



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

---

Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas

---

Estudio teórico y de simulación del fenómeno de  
Electrorrotación de una microesfera metálica inmersa en una  
solución electrolítica

Tesis presentada al

**Colegio de Física**

como requisito parcial para la obtención del grado de

**Licenciado en Física Aplicada**

por

Luis Angel Muñoz Martínez

asesorado por

Dr. José Eladio Flores Mena  
Dra. María Monserrat Morín Castillo.

Puebla Pue.  
25 de octubre de 2021





Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

---

Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas

---

Estudio teórico y de simulación del fenómeno de  
Electrorotación de una microesfera metálica inmersa en una  
solución electrolítica

Tesis presentada al

**Colegio de Física**

como requisito parcial para la obtención del grado de

**Licenciado en Física Aplicada**

por

Luis Angel Muñoz Martínez

asesorado por

Dr. José Eladio Flores Mena  
Dra. María Monserrat Morín Castillo.

Puebla Pue.  
25 de octubre de 2021



**Título:** Estudio teórico y de simulación del fenómeno de  
Electrorrotación de una microesfera metálica inmersa en una solución  
electrolítica

**Estudiante:** LUIS ANGEL MUÑOZ MARTÍNEZ

COMITÉ

---

Dra. Honorina Ruíz Estrada  
Presidente

---

Dr. Benito Flores Desirena  
Secretario

---

Dr. Juan Nieto Frausto  
Vocal

---

Dr. Roberto Ramírez Sánchez  
Vocal

---

Dr. José Eladio Flores Mena  
Dra. María Monserrat Morín Castillo.  
Asesor



*Para mi Familia ...*



# Agradecimientos

La elaboración de un trabajo de tesis es una experiencia en la que intervienen muchas personas, dejando cada una de ellas su propia huella. Como justo testimonio de este hecho, es un placer escribir los siguientes párrafos:

En primer lugar, deseo expresar profundamente mi agradecimiento a: **Dr. José Eladio Flores Mena**. Estoy completamente seguro que sin su paciente guía a la hora de dirigirme, este trabajo de investigación no hubiese salido adelante: **¡Muchas gracias por confiar en mí!**

En un lugar muy especial, y con afecto, agradezco a los compañeros con los que caminé este largo y sinuoso trayecto<sup>1</sup>. Sabemos lo mucho que nos costó mantenernos avantes durante nuestros estudios universitarios. Espero que todos sigamos luchando por lograr nuestros anhelos y sueños: **¡Gracias por todo, amigos!**

Este párrafo lo quiero destinar para agradecer al jurado revisor de esta tesis: **Dra. Honorina Ruíz Estrada, Dr. Benito Flores Desirena, Dr. Juan Nieto Frausto y Dr. Roberto Ramírez Sánchez**. Sus valiosas observaciones y aportaciones contribuyeron en demasía a reforzar este trabajo. No obstante, quisiera extender mi admiración y respeto por haber sido mis profesores durante mis estudios de licenciatura.

Agradezco el apoyo recibido mediante el proyecto **100017966-VIEP2019** con título: **Manipulación de Micropartículas inmersas en una Solución Electrolítica por medio de Campos Alternos** del cuerpo académico **BUAP-CA-259-Sistemas No Lineales: Modelado, Simulación e Implementación**, siendo colaboradores la **Dra. María Monserrat Morín Castillo** y el **Dr. José Eligio Moisés Gutiérrez Arias**.

Agradecemos la colaboración con el con el **Departamento de Electrónica y Electromagnetismo** de la Facultad de Física, Universidad de Sevilla, España. De manera muy especial al **Dr. Antonio Ramos-Reyes** y al **Dr. Pablo García-Sánchez**, que proporcionaron los vídeos de sus experimentos con microesferas de titanio, además de sus valiosos comentarios sobre el tema.

Finalmente, agradezco a la planta docente de Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (**FCFM-BUAP**) por todas sus enseñanzas. Es un orgullo haber pertenecido a la mejor Facultad de Ciencias de México.

---

<sup>1</sup>Ustedes saben quienes son.



*”Mientras los hombres sean libres para preguntar lo que deben; libres para decir lo que piensan; libres para pensar lo que quieran; la libertad nunca se perderá y la ciencia nunca retrocederá ”*

**Julius Robert Oppenheimer (1904-1967)**

Físico Estadounidense



# Índice general

<b>Resumen</b> . . . . .	XII
<b>1. Conceptos Básicos</b> . . . . .	<b>1</b>
1.1. Microfluídica . . . . .	1
1.1.1. Antecedentes Históricos . . . . .	1
1.1.2. Conceptos Físicos de la Microfluídica . . . . .	3
1.2. Fenómenos Electrocinéticos . . . . .	4
1.2.1. Dielectroforésis . . . . .	5
1.2.2. Electroósmosis . . . . .	6
1.2.3. Electroforesis . . . . .	7
1.2.4. Electrorrotación . . . . .	7
1.3. Materiales . . . . .	9
1.3.1. Densidad de Corriente . . . . .	9
1.3.2. Conductores . . . . .	9
1.3.3. Semiconductores . . . . .	10
1.3.4. Dieléctricos . . . . .	11
1.3.5. Fenómeno de Polarización . . . . .	11
1.4. La Doble Capa Eléctrica . . . . .	12
1.5. Campos Alternos y Fasores . . . . .	13
1.6. La Ecuación de Poisson . . . . .	14
1.7. Las Ecuaciones de Navier-Stokes . . . . .	15
1.8. El Método de Elementos Finitos . . . . .	17
1.8.1. Fundamentos Matemáticos del Método de Elementos Finitos . . . . .	17
1.8.2. Metodología General del Método del Elemento Finito . . . . .	18
<b>Introducción</b> . . . . .	<b>1</b>
<b>2. Electrorrotación de una Esfera Metálica</b> . . . . .	<b>21</b>
2.1. Planteamiento del Problema . . . . .	21
2.2. Formulación Matemática . . . . .	23
2.3. Solución Analítica del Problema Electroestático . . . . .	24
2.4. Flujo Electroosmótico, ICEO . . . . .	25
2.5. Coeficiente viscoso de rotación para una esfera . . . . .	26
2.6. Detalles Experimentales . . . . .	26
<b>3. Resultados de la Electrorrotación</b> . . . . .	<b>29</b>
3.1. Simulación Computacional . . . . .	29
3.2. Características de la Simulación . . . . .	31
3.3. Potenciales Eléctricos y Perfil de Velocidades . . . . .	33
3.4. Polarizabilidades . . . . .	34
3.5. Velocidad Angular de Rotación . . . . .	35
3.6. Coeficiente Viscoso de Rotación . . . . .	36

