coeficiente viscoso de rotación, así por ejemplo para el caso de una esfera de radio a está dada por,

$$\gamma_{rot} = 8\pi a^3 \eta \quad (2.8)$$

mientras que el coeficiente viscoso de traslación para una esfera de radio a , está dado por,

$$\gamma_{tras} = 6\pi a \eta \quad (2.9)$$

Como podemos ver de las expresiones (2.2), (2.3) y (2.7) se determinan de conocer los potenciales eléctricos Φ_x y Φ_y . Así por ejemplo para determinar Φ_z resolvemos numéricamente la ecuación de Laplace, con las siguientes condiciones de frontera,

$$\begin{aligned} \nabla\Phi \cdot \hat{\mathbf{n}} &= i\omega \frac{C_{DL}}{\sigma} \Phi; \quad \text{Para } r = a \\ \Phi &= -E_0 z \quad ; \quad \text{Para } r \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (2.10)$$

donde C_{DL} es la Capacidad Diferencial por unidad de superficie de la doble capa, σ es la conductividad eléctrica de la solución electrolítica. La primera ecuación de la expresión (2.10) incorpora la consideración de la doble capa delgada, lo cual es posible considerando que la doble capa es pequeña en comparación con la longitud más pequeña de la micropartícula, en el caso de nuestro glóbulo rojo, se debe cumplir

$$\lambda_D \ll a \quad (2.11)$$

esta consideración nos permite que en lugar de resolver la ecuación de Poisson resolvemos la ecuación de Laplace. Un planteamiento similar es seguido para determinar Φ_y .

2.3. Solución analítica para la microesfera

Para ejemplificar la manera de resolver la ecuación de Laplace sujeta a las condiciones de frontera (2.10), aplicamos esto para solucionar el caso de una microesfera metálica de radio a . En específico mostramos la manera de obtener el potencial eléctrico Φ_z , para esto consideramos el siguiente problema: Una esfera metálica de radio a inmersa en una solución electrolítica y sujeta a la acción de un campo eléctrico E_0 en la dirección z , considerando que la doble capa eléctrica es delgada, resolvemos la ecuación de Laplace,

$$\nabla^2 \Phi = 0 \quad (2.12)$$

Físicamente en estas condiciones tenemos un problema en el cual el potencial eléctrico total Φ se debe a dos contribuciones, una debida al campo eléctrico aplicado, y aquella debida al dipolo eléctrico inducido en la esfera, por lo que el potencial es de la forma,

$$\Phi = \Phi_{ext} + \Phi' \quad (2.13)$$

donde: Φ_{ext} es el potencial debido al campo eléctrico aplicado, y Φ' es el potencial creado por el dipolo inducido en la microesfera. También, por simetría, el potencial Φ no depende del ángulo ϕ solo depende de r y θ , por lo tanto, el potencial eléctrico total se expresa como,

$$\Phi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \left(A_l r^{-(l+1)} + B_l r^l \right) P_l(\cos \theta) \quad (2.14)$$

es claro que de la expresión (2.13), en el desarrollo dado por la ecuación (2.14) solo debemos mantener los términos siguientes,

$$\Phi = -Er \cos \theta + \frac{A_1}{r^2} P_1(\cos \theta) \quad (2.15)$$

En la expresión anterior ya se ha aplicado la condición de frontera del potencial lejos de la micropartícula, es decir, el potencial externo aplicado. Ahora, empleando la condición de frontera (2.10), en la superficie de la microesfera, se obtiene,

$$A_1 = E_0 a^3 \frac{(i\tilde{\omega} - \frac{1}{2})}{(i\tilde{\omega} + 1)} \quad (2.16)$$

donde A_1 representa la intensidad del dipolo inducido en la microesfera, mientras que identificamos a la polarizabilidad con el factor de Clausius -Mossoti, $K(\tilde{\omega})$, que está dado por

$$K(\tilde{\omega}) = \frac{i\tilde{\omega} - \frac{1}{2}}{i\tilde{\omega} + 1} \quad (2.17)$$

siendo $\tilde{\omega}$ la frecuencia adimensional de la corriente AC, definida como

$$\tilde{\omega} = \frac{\omega C_{DL} a}{2\sigma} \quad (2.18)$$

Ahora, como el campo rotante es la superposición de un campo en la dirección z y otro en la dirección y , se encuentra que las polarizabilidades A y B son iguales por simetría, por consiguiente, el par aplicado eléctrico sobre la microesfera metálica está dado por,

$$\mathbf{\Omega}_{rot}^e = -\frac{4\pi}{\gamma} a^3 E_0^2 \text{Im}[K(\tilde{\omega})] \hat{\mathbf{e}}_x \quad (2.19)$$

2.4. Flujo electroosmótico, ICEO

En esta sección describimos cómo calculamos numéricamente el par aplicado sobre la micropartícula debido al flujo electroosmótico, el cual es debido a que alrededor de la microesfera se encuentran partículas cargadas que forman la doble capa, esta doble capa siente el campo eléctrico rotante aplicado de manera que se origina un flujo de la solución electrolítica alrededor de la microesfera de tal manera que este flujo ejerce un par sobre la microesfera. A este par se le denomina flujo electroosmótico por carga inducida o por sus siglas en inglés ICEO (*Induced Charge Electro-Osmosis*). La velocidad angular, la calculamos mediante la aplicación del *Teorema de Reciprocidad para Fluidos de Lorentz* [7],

$$\int \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{T}_1 \cdot \mathbf{v}_2 \, dS = \int \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{T}_2 \cdot \mathbf{v}_1 \, dS, \quad (2.20)$$

Para aplicar el teorema de reciprocidad expresión (2.20) consideremos una micropartícula que se mueve con velocidad $\mathbf{v} = \mathbf{v}_s + \mathbf{\Omega}_{rot} \times \mathbf{r}$ en el interior de un fluido, donde \mathbf{v}_s es la velocidad

de arrastre del fluido sobre la micropartícula llamada velocidad de deslizamiento (slip en inglés), mientras que, $\mathbf{\Omega}_{rot} \times \mathbf{r}$ es la contribución a la velocidad de la micropartícula debido al movimiento de rotación. La utilidad de el teorema de reciprocidad para fluidos consiste en que podemos separar el problema total en dos problemas, de este modo, consideramos que en el problema 1 la partícula se mueve en un fluido con la velocidad \mathbf{v}_s sujeta al tensor de esfuerzos \mathbf{T}_1 , mientras que, en el problema 2, la partícula se mueve con velocidad $\mathbf{\Omega} \times \mathbf{r}$ sujeta al tensor de esfuerzos \mathbf{T}_2 . Considerando que las fuerzas y pares son iguales, es decir, las fuerzas y pares en el sistema completo están en equilibrio, de la expresión (2.20) se obtiene

$$-\int \mathbf{r} \times (\mathbf{n} \cdot \mathbf{T}_2) dS \cdot \mathbf{\Omega}_{rot} = \int \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{T}_2 \cdot \mathbf{v}_s dS. \quad (2.21)$$

Y debido a que el campo eléctrico rotante está en el plano ZY, la velocidad angular está en la dirección x, por lo que la expresión (2.21) se escribe como

$$\mathbf{\Omega}_{rot}^{iceo} = -\frac{\int (t_x v_{sx} + t_y v_{sy} + t_z v_{sz}) dS}{\int (y t_z - z t_y) dS} \hat{\mathbf{e}}_x \quad (2.22)$$

donde hemos omitido el subíndice x en $\mathbf{\Omega}_{rot}$ y el subíndice 2 en las componentes del vector fuerza cortante t_i , con $i = x, y, x$, definido como $\mathbf{t} = \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{T}$. En la expresión (2.22) la velocidad de deslizamiento está dada por

$$\mathbf{v}_s = -\frac{\epsilon}{2\eta} \text{Re} [\Phi_s \nabla_s \Phi^*] \quad (2.23)$$

en ésta, Φ_s es el potencial eléctrico justo fuera de la capa doble de la microesfera metálica y ∇_s es el operador gradiente superficial. Como podemos ver de la expresión (2.23) se necesita conocer el potencial eléctrico, el cual se obtiene de resolver la ecuación de Laplace, como se describe en la sección 2.2. Y la velocidad angular debido al flujo electroosmótico $\mathbf{\Omega}_{rot}^{iceo}$ se requiere calcular las componentes del vector fuerza cortante, las cuales se obtienen resolviendo numéricamente la ecuación de Navier-Stokes, sujeta a las condiciones de slip en la superficie de la partícula y velocidad de no deslizamiento lejos de la partícula.