<b>Conclusiones</b> . . . . .	37
<b>Apéndice A</b> . . . . .	38
<b>Apéndice B</b> . . . . .	39
<b>Bibliografía</b> . . . . .	41

# Resumen

En este trabajo presentamos un estudio teórico y de simulación computacional del fenómeno de electrorotación de una microesfera metálica inmersa en una solución electrolítica 1:1 mediante campos eléctricos de corriente alterna. Para esto resolvemos las ecuaciones de Laplace y Navier-Stokes, con lo cual obtenemos el potencial eléctrico y el campo de velocidades alrededor de la microesfera. Consideramos como condiciones de frontera que la doble capa es delgada y cerca de ella, el campo de velocidades cumple la condición de no deslizamiento. La velocidad angular de rotación se debe a dos efectos, uno debido al par aplicado por el campo eléctrico sobre el dipolo inducido en la microesfera y el debido al par aplicado por el flujo electroosmótico inducido alrededor de la microesfera. Hacemos un análisis comparativo de nuestros resultados de simulación con los de la teoría para la velocidad angular eléctrica y electroosmótica. Encontramos excelente concordancia entre ambos resultados. Con éste estudio nuestro método numérico está validado con los resultados teóricos.

**Palabras clave:** *efectos electrocinéticos, electrorotación, electrolitos, electrostática, flujos de micro y nanoescala.*

# Introducción

Las herramientas para manipular partículas a escala micro y nanométrica es un campo de creciente interés debido a sus diversas aplicaciones tecnológicas y su uso en la investigación fundamental [1]. El primer estudio sobre este tipo de fenómenos data del año 60 A.C., cuando el filósofo romano Lucrecio estudio el comportamiento de las partículas de polvo suspendidas en el aire [2]. A principios del siglo XIX, el médico alemán afincado en Rusia Ferdinand Friedrich von Reuss realizó una serie de experimentos con partículas sólidas inmersas en medios acuosos [3]. Posteriormente, en 1827, el botánico escocés Robert Brown descubrió el movimiento de las partículas contenidas en granos de polen suspendidas en un líquido en reposo (denominado más tarde movimiento Browniano). Hacia 1846, el médico francés Jean M. Poiseuille publicó un artículo sobre su investigación experimental del movimiento de líquidos en tubos capilares, siendo este el estudio pionero en el área de la Microfluídica [4]. El trabajo del físico escocés James C. Maxwell y los desarrollos posteriores permitieron la creación de campos eléctricos rotantes para manipular partículas de tamaño pequeño a finales del siglo XIX [5]. Sin embargo, el siglo XX fue el preludio para el entendimiento de tecnologías en escalas micrométricas. El trabajo pionero realizado por la química británica Rosalind Franklin con su fotografía 51 motivó el descubrimiento de la estructura del ADN por parte del biólogo estadounidense James D. Watson en colaboración con el físico británico Francis Crick (ganadores del premio nobel de fisiología y medicina de 1962 junto al físico neozelandés Maurice Wilkins) incentivando así el desarrollo de técnicas sofisticadas para el análisis y detección en sistemas pequeños [6]. El primero que llamó la atención sobre este nuevo dominio de la Física fue el premio nobel Richard P. Feynman en una conferencia profética anunciada en 1959 ante la Sociedad Norteamericana de Física con el título: "There's Plenty of Room at the Bottom: An invitation to enter a new field of Physics", planteó una pregunta simple: ¿Cuáles son las posibilidades de las máquinas pequeñas pero móviles?. No se trataba de una pregunta retórica, resultaba evidente que su respuesta podía tener un enorme impacto en la sociedad y economía [7]. En las últimas décadas, el crecimiento acelerado de la Nanotecnología ha permitido desarrollar una cantidad de nuevas técnicas que usan campos eléctricos para manipular y caracterizar pequeñas partículas que se encuentran dispersas en líquidos. Por ejemplo, la orientación y el desplazamiento de micropartículas metálicas y semiconductoras pueden ser controladas mediante señales eléctricas aplicadas a microelectrodos; estas micropartículas, a su vez, pueden ser usadas para la fabricación de transistores con aplicaciones tan importantes como la detección y caracterización de ADN [8]. La Microfluídica es la ciencia de la manipulación de fluidos en escalas espaciales que se encuentran entre uno y cientos de micrómetros. En los albores del siglo XXI, sus aplicaciones tecnológicas permitirán desarrollar dispositivos sofisticados para la detección de enfermedades e infecciones. Es de destacar que en esta escala aparecen los denominados fenómenos electrocinéticos [9].