2.5. Coeficiente viscoso γ

El coeficiente viscoso es un parámetro muy importante que es necesario para poder evaluar las expresiones (2.19) y (2.22), físicamente este coeficiente depende de la forma geométrica de la micropartícula y de la viscosidad del fluido donde está inmersa la micropartícula. La expresión teórica para el coeficiente viscoso de rotación de una microesfera está dado por la ecuación (2.8), uno de los resultados importantes que se obtienen de la aplicación del teorema de reciprocidad, es que el coeficiente de viscosidad está dado por el denominador de la ecuación (2.22), es decir, el coeficiente viscoso de rotación de la partícula en rotación está dada por

$$\gamma_{num}^{Rot} = \int (y t_z - z t_y) dS \quad (2.24)$$

para la evaluación de esta expresión se requiere conocer las componentes del vector de fuerza cortante sobre la superficie de la partícula.

Para un esferoide prolato se cuenta con un resultado teórico, el cual fue obtenido por F. Perrin [21], y está dado por la expresión siguiente

$$\gamma_{teo}^{Rot} = 6\eta V G_\theta \quad (2.25)$$

donde $V = (4/3)\pi ab^2/3$ es el volumen del esferoide prolato, mientras que, G_θ es un factor geométrico que caracteriza la cantidad de desviación del elipsoide de la esfera, y está dado por

$$G_\theta = \frac{2}{3} \frac{(p^4 - 1)}{p} \left[\frac{2p^2 - 1}{\sqrt{p^2 - 1}} \log(p + \sqrt{p^2 - 1}) - p \right]^{-1} \quad (2.26)$$

donde $p = 1/\beta$. La expresión (2.25), nos será de utilidad para validar nuestros resultados numéricos, como se verá en el capítulo 3.

Capítulo 3

Resultados de la electrorotación

En este capítulo presentamos los resultados de nuestro estudio de la electrorotación de micropartículas metálicas inmersas en una solución electrolítica y actuada por un campo eléctrico rotante, producido por cuatro electrodos simétricamente dispuestos y alimentados por corriente alterna desfasados noventa grados. Las micropartículas con diferente forma, Cilindro Corto (Lenteja L), Esferoide Prolato (EP) y Discoide Biconcavo (DB), todo esto para obtener información acerca de un "globo rojo rígido". Este capítulo está estructurado de la siguiente manera, en la sección 1 describimos cómo se obtuvieron los cálculos de simulación por computadora de la electrorotación, usando el programa comercial COMSOL. En la siguiente sección 2, mostramos los resultados de resolver la ecuación de Laplace y de Navier-Stokes, específicamente los potenciales eléctricos y los perfiles de velocidad, éstos obtenidos tal como se describió en el capítulo anterior. Posteriormente en la sección 3, se describe cómo se obtienen los espectros de polarizabilidades A y B , y hacemos un análisis comparativo entre las diferentes geometrías. En la sección 4 se muestran y discuten los resultados de la velocidad angular de rotación, tanto la contribución debida a la interacción del dipolo inducido y la contribución debida al flujo electroosmótico. Finalmente, en la sección 5, mostramos y discutimos el cálculo del coeficiente de fricción y su comparación entre las diferentes geometrías, así como la comparación con el valor teórico de una micropartícula Esferoide Prolato.

3.1. Simulación computacional

En esta sección describimos de manera general el funcionamiento del software comercial COMSOL Multiphysics, ya que, para nuestra simulación numérica hacemos uso de este software el cual usa el método numérico de elemento finito, que se revisó en la sección 1.8. Este software es mundialmente aceptado en la comunidad científica para hacer simulación numérica en áreas de la ciencia e ingeniería, debido a que sus algoritmos son muy eficientes y su capacidad de mostrar visualmente la geometría del sistema así como la intensidad de las cantidades físicas calculadas. La gran cantidad de artículos publicados que muestran simulación numérica en las revistas científicas así lo hacen constar, los algoritmos basados en el método elemento finito han mostrado ser muy eficientes para geometrías muy complicadas. El menú del programa está estructurado de manera similar a como se realiza un programa en el lenguaje de programación fortran o C, pero el ambiente visual cuenta con un ambiente que facilita construir la geometría del sistema en estudio, el mallado de la geometría, así como una biblioteca de propiedades de muchos materiales y dentro del ambiente nos permite realizar cálculos y gráficas de cantidades físicas relacionadas con las obtenidas por solución de la física en estudio.

Al inicio de un proyecto de simulación numérica en COMSOL, el programa te permite elegir la física involucrada en el fenómeno en estudio, de ahí que al programa se le llame Multifísica porque pueden elegirse esquemas teóricos bien consolidados como las ecuaciones del electromagnetismo,

Navier-Stokes, etc. También al inicio uno elige si la geometría en donde se va estudiar un fenómeno es en una dimensión, dos dimensiones y tres dimensiones. Finalmente, al inicio se elige si el estudio del fenómeno es en estado estacionario o no estacionario.

La simulación numérica se realizó en una computadora marca Dell, modelo XPS 8700, Procesador Intel(R) Core(TM) i7-4790 CPU 3.60GHz 3.60 GHz, memoria RAM 32 GB, Sistema operativo de 64 bits, procesador x64.

Una vez que uno ha elegido la física, el tipo de geometría y si el estudio es estacionario o no estacionario, se despliega el ambiente gráfico de COMSOL que consiste de 4 procesos principales, y a la derecha se muestra qué se hace en cada una de estas cuatro partes. Las cuatro partes principales son DEFINICIONES GLOBALES, COMPONENTES, ESTUDIOS y RESULTADOS, en seguida describimos cada una de éstas:

1. DEFINICIONES GLOBALES. Consiste en elegir los valores de los parámetros y los diferentes materiales que caracterizan al sistema en estudio, el software cuenta con una base de datos muy completa de diversos materiales.
2. COMPONENTES. Esta parte del algoritmo está dividida en cuatro partes:
 - a) *definiciones locales* como variables y parámetros asociados a la componente actual.
 - b) *geometría* del sistema, en la cual son relevantes las regiones, superficies, bordes y puntos, en cada una de estas partes se definen propiedades de los materiales que componen el sistema y además las condiciones de frontera.
 - c) *las Físicas*, son las ecuaciones diferenciales que están relacionadas con el sistema y objetivos de la simulación, por ejemplo la ecuación de Laplace, Ecuación de Navier-Stokes, etc..
 - d) *el mallado* que es una parte delicada de la simulación numérica, debido a que generalmente existen dominios de la geometría donde la solución buscada presenta desafíos numéricos de convergencia, el aumento en el número de nodos (grados de libertad) lleva a que la simulación tenga un tiempo de cómputo mayor.
3. ESTUDIOS. En esta parte del algoritmo se elige el tipo de estudio a simular,
 - a) *estacionario o no estacionario*, que ya se ha elegido al inicio.
 - b) *resolvidor* que es el método numérico con el cual se resuelven las ecuaciones físicas, junto con un parámetro que es la tolerancia relativa que define la calidad de los cálculos numéricos.
4. RESULTADOS. En esta parte se obtienen los resultados numéricos, las variables físicas asociadas con el problema, estos valores se presentan en forma de:
 - a) *gráficas de salida*, y con base en estas variables físicas generalmente se obtienen otras cantidades relevantes del estudio.
 - b) *valores derivados*, estas cantidades se obtienen con base en las variables físicas calculadas.

En la figura 3.1 se muestra la geometría de las micropartículas para las que hacemos el estudio de electrorrotación. En esta figura en (a) tenemos la geometría de una octava parte de un cilindro corto, esto es posible gracias a la simetría de este sistema, lo cual es una ventaja, ya que, al reducir la geometría nos permite realizar un mallado muy fino lo que se traduce en un menor tiempo de cómputo. Además, debemos señalar que para esta geometría de un cilindro corto de la micropartícula en los bordes son características de la geometría de discontinuidad donde el mallado requiere que sea extremadamente fino. En (b) se muestra la geometría completa de una micropartícula en forma de cilindro corto, esta la consideramos para comparar los resultados de esta geometría con los de

una octava parte del cilindro corto. Mientras que, en (c) la geometría de una micropartícula en forma de Esferoide Prolato que es una mejor aproximación a la forma de un glóbulo rojo rígido, esta forma de una micropartícula ha sido extensamente estudiada. Finalmente en (d), tenemos la geometría de un Discoide Bicóncavo que es la forma más cercana a la de un Glóbulo Rojo.

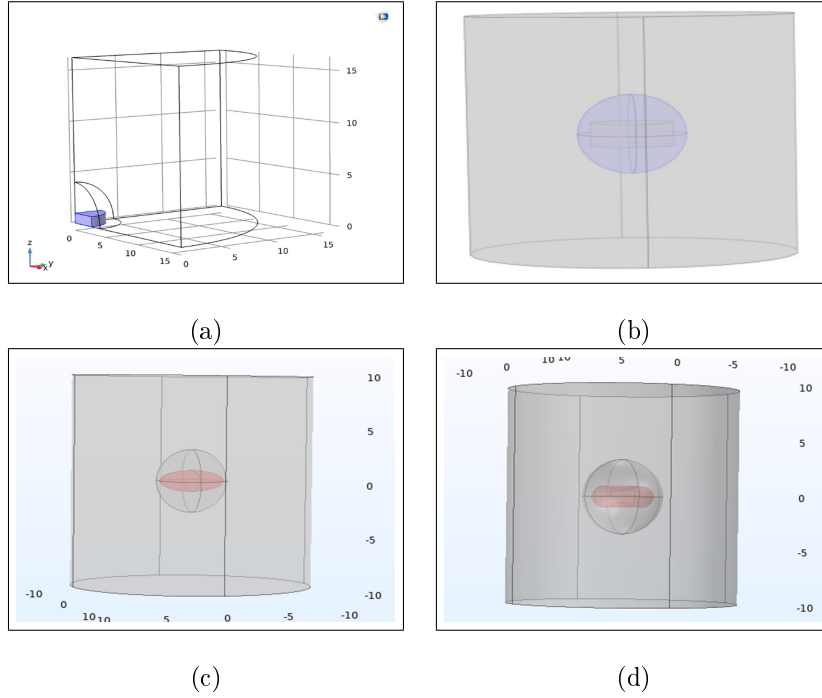


Figura 3.1: Geometría de micropartículas estudiadas en la electrorrotación. (a) Octava parte de un cilindro corto (Lenteja L), (b) Un cilindro corto completo (Lenteja L), (c) un Discoide Prolato (DP), y (d) Discoide Biconcavo (DB)

Debemos subrayar que en todas las geometrías mostradas, las partículas están rodeadas por una esfera, esta esfera no es una pared física del sistema, ésta es utilizada para realizar las integrales de las expresiones (2.4) y (2.5), de las polarizabilidades A y B , respectivamente.

La figura 3.2 muestra el mallado de cada geometría de las micropartículas, se puede ver que en (a) el mallado es extremadamente fino en los bordes debido a que estas partes de la geometría son discontinuidades y requieren un mallado especial, esto se traduce en un mayor número de elementos de volumen o un mayor número de nodos, es decir, un mayor número de grados de libertad. En (b) nuevamente se muestra el mallado extremadamente fino en los bordes del cilindro corto, es claro que en este caso, por ahora al considerarse todo el cilindro corto, el número de grados de libertad es también muy grande, pero a diferencia del caso (a), aquí los elementos de volumen del mallado son más grandes que en (a). Mientras que, en (c) y (d) se muestra el mallado del Esferoide Prolato y del Discoide Bicóncavo, en estas geometrías no hay bordes de discontinuidad pero aún así por considerarse toda la geometría el número de grados de libertad es también grande.

En las tabla 3.1 se muestran las características principales de las simulaciones para cada partícula, correspondientes al estudio 1, el cual consiste en resolver la ecuación de Laplace en el volumen de control para obtener los potenciales Φ_z y Φ_y , tal como fueron descritos en la sección 2.2. Mientras que, en la tabla 3.2 mostramos las correspondientes características de corridas para el estudio 2, el cual consiste en resolver la ecuación de Navier-Stokes para obtener las componentes del vector fuerza cortante que son necesarias para evaluar la velocidad angular ICEO dada por la

expresión (2.22) y el coeficiente de fricción viscoso dado por la expresión (2.23).

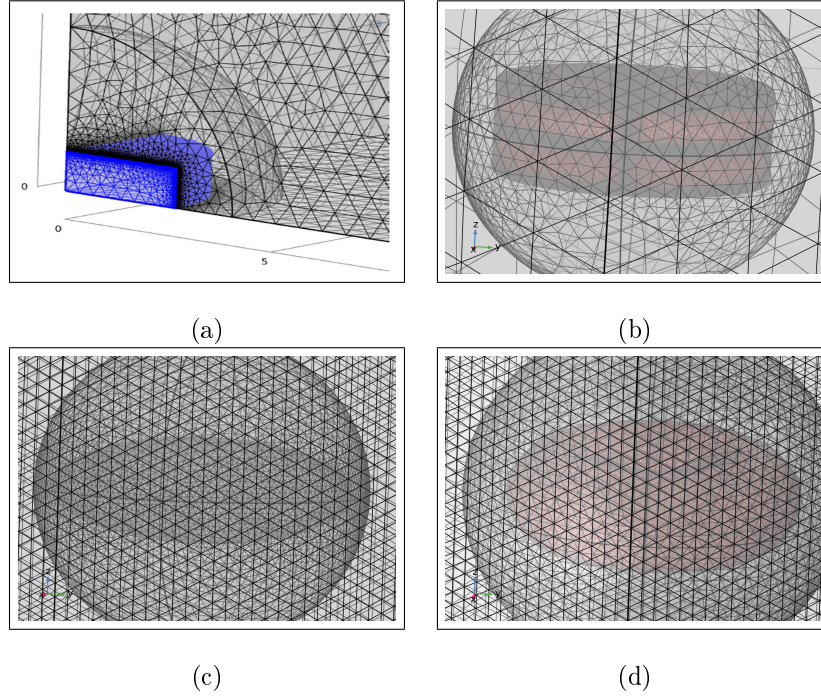


Figura 3.2: Mallado de la geometría de las micropartículas. (a) Mallado de una octava parte de un cilindro corto, que llamamos Lenteja. (b) Mallado de un cilindro corto, toda la lenteja. (c) Mallado de un Esferoide Prolato. (d) Mallado de un Discoide Bicóncavo.