Los fenómenos electrocinéticos involucran el uso de campos eléctricos para ejercer fuerzas electroestáticas sobre partículas suspendidas en fluidos cargados o polarizables. Con el avance significativo en la tecnología de fabricación en micro y nano escala, los campos eléctricos pueden ser fácilmente llevados a estos órdenes de magnitud, en los cuales la electrocinética se vuelve uno

de los efectos más dominantes [10]. Como resultado de lo anterior, la electrocinética ha emergido como una de las técnicas más prometedoras para transportar, manipular y caracterizar partículas en la micro y nanofluidica usando únicamente campos eléctricos sin ninguna parte móvil [11]. Dentro de los fenómenos electrocinéticos más relevantes podemos mencionar a la electroósmosis, dielectroforésis, electroforésis y más recientemente la electrorotación. Esta última consta de aplicar un campo eléctrico rotante sobre una o varias micropartículas [12–14].

El fenómeno electrocinético de electrorotación consiste en la aplicación de un campo eléctrico rotante sobre una dispersión de micropartículas inmersas en una solución electrolítica acuosa. El campo eléctrico rotante es debido a cuatro electrodos dispuestos simétricamente y alimentados con corriente alterna desfasados  $90^\circ$ . En estas condiciones se distinguen cuatro efectos relevantes: el primero consiste en que el campo eléctrico induce un dipolo eléctrico en la micropartícula dando origen a un par eléctrico aplicado sobre ella, el segundo efecto consiste en que alrededor de la micropartícula se creó una doble capa eléctrica, ésta es actuada por el campo eléctrico y da origen a un flujo electroósmotico alrededor de la partícula que a su vez aplica un par llamado electroósmotico sobre la micropartícula. El tercer efecto, consiste en el movimiento browniano que experimenta de su alrededor la micropartícula. Finalmente, el cuarto efecto que se debe considerar es la influencia de las paredes del substrato donde está la suspensión de micropartículas confinada. En la electrorotación son consideradas micropartículas de materiales metálicos, semiconductores y dieléctricos. Se espera aplicar esta técnica para caracterizar bacterias, células y virus. En el presente trabajo de investigación estudiamos el fenómeno de electrorotación de una microesfera metálica inmersa en una solución electrolítica, tomando en cuenta únicamente los dos primeros efectos mencionados anteriormente.

## Objetivos

Los objetivos de este trabajo de tesis fueron los siguientes:

### Objetivo General

Estudiar teóricamente y por simulación computacional la electrorotación de una esfera inmersa en una solución electrolítica.

### Objetivos Específicos

1. Construir un modelo teórico de la electrorotación de la microesfera, con el cuál obtendremos una expresión que nos permita calcular su velocidad angular de rotación.
2. Realizar la simulación por computadora usando la técnica de elemento finito mediante el software computacional COMSOL *Multiphysics 5.4* para determinar la velocidad angular de rotación de la microesfera metálica.
3. Hacer un análisis comparativo de los resultados teóricos y de simulación.

Los objetivos anteriores todos fueron cumplidos de manera satisfactoria.

## Contenido de la Tesis

El presente trabajo de investigación se encuentra estructurado de la siguiente manera: en el capítulo 1 presentamos los conceptos básicos que se relacionan con nuestro problema de inves-

tigación, damos un breve panorama sobre el área de la Microfluídica; enseguida se describen los llamados fenómenos electrocinéticos, también revisamos las ecuaciones de conservación de la hidrodinámica, en particular la ecuación de Navier-Stokes; finalmente describimos la técnica de elemento finito que es la base del software comercial COMSOL Multiphysics, que empleamos para hacer nuestro estudio numérico. En el capítulo 2, presentamos el planteamiento del problema, formulamos el fenómeno de electrorotación y obtenemos expresiones analíticas para la velocidad angular de rotación, también describimos nuestra estrategia para obtener nuestros resultados numéricos. En el capítulo 3, presentamos los resultados para la velocidad angular de rotación de la micropartícula metálica, obtenidos de las expresiones analíticas y de la simulación numérica, hacemos un análisis comparativos entre ambos enfoques. Finalmente, presentamos una sección de conclusiones de los resultados obtenidos de nuestro estudio de la electrotación de una micropartícula metálica inmersa en una solución electrolítica acuosa.

# Capítulo 1

## Conceptos Básicos

En el este capítulo se exponen, de manera muy general, los elementos básicos relativos a la Electrocinética y Microfluídica. En la primera sección, hacemos una breve revisión histórica y mencionamos los diferentes sistemas en los que se trabaja el campo de la Microfluídica, esto con el objetivo de introducir algunos conceptos relevantes en este estudio. Enseguida, en la sección 2, revisamos de manera amplia los denominados fenómenos electrocinéticos, y damos una breve descripción teórica de ellos. Posteriormente, hacemos un análisis de las ecuaciones de Poisson y Navier- Stokes. Finalmente, se da una explicación teórica del método de elemento finito, esencial para nuestro trabajo de investigación.

### 1.1. Microfluídica

En esta sección realizamos una breve introducción al campo de la Microfluídica. En la primera subsección, revisamos los antecedentes históricos y damos un panorama general sobre su crecimiento y múltiples aplicaciones tecnológicas. Finalmente, describimos la física presente en esta área interdisciplinaria del conocimiento.

#### 1.1.1. Antecedentes Históricos

La creación de herramientas es el logro supremo que distingue a los seres humanos de los animales, lo anterior responde a las necesidades de adaptación y sobrevivencia que los primeros tuvieron que desarrollar para determinar su destino. La perfección de las herramientas más rudimentarias de caza aumentó nuestras posibilidades de éxito asegurando con ello la supremacía de nuestra especie por encima de las demás. Actualmente, estamos por conseguir un nuevo objetivo orientado hacia la construcción de herramientas que permitan resolver problemas a escalas de miniaturización. Esto podría iniciar la Cuarta Revolución Industrial debido a que la fabricación de materiales con propiedades extraordinarias aplicados a la solución de problemas presentes en la Biología, Química y por sobretodo la Biomedicina.