Tabla 3.1: Estudio 1, solución de la Ecuación de Laplace, obtenemos Potencial eléctrico Φ_z y Φ_y .

Geometría Partícula	β	Tiempo de CPU	Grados de libertad	Tolerancia relativa
1/8 Lenteja	3.2	17hr, 12m, 12s	5,711,581	0.001
1/8 Lenteja	2.7	28hr, 15m, 42s	8,195,634	0.001
1/8 Lenteja	2.2	20hr, 4m, 22s	6,135,792	0.001
Lenteja Toda	2.7	20hr, 10m, 47s	7,240,525	0.001
Esferoide Prolato	2.7	16hr, 53m, 3s	3,869,369	0.001
Discoide Bicóncavo	2.7	12hr, 51m, 13s	3,127,085	0.001

3.2. Potenciales eléctricos y perfil de velocidades

Como resultado de la simulación numérica, se resuelve la ecuación de Laplace y se obtienen los potenciales Φ_z y Φ_y restando a estos el potencial externo en las correspondientes direcciones, se

Resultados de la electrorotación
3.2 Potenciales eléctricos y perfil de velocidades

Tabla 3.2: Estudio 2, solución de la Navier-Stokes, obtenemos Campo Velocidades y Vector Fuerza Cortante.

Geometría Partícula	β	Tiempo de CPU	Grados de libertad	Tolerancia relativa
1/8 Lenteja	3.2	6hr, 5m, 13s	2,483,296	0.001
1/8 Lenteja	2.7	9hr, 21m, 6s	3,725,288	0.001
1/8 Lenteja	2.2	6hr, 43m, 23s	2,788,996	0.001
Lenteja Toda	2.7	7hr, 54m, 23s	3,447,864	0.001
Esferoide Prolato	2.7	4hr, 50m, 34s	1,758,804	0.001
Discoide Bicóncavo	2.7	4hr, 25m, 59s	1,489,088	0.001

obtiene el potencial debido al dipolo inducido. En la figura 3.3 se muestran los potenciales debido a los dipolos, en esta figura en (a), (b) y (c) se muestra el potencial eléctrico del dipolo inducido en la dirección Y, para la lenteja completa, el esferoide prolato y el Discoide Bicóncavo, respectivamente. Mientras que, en (d), (e) y (f) se muestran los potenciales eléctricos de los dipolos inducidos en la dirección Z. Como se puede observar de las escalas de colores los potenciales eléctricos de los dipolos inducidos son más intensos en la dirección Y que aquellos en la dirección Z.

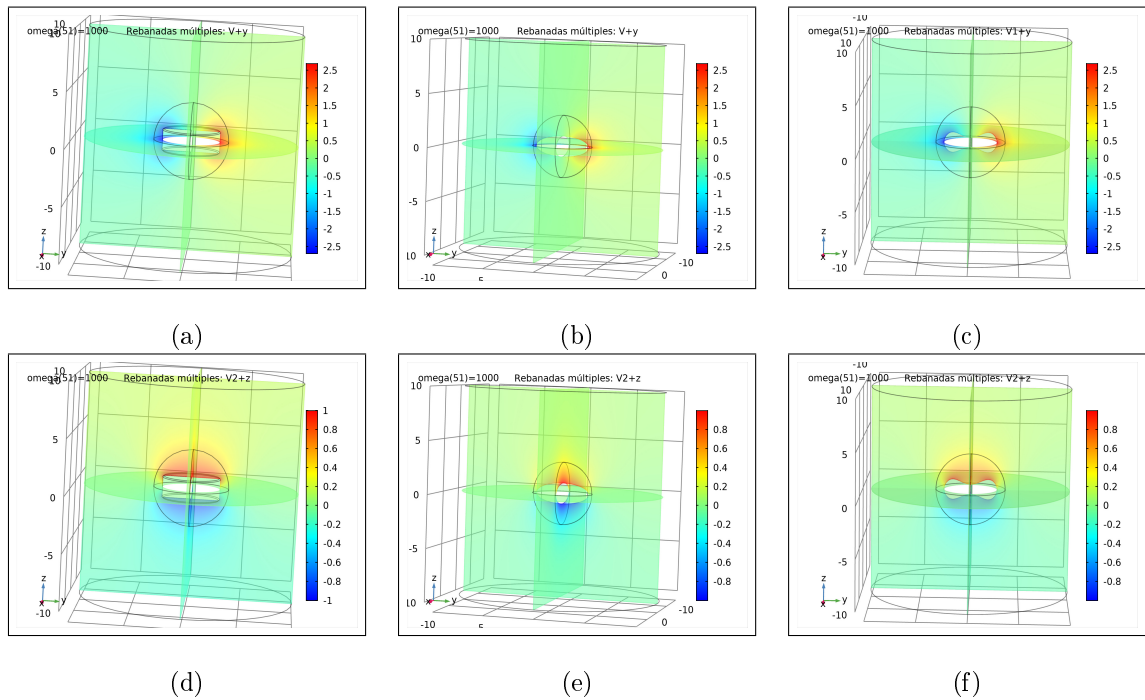


Figura 3.3: Potenciales eléctricos de los dipolos inducidos en las micropartículas. En (a), (b) y (c), el potencial eléctrico del dipolo en la dirección Y. Mientras que, en (d), (e) y (f), el potencial eléctrico del dipolo inducido en la dirección Z.

Por otra parte, en la figura 3.4 se muestran los perfiles de velocidad del flujo de la solución electrolítica alrededor de las micropartículas, estas imágenes son el resultado de resolver la ecuación de Navier-Stokes sujeta a la condición de no slip. Claramente se observa en (a), (b) y (c), que el flujo es más intenso en la zona roja, esto justamente nos muestra dónde se produce el par ICEO sobre las micropartículas.

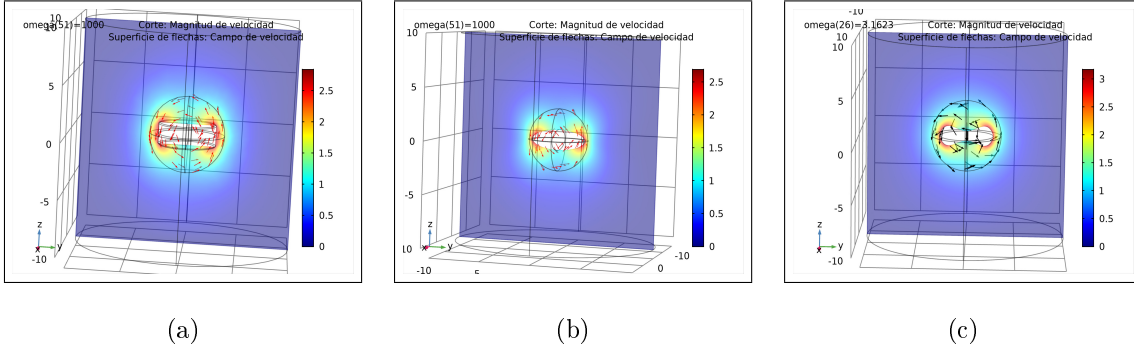


Figura 3.4: El campo de velocidades alrededor de la micropartículas. En (a) para la lente completa, (b) para el Esferoide Prolato, y en (c) para el Discoide Bicóncavo.

3.3. Polarizabilidades

De resolver la ecuación de Laplace se obtienen los potenciales eléctricos, Φ_z y Φ_y , con estos valores numéricos ahora se obtienen las polarizabilidades A y B que están dadas por las expresiones (2.4) y (2.5), respectivamente. Como indican estas expresiones, la integral de superficie cerrada, es justo como en la ley de Gauss, para tal efecto la integral se realiza sobre la esfera que encierra a la partícula, tal superficie esférica se observa en las figuras 3.1. La evaluación numérica se obtiene para un intervalo de la frecuencia adimensional $\tilde{\omega}$.

En la figura 3.5, mostramos los espectros de polarización parte imaginaria ImA y ImB de Lentejas para tres valores de β , siendo el valor $\beta = 2.7$ la razón entre el semiancho y el semialto de un glóbulo rojo como lo muestra la figura 1.2. De la figura 3.5, se pueden observar tres características, la primera observación es que los máximos $ImA > ImB$, es decir, la polarización es más intensa en la dirección Y de las Lentejas; la segunda observación es que las curvas de polarizabilidad para diferentes valores de β son claramente distinguibles; y la tercera observación, el máximo de los picos se mueve hacia la izquierda conforme β crece.

Y en la figura 3.6, mostramos los espectros de polarizabilidad de ImA y ImB para las tres formas geométricas de las micropartículas, Lenteja (una octava parte), Esferoide Prolato y Discoide Bicóncavo, para el mismo valor de la razón $\beta = 2.7$. Debido a que la forma geométrica de un Discoide Bicóncavo es la geometría más cercana a la de un glóbulo rojo, se observa de la figura que la Lenteja sobre estima el máximo de la del Discoide Bicóncavo, mientras que el Esferoide Prolato subestima el máximo del Discoide Bicóncavo. Esto se observa tanto en la parte ImA como en ImB .

Lo que es claro de los espectros de polarizabilidad anteriores, Figuras 3.5 y 3.6, es que estos son muy sensibles a la forma geométrica de las micropartículas y a la razón β . Esto podría ser utilizado para caracterizar micropartículas, desafortunadamente la polarizabilidad no se puede medir en un experimento.

3.4. Velocidad angular de rotación

En la sección 2.1 se describe que la velocidad angular de rotación se debe principalmente a dos contribuciones, la primera debido al par eléctrico que ejerce el campo eléctrico aplicado sobre el dipolo eléctrico inducido, Ω_{rot}^e (también llamada Dielectroforesis DEP), mientras que, la segunda contribución se debe a que la carga eléctrica de la doble capa cerca de la micropartícula metálica siente el campo eléctrico aplicado y se produce un flujo electroosmótico que a su vez aplica un par sobre la micropartícula dando origen a Ω_{rot}^{ieco} ; de manera que la velocidad angular de rotación total de la micropartícula está dada por la expresión (2.1).

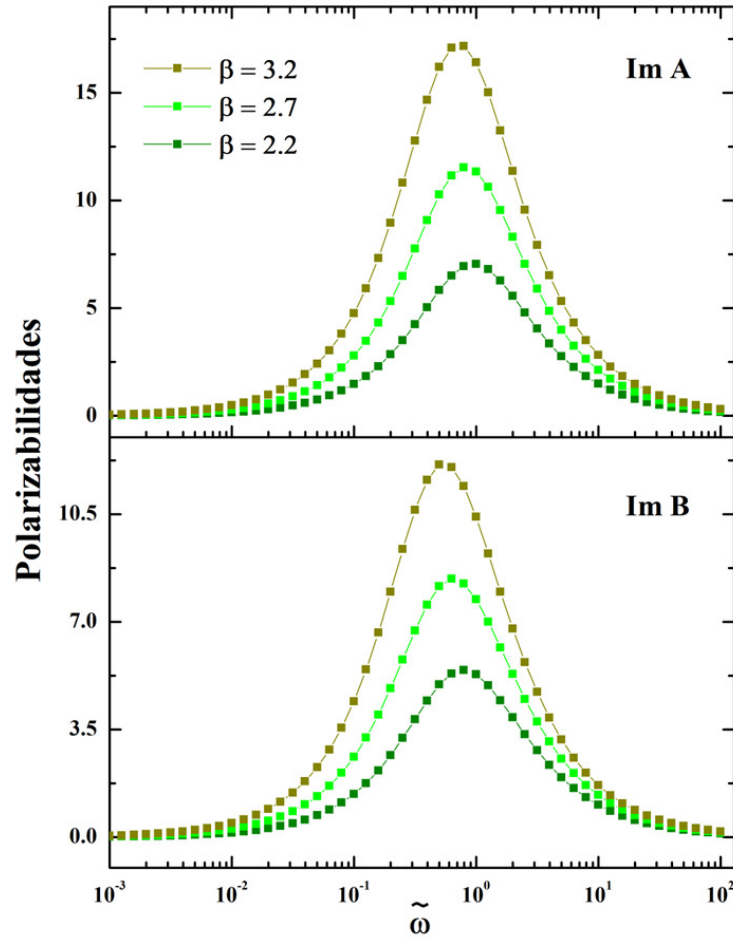


Figura 3.5: Espectro de Polarizabilidad para diferentes valores del parámetro β , considerando para esto una octava parte de una Lenteja (cilindro corto), ver figura 3.1(a)

Las contribuciones a la velocidad angular de rotación total de la micropartícula metálica son evaluadas numéricamente por medio de las expresiones (2.7) y (2.22), de resolver la ecuación de Laplace y de Navier-Stokes usando COMSOL multiphysics tenemos las cantidades necesarias como son los coeficientes de polarizabilidad A y B, las componentes de la velocidad de deslizamiento de la expresión (2.23) y las componentes del vector fuerza cortante. Además, debe notarse que en la ecuación (2.7) el coeficiente viscoso de la microesfera es justo el denominador de la expresión (2.22).

En la figura 3.7 se muestran los valores numéricos de micropartículas en forma de Lenteja para diferente valores de β , de acuerdo al procedimiento descrito en el párrafo anterior. Estos resultados numéricos corresponden a una micropartícula metálica en forma de cilindro corto, pero por las simetrías del problema solo tomamos una octava parte del cilindro corto (a esta le llamamos Lenteja). Podemos notar en la figura primero que $\Omega_{rot}^e > \Omega_{rot}^{iceo}$, el pico en ambas contribuciones se mueve a frecuencias bajas conforme β aumenta, en la Dielectroforesis el pico disminuye conforme β crece, en cambio notamos que en la contribución ICEO no se ve un cambio en la intensidad del pico conforme β crece. También, en la contribución ICEO los espectros de rotación son claramente distintos para diferentes β , en cambio en la contribución DEP la distinción entre los espectros de rotación no es clara para diferentes β , sobre todo a frecuencias bajas. Finalmente, ambas contribuciones hacen rotar a la Lenteja en el mismo sentido, counterfield. En la referencia [7], se muestra