El primer salto hacia esta revolución lo dió el físico estadounidense Richard P. Feynman (1918-1988) en una conferencia impartida el 29 de Diciembre de 1959 durante la reunión anual de la American Physical Society celebrada en el Instituto Tecnológico de California (Caltech) con el título: **”There is Plenty of Room at the Bottom: An invitation to enter a new field of Physics”** donde pronunció:

*”Me gustaría describir un campo, en el cual poco se ha hecho, pero en el cual una cantidad enorme puede hacerse en principio. Este campo no es completamente el mismo como otros en que este no nos dirá mucho de la física fundamental sino que este 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*

## CAPÍTULO 1. CONCEPTOS BÁSICOS

### 1.1. MICROFLUÍDICA

*en situaciones complejas. Más aún, un punto que es más importante es que este podría tener una enorme número de aplicaciones ...”*

Posteriormente, se refiere a las escalas de campo por explorar micro-nanómetros

*” Cuántas veces cuando estamos trabajando en alguna cosa frustradamente 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 ácaro para que haga el esto. ¿Cuáles son las probabilidades de que una máquina pequeña se mueva? Ellas podrían ser o no ser útiles, pero seguramente sería divertido hacerlas”.*

Finalmente, llegó a la conclusión de que era posible fabricar máquinas a partir de átomos tomados de uno en uno, pero que las nuevas leyes de la Física harían difícil la creación de dichas máquinas, aunque no imposible. En años recientes, el desarrollo tecnológico ha permitido crear dispositivos de todo tipo para mejorar procesos mecánicos, electromecánicos y térmicos. En 1980 surgieron los Sistemas Microelectromecánicos, MEMS: microelectromechanical systems, que son dispositivos con una o más estructuras maquinadas fabricadas a microescala mediante procesos de tecnología de grabado (deposición, fotolitografía, micrograbado, microimpresión) que actúan como sensores para habilitar funciones dentro de un sistema más estructurado. En 1990 surgió una nueva disciplina: Microfluídica.

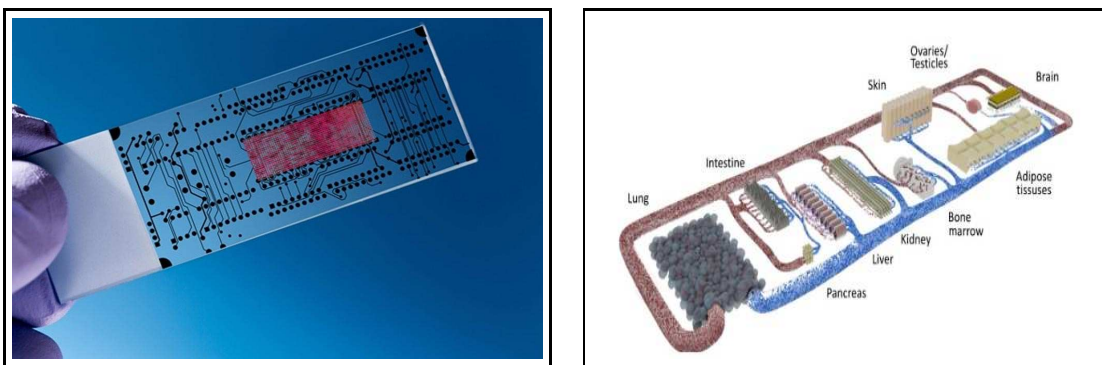


Figura 1.1: **Dispositivos Microfluídicos: Del Lab on a Chip al Human on a Chip.** La tecnología Lab on a Chip hace posible integrar gradualmente instrumentos de laboratorio en chips a escala de unos pocos centímetros o menos, sin sacrificar su rendimiento. Por otra parte, Human on a Chip ofrece nuevas maneras de análisis y procesamiento de células y partículas en microsistemas que simulan al cuerpo humano

La Microfluídica es la ciencia y tecnología que utiliza sistemas que procesan o manipulan cantidades pequeñas de fluidos ( $10^{-9}$  a  $10^{-18}$  Lt.) mediante canales cuyo tamaño está entre decenas y cientos de micras ( $0.1$  a  $300 \mu$ ) [8]. Sus orígenes están vinculados con el desarrollo de sistemas para el análisis molecular como medida para desarrollar sistemas fiables de detección ante posibles ataques biológicos, ver figura 1.1. La interdisciplinariedad de esta área relacionada con la Biología, Física, Química e Ingeniería y recientemente la Nanotecnología ha permitido el desarrollo de aplicaciones que hacen uso de las *Leyes de Scaling* para nuevos efectos y funcionamiento, como las celdas de combustible microfluídicas. Otras se benefician con los pequeños volúmenes requeridos, como es el caso de los sistemas de ensayo biológico portátiles (point of care) o masivamente paralelos (high through put screening). Esta es la denominada tecnología lab on a chip (laboratorio en chip) que promete soluciones de alto rendimiento y análisis altamente específico para aplicaciones en la industria farmacéutica, energética, aeroespacial, etc, bajo un esquema de consumo mínimo de espacio y reactivos. Una aplicación más de la Microfluídica abarca el área de la Microrobótica, donde se busca crear robots controlados únicamente por microfluidos, en ella se han logrado grandes avances, ver figura 1.2.

Una ventaja importante respecto de los MEMS que utilizan piezas mecánicas para su fun-

cionamiento, es que estos sufren desgaste, mientras que en los microfluidos la sustancia que actúa no posee esta carencia.

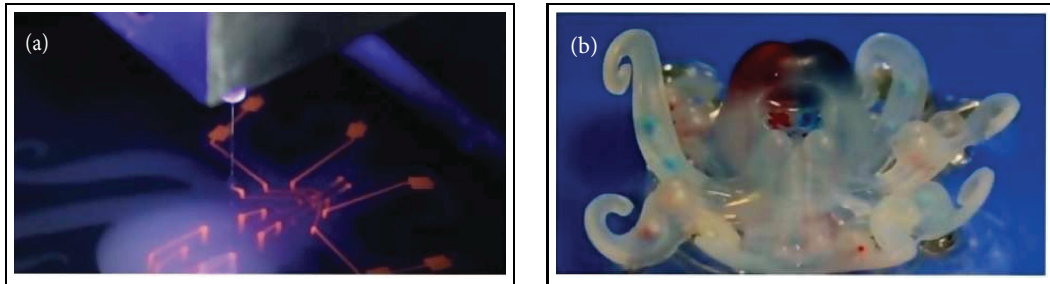


Figura 1.2: **Revolución Científica y Tecnológica: Octobot.** En 2016, el Departamento de Electrónica de la Universidad de Harvard, liderado por el Dr. Robert J. Wood y la Dra. Jennifer A. Lewis, creó el primer robot flexible controlado por microfluidos completamente autónomo. De izquierda a derecha: (a) Fabricación mediante impresión 3D; (b) Dispositivo terminado.

El mercado de la Microfluídica está siendo testigo de un gran crecimiento debido al aumento de la participación de fondos para la investigación en Biotecnología y Farmacéutica. A nivel mundial, se proyecta un crecimiento en mercado de 3.1 mil millones de dólares en 2015 a 7.5 mil millones de dólares para el año 2021, concentrándose principalmente en centros de investigación y desarrollo tecnológico de Estados Unidos (Nanogen, Caliper Technologies Inc. y Mountain View ubicados en California), Canadá y Europa.

### 1.1.2. Conceptos Físicos de la Microfluídica

El término microfluido se refiere, en general, a situaciones en las cuales la escala de tamaños pequeños provoca cambios en algún comportamiento del fluido del cual se puede obtener nuevos efectos y mejor funcionamiento. Los flujos de microescala son típicamente laminares debido a que se tienen conductos y canales de dimensiones que contienen alrededor de  $10^{12}$  átomos, un número suficientemente grande para despreciar la identidad de los átomos, haciendo válida la hipótesis del medio continuo. Como consecuencia de lo anterior, se tiene que el número de Reynolds es típicamente bajo, esto es lo que se denomina *Regla del Número de Reynolds para Microfluidos* y se expresa,

$$Re \sim l^2, \quad (1.1)$$

donde  $l$  es la longitud característica del recipiente que contiene al microfluido.

**Números Adimensionales.** Son parámetros que caracterizan determinadas propiedades para algunos sistemas. En Mecánica de Fluidos su uso adquiere importancia debido a que permiten tener una visión más detallada al estudiar los distintos fenómenos involucrados en su comportamiento. A continuación se describe una serie de números importantes en el campo de los microfluidos:

1. **Número de Reynolds.** En 1883, Osborne Reynolds (1842-1912), matemático irlandés y profesor de la Universidad de Mánchester, publicó un artículo titulado: "An Experimental Investigation of the Circumstances Which Determine Whether the Motion of Water in Parallel Channels Shall Be Direct or Sinuous and of the Law of Resistance in Parallel Channels". En el día a conocer su estudio experimental y teórico de la transición a la turbulencia en fluidos conducidos en el interior de tuberías. Fruto de estos experimentos vería la luz el llamado número de Reynolds que se define,

**CAPÍTULO 1. CONCEPTOS BÁSICOS**  
**1.2. FENÓMENOS ELECTROKINÉTICOS**

---

$$Re = \frac{v\rho d}{\eta}, \tag{1.2}$$

aquí  $v$  denota la velocidad del fluido,  $\rho$  la densidad y  $\eta$  la viscosidad dinámica. El significado físico de este número es la medida de la razón entre la fuerza inercial y la fuerza viscosa. Su régimen de comportamiento es el siguiente:

- a)  $Re \ll 1$ . Los efectos viscosos dominan a los efectos gravitacionales (microfluidos).
- b)  $Re \simeq 1$ . Los efectos viscosos son comparables con los efectos gravitacionales.
- c)  $Re \gg 1$ . Los efectos gravitacionales dominan a los efectos viscosos.

2. **Número de Knudsen.** Hacia 1913, el físico danés Martin Knudsen (1871-1949) se encontraba estudiando el flujo de gases en capilares y descubrió la transición al flujo molecular libre. En ella, las moléculas de los gases tienen un recorrido libre medio considerablemente superior al de los líquidos. Se define

$$K_n = \frac{\lambda}{l}, \tag{1.3}$$

aquí  $\lambda$  es el recorrido libre medio y  $l$  es la longitud geométrica característica. El significado físico de este número permite catalogar los flujos y con ello determinar el cambio de comportamiento de la sustancia, del continuo al molecular. Su régimen de comportamiento es el siguiente:

- a)  $K_n \leq 10^{-3}$  Condiciones de no deslizamiento en la frontera y ecuaciones de Navier-Stokes.
- b)  $10^{-3} \leq K_n \leq 10^{-1}$  Condiciones de deslizamiento en la frontera y ecuaciones de Navier-Stokes.
- c)  $10^{-1} \leq K_n \leq 10$  Régimen de flujo traslacional.
- d)  $K_n \geq 10$  Flujo molecular libre.