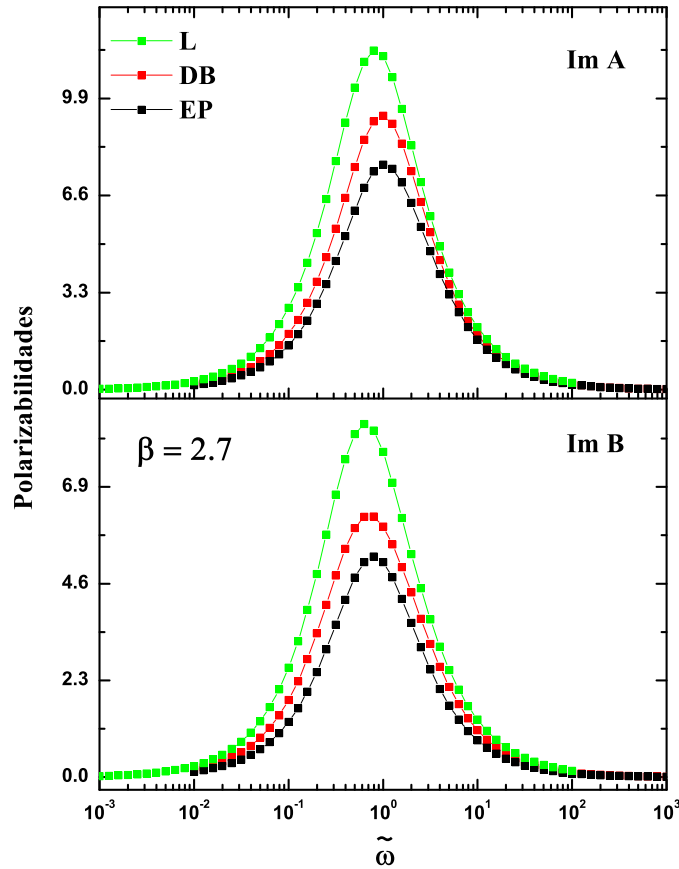


Figura 3.6: Espectros de Polarizabilidad, ImA y ImB para Lenteja (L) (una octava parte), Esferoide Prolato (EP) y Discoide Bicóncavo (DB), todas las micropartículas con el mismo valor del parámetro $\beta = 2.7$, de un glóbulo rojo.

que para $\beta < 1$ la contribución DEP es counterfield y la contribución ICEO es cofield, pero para $\beta \geq 1$ ambas contribuciones son counterfield, así nuestros resultados con $\beta \geq 2.2$ siguen el mismo comportamiento mencionado.

La figura 3.8 muestra un análisis numérico comparativo de la velocidad angular DEP e ICEO para $\beta = 2.7$ de una micropartícula conductora inmersa en una solución electrolítica, para la Lenteja (tomando una octava parte LO) y Lenteja (tomando toda la geometría, LT). Estas curvas muestran que ambos resultados coinciden muy bien, excepto en el pico de la velocidad angular de rotación DEP e ICEO, esto se debe a que en LT el elemento finito es más grande que en LO, no pudimos tomar el mismo para LT y LO, porque nos daba un número de grados de libertad que no fue soportado por la memoria RAM de la PC, no obstante, la diferencia es porcentualmente aceptable.

Y en la figura 3.9, mostramos los resultados numéricos de la velocidad angular de rotación, DEP e ICEO, de micropartículas metálicas inmersas en solución electrolítica, para $\beta = 2.7$. Las micropartículas en forma de Lenteja (L), Esferoide Prolato (EP) y en forma de Discoide Bicóncavo (DB). Los resultados numéricos de la Lenteja, corresponden a tomar una octava parte del cilindro

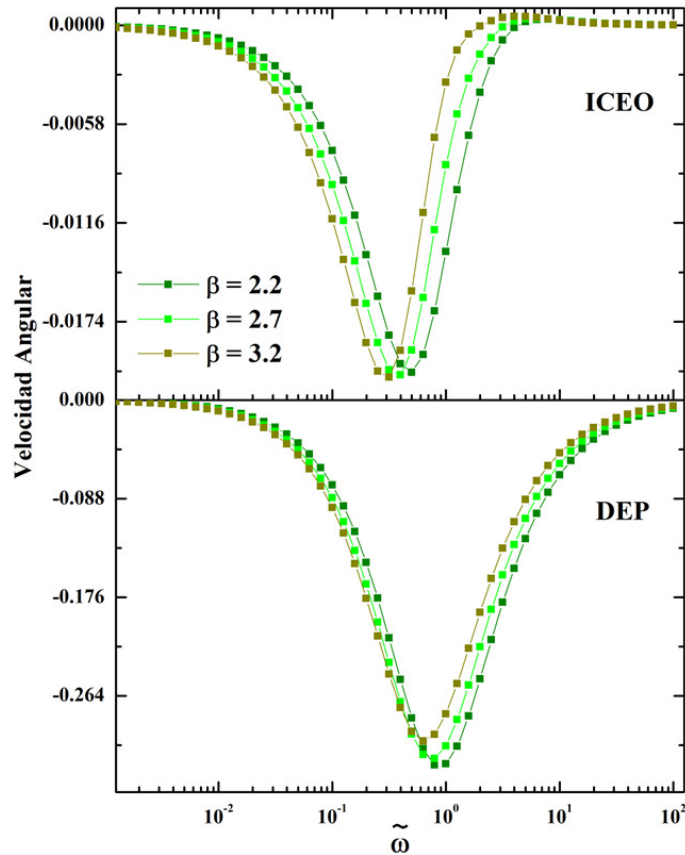


Figura 3.7: Espectro de velocidad angular de rotación de la microletrija metálica (una octava parte de un cilindro corto), para diferentes valores de β , en la parte superior la contribución debido al flujo electroosmótico y abajo la contribución debido a la del dipolo eléctrico con el campo eléctrico aplicado.

corto. Es necesario recordar que la forma de Discoide Bicóncavo es la forma geométrica que coincide mejor con la forma del Glóbulo Rojo [11], por lo que, tomamos como referencia esta forma para nuestro análisis comparativo.

De la figura 3.9 podemos ver en cuanto a la velocidad angular de rotación DEP, que ambas aproximaciones L y EP sobre estiman la intensidad del pico del que corresponde al pico del DB, aunque la localización del pico coinciden. En cuanto a la contribución de la velocidad angular de rotación ICEO, vemos que la aproximación de la L sobre estima mucho al pico de DB, mientras que, la aproximación del EP casi coincide con el pico de DB, pero la aproximación EP tiene un cambio de signo en sus valores de la velocidad, lo cual deberá ser verificado en algún experimento. También, recordemos que para $\beta > 1$ ambas contribuciones aportan a la velocidad de la partícula en el mismo sentido counterfield. Pero aquí para la aproximación EP aparece un cambio de signo de counterfield a cofield, alrededor de una frecuencia sin dimensiones de 1.