Finalmente, mostraremos los parámetros típicos que están presentes en los fenómenos electrocinéticos en microfluidos, ver tabla 1.1 .

Parámetro	Símbolo	Rango	Unidad
Grosor típico del canal	$h$	0.01 ~ 300	$\mu m$
Concentración del electrolito	$n_0$	0.001 ~ 10	Núm. de Moles
Longitud de Debye	$\kappa^{-1}$	1 ~ 100	$nm$
Campo eléctrico	$E_0$	1 ~ 100	$V/mm$
Potencial zeta	$\zeta$	1 ~ 100	$mV$
Velocidad electroosmótica	$U$	2	$mm/s$

Tabla 1.1: **Parámetros físicos y electroquímicos empleados en la Microfluídica.**

## 1.2. Fenómenos Electrocinéticos

La Electrocinética es la ciencia que involucra el estudio de partículas suspendidas moviéndose en fluidos cargados o polarizables debido a la aplicación de campos eléctricos externos. Las partículas pueden ser sólidas, líquidas o de gas con tamaños en el dominio de longitud de una fracción de

micrómetro o hasta varios cientos de nanómetros. En estas escalas es importante considerar los efectos de la doble capa interfacial de cargas donde la influencia de una fuerza externa sobre la capa difusa genera el movimiento tangencial de un fluido con respecto a una superficie cargada adyacente. Esta fuerza puede ser eléctrica, gradiente de presión, gradiente de concentración o gravedad. Además, la fase móvil puede ser fluida continua o fase dispersa. En general, la electrocinética se podría definir el estudio del movimiento relativo entre dos fases cargadas.

La física presente en esta área está basada en las propiedades de impedancia de partículas. No obstante, los efectos electrocinéticos son consecuencia de la interacción entre un campo eléctrico incidente y el momento dipolar inducido en estos objetos [1]. En las últimas décadas, el descubrimiento de técnicas basadas en fenómenos electrocinéticos ha permitido el desarrollo de dispositivos más eficientes para el transporte, separación y manipulación de partículas. En las siguientes subsecciones se presentan los más importantes.

### 1.2.1. Dielectroforésis

En 1951 Hebert A. Pohl (1916-1986), químico estadounidense, realizó experimentos con partículas plásticas suspendidas en líquidos dieléctricos y observó que al aplicarles un campo eléctrico no uniforme se generaba un desplazamiento. Él decidió nombrar a este fenómeno Dielectroforésis (DEP por sus siglas en inglés). En la actualidad, se ha utilizado para analizar espectros de frecuencia de bacterias y comportamiento de células. Su aplicación a materiales biológicos permite analizar fenómenos de oscilación eléctrica natural, rotación y resonancia de espín celular; además ha permitido la creación de dispositivos lab on a chip para el diagnóstico médico.

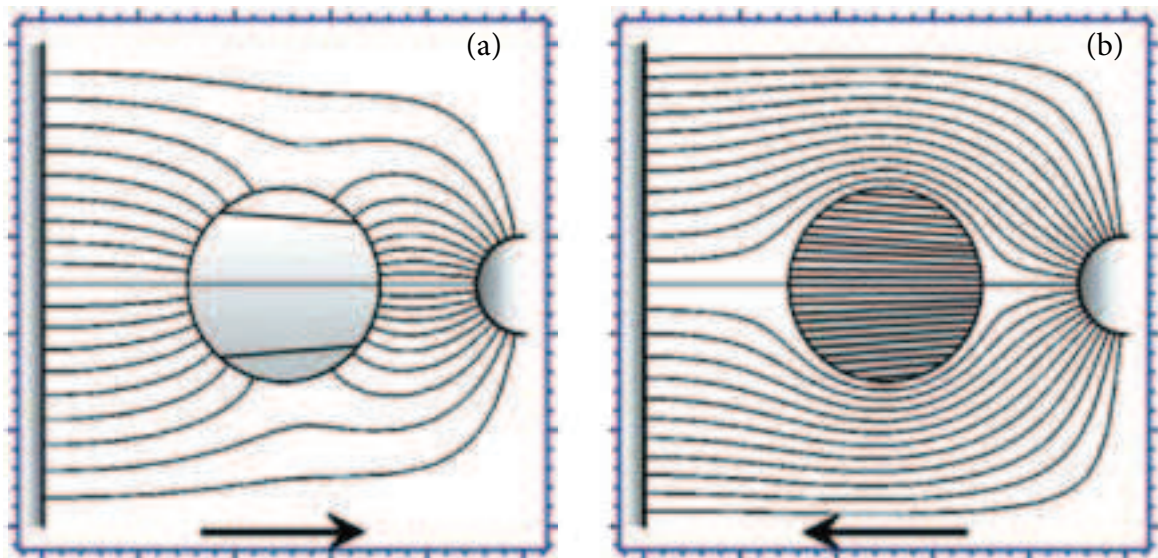


Figura 1.3: **Principio de Dielectroforésis.** En este diagrama se aprecian las líneas de campo eléctrico para una partícula en un campo eléctrico no uniforme. De izquierda a derecha: **(a) Dielectroforésis Positiva.** Partícula es más polarizable que el medio. **(b) Dielectroforésis Negativa.** Partícula es menos polarizable que el medio. Las flechas indican la dirección de la fuerza y movimiento en cada caso.

La Dielectroforésis consiste en la *manipulación de partículas dieléctricas debido a su interacción con un campo eléctrico no uniforme y el dipolo eléctrico inducido en ella.* Cuando aplicamos el campo eléctrico, las cargas positiva y negativa se orientan en direcciones contrarias, lo que da lugar a un momento dipolar efectivo o inducido a través de la partícula. Éste movimiento puede ser dirigido hacia o desde el máximo del campo eléctrico, dependiendo de las propiedades eléctricas

**CAPÍTULO 1. CONCEPTOS BÁSICOS**  
**1.2. FENÓMENOS ELECTROKINÉTICOS**

---

de las partículas y el medio. La aparición de una fuerza debida al gradiente de campo eléctrico. Esta fuerza es denominada *fuerza dielectroforética*

$$\mathbf{F}_{DEP} = (\mathbf{p} \cdot \nabla)\mathbf{E} \quad (1.4)$$

donde  $\mathbf{p}$  es el dipolo inducido en la partícula,  $\cdot$  es el operador producto interno,  $\nabla$  es el operador vectorial gradiente aplicado al campo eléctrico  $\mathbf{E}$ . Existen dos posibles polaridades de Dielectroforesis, es decir una misma partícula puede experimentar una Dielectroforesis positiva si la polarización de la partícula es más grande que la del medio en la que se encuentra suspendida, entonces se tiene un dipolo inducido paralelo al campo eléctrico atrayendo a la partícula, teniendo así una Dielectroforesis positiva. Si se da el caso en que la polarización de la partícula es más pequeña que la del medio, el dipolo inducido es antiparalelo al campo eléctrico y la partícula es repelida por el campo obteniendo una Dielectroforesis negativa, ver figura 1.3.

### 1.2.2. Electroósmosis

En 1808 el profesor de la Universidad de Moscú Ferdinand Friedrich von Reuss (1778-1852) publicó un artículo titulado: *"Sur un novel effect de lé electricité galvanique"* en Proceedings of the Imperial Society of Naturalist of Moscow. En este trabajo, demostró que el agua puede percolar a través de un medio poroso mediante la aplicación de un campo eléctrico. Se decidió nombrar a este fenómeno como Electroósmosis, también llamado flujo electrosmótico (EOF por sus siglas en inglés). Actualmente esta técnica es empleada en ingeniería civil para drenar medios porosos, limpiar contaminantes de suelos y desalinizar agua salada.

El fenómeno de Electroósmosis se origina cuando se aplica un campo eléctrico externo paralelo a una superficie cargada estacionaria, el exceso de contraiones dentro de la doble capa eléctrica de la superficie cargada migran hacia el electrodo cargado opuestamente, arrastrando un flujo viscoso con ello. El flujo inducido que surge de la interacción electrostática entre la carga neta dentro de la doble capa eléctrica y el campo eléctrico aplicado es denominado flujo electrosmótico, ver figura 1.4.

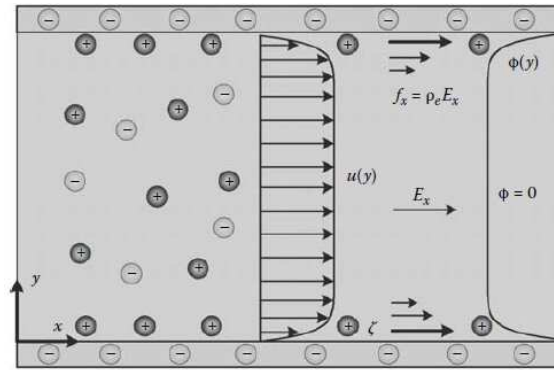


Figura 1.4: **Esquema del flujo electrosmótico en un canal con carga negativa uniforme.** En la figura se muestra el fenómeno de Electroósmosis debido al movimiento de un líquido ionizado relativo a una superficie cargada e inmóvil, mediante la aplicación de un campo eléctrico.

La *fuerza electrocinética* actuando sobre el líquido,

$$\mathbf{F} = \mathbf{E} \sum_{i=1}^n F z_i c_i = -\epsilon_0 \epsilon_f \nabla^2 \Phi \mathbf{E}, \quad (1.5)$$

donde  $\mathbf{E}$  campo eléctrico externo aplicado,  $F$  la constante de Faraday;  $z_i$  la valencia de  $i$ -ésima especie iónica,  $c_i$  la concentración molar de  $i$ -ésima especie iónica;  $\epsilon_0$  es la permitividad eléctrica en el vacío,  $\epsilon_f$  permitividad eléctrica del fluido y  $\Phi$  es el potencial eléctrico.

### 1.2.3. Electroforesis

El fenómeno de Electroforesis (EP por sus siglas en inglés) consiste en el movimiento de micropartículas cargadas suspendidas en soluciones acuosas sujetas a campos eléctricos externos. Fue descrito inicialmente por F. Reuss, quien observó el movimiento de partículas de arcilla a través de un lecho de arena de cuarzo, descubriendo que las partículas coloidales se cargan de manera natural. Este proceso se utiliza para la toma de huellas dactilares, análisis general de la composición de fluidos (separación de ADN, ARN, moléculas y proteínas con base en su tamaño y carga eléctrica) y caracterización de partículas, ver figura 1.5. Para el caso de separación de micropartículas el campo eléctrico aplicado es muy intenso, de manera que las componentes de la micropartícula cambian su movilidad y se produce la separación de las componentes.