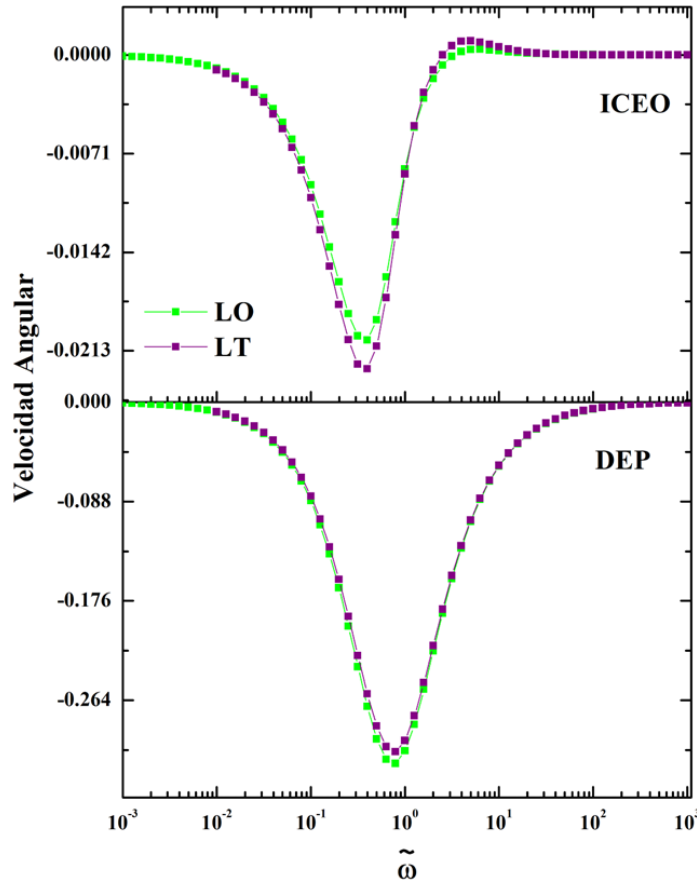


Figura 3.8: Velocidad angular de rotación DEP e ICEO de una micropartícula en forma de Lenteja, LO solo tomando una octava parte del cilindro corto y LT tomando todo el cilindro corto.

3.5. Coeficiente viscoso

Finalmente, mostramos en la tabla 3.3 el coeficiente viscoso de una micropartícula que es obtenido por medio de la expresión (2.24). En primer lugar se puede ver que para la Lenteja (octava parte del cilindro corto) el coeficiente viscoso aumenta conforme el parámetro β aumenta, lo cual es físicamente aceptable, ya que el área en contacto con el fluido aumenta conforme β crece. En segundo lugar, comparando el valor del coeficiente viscoso para $\beta = 2.7$ de una Lenteja, con una octava parte ($\gamma = 388.07$) y toda la Lenteja ($\gamma = 249.50$), los valores no coinciden, ya se argumentó que los espectros de la velocidad angular en estos dos casos no coinciden completamente porque, el tamaño del elemento no se pudo hacer igual. En tercer lugar, para la micropartícula en forma de Esferoide Prolato, para $\beta = 2.7$ el resultado numérico empleando la expresión (2.24) casi coincide con el cálculo teórico de la ecuación (2.25), válida para el Esferoide Prolato, esto le da validez a nuestra formulación del problema de electrorotación de micropartículas conductoras. Finalmente, vemos que para el Discoide Bicóncavo, Glóbulo Rojo Rígido, el coeficiente viscoso obtenido para este *Glóbulo Rojo* es de $\gamma = 353.50$, las aproximaciones cero Lenteja y aproximación de orden uno Esferoide Prolato, difieren mucho de este valor, por lo que no son buenas aproximaciones para un

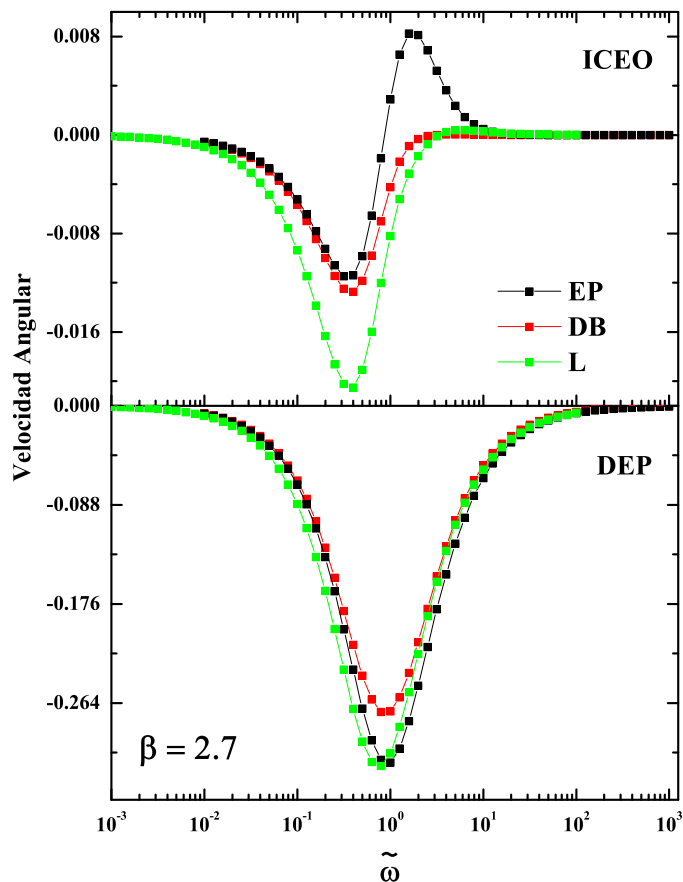


Figura 3.9: Espectros de velocidad angular de rotación DEP e ICEO para micropartículas con $\beta = 2.7$, en forma de Lenteja (L), Esferoide Prolato (EP) y en forma de Discoide Bicóncavo (DB).

Glóbulo Rojo Rígido.

Tabla 3.3: Coeficiente viscoso de las partículas conductoras.
Coeficiente viscoso de la Lenteja, Discoide Bicóncavo y Esferoide Prolato

Forma	γ
Lenteja ($\beta = 2.2$)	238.76
Lenteja ($\beta = 2.7$)	388.07
Lenteja ($\beta = 3.2$)	601.37
Discoide Bicóncavo ($\beta = 2.7$)	353.59
Esferoide Prolato Numérico ($\beta = 2.7$)	252.7
Esferoide Prolato Teórico ($\beta = 2.7$)	249.50
Lenteja Completa ($\beta = 2.7$)	397.17

Capítulo 4

Conclusiones

Hemos estudiado la electrorotación de micropartículas metálicas inmersas en una solución electrolítica, considerando tres geometrías para la micropartícula, que son: cilindro corto (lenteja), esferoide prolato y discoide bicóncavo. En este estudio se considera que la doble capa es delgada.

La motivación de estudiar la electrorotación de un glóbulo rojo y conocer características de este tipo de células nos llevó a considerar como primera aproximación el cilindro corto (lenteja), como segunda aproximación el esferoide prolato y como tercera aproximación el discoide bicóncavo. Decimos que son aproximaciones porque un glóbulo rojo no es rígido, y en nuestro estudio consideramos a estas geometrías como rígidas.

En el fenómeno de electrorotación de suspensión de partículas aparecen cuatro efectos relevantes: el par aplicado por el campo eléctrico rotante sobre el dipolo inducido, el par aplicado por el flujo electroosmótico debido al movimiento de la carga en la doble capa, el efecto browniano sobre las partículas y el efecto de las paredes que contienen la suspensión de partículas. En este estudio solo hemos considerado por ser los más relevantes los primeros dos efectos.

Se encontraron los espectros de polarizabilidad, para diferentes valores del parámetro β alrededor del valor promedio de un glóbulo rojo que es de $\beta = 2.7$. Estos espectros de polarizabilidad son muy sensibles a la geometría de la partícula, sin embargo, estos no se pueden medir en un experimento. Por lo que los espectros de polarizabilidad no son buenos candidatos para caracterizar a las micropartículas.

Se calcularon los espectros de rotación, para los diferentes valores del parámetro β . En éstos se encuentra que son sensibles a la geometría en menor grado que los de polarizabilidad, creemos que pueden ser adecuados para caracterizar a las micropartículas y tienen la ventaja de que sí se pueden medir experimentalmente.

También se calcularon numéricamente los coeficientes de fricción viscoso para todas las geometrías. Encontramos que el coeficiente de fricción viscoso del Esferoide Prolato Numérico obtenido por nuestra simulación coincide muy bien con el coeficiente de fricción viscoso teórico del Esferoide Prolato (ver Perrin), lo cual valida nuestra metodología numérica. Para nuestra mejor aproximación a un glóbulo rojo que es el Discoide Bicóncavo se encontró que el coeficiente de fricción viscoso es de $\gamma = 353.59$, no encontramos en la literatura un valor experimental o teórico para poder comparar con nuestro resultado.

Para $\beta > 1$ observamos que la contribución DEP y la contribución ICEO, ambas son en el mismo sentido; mientras que para $\beta < 1$ la contribución DEP es en sentido contrario a la

contribución ICEO.

Para el Esferoide Prolato encontramos que la contribución del flujo electroosmótico de la velocidad angular de la partícula para frecuencias bajas rota en el mismo sentido que la contribución eléctrica, mientras que para frecuencias altas, rota en sentido contrario a la contribución eléctrica. Este comportamiento nos parece muy interesante, por lo que es un trabajo a futuro para nosotros.

Otro trabajo a futuro que nos interesa es estudiar numéricamente al Discoide Bicóncavo pero ahora con geometría elástica, ya que un glóbulo rojo real se comporta de manera elástica.

Apéndice A

Congreso Nacional de Física 2019



Figura A.1:

Apéndice B

Congreso División Dinámica de Fluidos 2019



Apéndice C

Congreso Nacional de Física 2020

LXIII Congreso Nacional
de Física
Morelia, Michoacán 2020





LA SOCIEDAD MEXICANA DE FÍSICA
Agradece la participación de:

Arias Neri Zulema Abigail
Aniversario 1950-2020
Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

en el **LXIII Congreso Nacional de Física**
del 5 al 9 de octubre de 2020
MORELIA, MICHOACÁN
EN LINEA


Dr. Tonatiuh Matos Chassin
Presidente de la SMF

Figura C.1: Congreso Nacional de Física. Morelia, Michoacán.

Apéndice D

Congreso Internacional de Materiales 2022

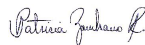


August 2022

TO WHOM IT MAY CONCERN
Present

This is to certify that *Jose Eladio Flores Mena, Edy Flores Flores, Eligio Moises Gutierrez Arias, Antonio Michua Camarillo, Zulema Abigail Arias Neri, Pablo Garcia Sanchez, Antonio Ramos Reyes* presented the contribution: **PHYSICAL AND ELECTRICAL CHARACTERIZATION METALIC MICROPARTICLES, IMMERSSED IN ELECTROLYTE SOLUTION BY ELECTROROTATION WITH AC ELECTRIC FIELDS** as Poster modality, in the *D7. Structural and Chemical Characterization of Metals and Alloys Symposium* at the **XXX International Materials Research Congress and International Conference on Advanced Materials** held in Cancun, Mexico from August 14th to 19th, 2022.

Sincerely,



Patricia del Carmen Zambrano Robledo
President



SDI-1025

Figura D.1: Congreso Interacional de Investigación en Materiales. Cancún, Quintana Roo.

Bibliografía

- [1] J. P. Hansen and I. R. McDonald, *The theory of Simple Liquids*, Academic Press, London 2nd. Ed. 1990.
- [2] D. A. McQuarrie, *Statistical Mechanics*, Harper and Row, New York, 1976.
- [3] E. L. León-Torres; F. Torrealba-Anzola; *Los lab on a chip: aplicaciones existentes y desafíos futuros*, REDIP. UNEXPO, VRB, Venezuela, **1**, 19 (2011).
- [4] P. Tabeling, S. Chen, *Introduction to microfluidics*, Oxford University Press, New York (2005).
- [5] Shizhi Qian; Ye Ai, *Electrokinetic particle transport in micro-/nanofluidics : direct numerical simulation analysis*, CRC Press, Taylor and Francis Group, Boca Raton (2012).
- [6] M. J. Madou, *Fundamentals of Microfabrication and Nanotechnology*, CRC Press, Taylor and Francis Group, Boca Raton (2012).
- [7] J. E. Flores-Mena, Pablo Garcia-Sanchez, Antonio Ramos, *Electrokinetics of metal cylinders*, Physical Review E, **99**, 032603 (2019).
- [8] Pablo Garcia-Sanchez, J. E. Flores-Mena, Antonio Ramos, *Modeling the AC Electrokinetic Behavior of Semiconducting Spheres*, Micromachines, **10**, 1(2019).
- [9] J. E. Flores-Mena, Pablo Garcia-Sanchez, Antonio Ramos, *Dipolophoresis and Travelling-Wave Dipolophoresis of Metal Microparticles*, Micromachines, **11**, 1(2020).
- [10] G. P. Galdi, R. Rannacher, A. M. Robertson, S. Turek, *Hemodynamical Flows, Modeling, Analysis and Simulation*, Birkhuser, Boston(2008).
- [11] H. Naito and M. Okuda and O. Zhong-can, *Polygonal shape transformation of a circular biconcave vesicle induced by osmotic pressure*, Physical Review E, **54**, 2816(1996).
- [12] A. V. Nerkararyan, M. S. Mikaelyan, M. A. Shahinyan, P. O. Vardevanyan, *Surface charge density of rat blood erythrocytes under the influence of millimeter diapason electromagnetic radiation*, Biolog., Journal of Armenia, **3**, 16(2015).
- [13] S. Dokos, *Modellin Organs, Tissues, Cells and Devices*, Springer-Verlang, Berlin (2017).
- [14] MedlinePlus en español [Internet]. Bethesda (MD): Biblioteca Nacional de Medicina (EE. UU.) [actualizado 27 ago. 2019]. Leucemia; [actualizado 9 junio. 2018; consulta 9 junio. 2022]; [aprox. 5 p.]. Disponible en: <https://medlineplus.gov/spanish/ency/article/001299.htm>
- [15] MedlinePlus en español [Internet]. Bethesda (MD): Biblioteca Nacional de Medicina (EE. UU.) [actualizado 27 ago. 2019]. Leucemia; [actualizado 5 mayo. 2022; consulta 9 junio. 2022]; [aprox. 3 p.]. Disponible en: <https://medlineplus.gov/spanish/leukemia.html>
- [16] Annie Viallat, Manouk Abkarian; *Dynamics of Blood Cell Suspensions in Microflows*, CRC Press, Taylor and Francis Group, Boca Raton (2020).

- [17] David J. Griffiths; *INTRODUCTION TO ELECTRODYNAMICS*, Pearson, fourth Edition (2013).
- [18] Hywel Morgan and Nicolas G Green; *AC Electrokinetics: colloids and nanoparticles*; RESEARCH STUDIES PRESS LTD. Baldock, Hertfordshire, England (2003).
- [19] Socrates Dokos; *Modelling Organs, Tissues, Cells and Devices*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2017).
- [20] Antonio Ramos; *Electrokinetics and Electrohydrodynamica in Microsystems*, Springer-Wien New York (2011).
- [21] F. Perrin, *J. Phys. Radium* **5**, 497 (1934).
- [22] B. W. Goldstein, T. Miloh, *3D Controlled electrorotation of conducting tri-axial ellipsoidal nanoparticles*, *Physics of Fluids*, **29**, 052008 (2017).