Si el campo eléctrico aplicado no es muy intenso, la *velocidad electroforética*  $\mathbf{U}_p$  de la partícula depende linealmente de  $\mathbf{E}$  siendo  $\mu$  es la movilidad electroforética de la partícula

$$\mathbf{U}_p = \mu \mathbf{E}. \tag{1.6}$$

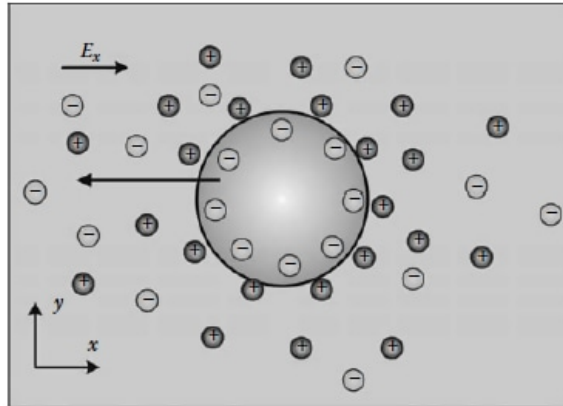


Figura 1.5: **Fenómeno de Electroforesis.** En la figura se aprecia una representación esquemática de una partícula cargada negativamente bajo la influencia de un campo eléctrico impuesto.

### 1.2.4. Electrorrotación

Hacia 1892 Riccardo Arnó (1866-1928), ingeniero eléctrico italiano, realizó una serie de experimentos en los que mostraba que partículas pequeñas podía hacerse girar situándolas en una región donde se aplicara un campo eléctrico rotante [1]. El término Electrorrotación se utilizó por primera vez en 1982 para describir un método para inducir la rotación controlada de una micropartícula someténdola a un campo eléctrico de corriente alterna giratorio [2]. Como herramienta de investigación, al ser una técnica no invasiva, permite obtener información sobre las características eléctricas (conductividad y permitividad) de partículas en suspensión. En el caso de células, se puede establecer su estado fisiológico y composición en tiempo real; además puede discriminar células individuales y usarse para caracterizar propiedades dieléctricas de sub-poblaciones con bajas concentraciones [3].

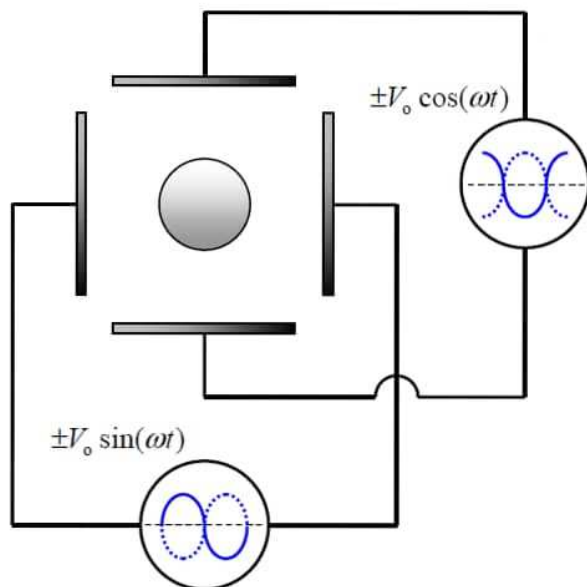


Figura 1.6: **Diagrama esquemático de un sistema de Electrorrotación.** Cuatro señales desfasadas  $90^\circ$  y alimentadas por un campo de corriente alterna se aplican a electrodos simétricamente dispuestos que rodean la partícula.

El fenómeno de Electrorrotación, ROT por sus siglas en inglés, ocurre cuando una partícula se expone a un campo eléctrico rotante. Este campo eléctrico externo induce un dipolo eléctrico, entonces la interacción del campo externo con el dipolo inducido se manifiesta en la aplicación de un par eléctrico que la hace rotar asincrónicamente con el campo. El torque rotacional ejercido en una partícula es,

$$\Gamma_e = \mathbf{p} \times \mathbf{E}, \quad (1.7)$$

donde  $\mathbf{p}$  es el dipolo inducido. En el caso de un campo eléctrico alterno, que en forma fasorial puede escribirse como actuando sobre un dipolo, debe considerarse el promedio temporal del par eléctrico. El promedio temporal del producto de dos funciones armónicas de la misma frecuencia se calcula,

$$\langle \Gamma_e \rangle = \frac{1}{2} \text{Re}[\tilde{\mathbf{p}} \times \tilde{\mathbf{E}}^*]. \quad (1.8)$$

Como consecuencia de la rotación de la microesfera y debido a la doble capa eléctrica en la microesfera (superficie), esta doble capa eléctrica también siente el campo eléctrico aplicado y se mueve provocando un flujo sobre la superficie, este flujo aplica también un par sobre la microesfera, esta contribución es llamada ICEO, Induce Charge Electro-osmosis. El par eléctrico hace que la microesfera rote en contra del campo aplicado y el par ICEO hace que la microesfera rote a favor del campo aplicado. La respuesta de la partícula, en términos de la dirección y velocidad de giro, dependerá tanto de las propiedades del medio y de la partícula como de la frecuencia y magnitud del campo eléctrico aplicado. La figura 1.6 muestra una representación esquemática de Electrorrotación en un sistema de cuatro electrodos simétricamente dispuestos que rodean la partícula.

Los espectros de Electrorrotación se obtienen graficando la velocidad y el sentido de rotación originados por el torque inducido por el campo, como función de la frecuencia del voltaje aplicado.

### 1.3. Materiales

El desarrollo y evolución de las sociedades ha estado íntimamente ligado a la capacidad de sus miembros para producir y conformar materiales necesarios para satisfacer sus necesidades [12]. En efecto, desde tiempos inmemoriales, el hombre se dió cuenta que después de frotar con un paño un tipo de resina llamada ámbar, ésta adquiría la capacidad de atraer algunos objetos ligeros, como trozos de papel. La historia registra al filósofo griego Tales de Mileto (624 A.C. - 546 A.C.), como el primero que realizó experimentos de esta naturaleza. En griego, ámbar se dice *elektron* y de esta palabra se deriva electricidad. Durante siglos, esto fue simplemente mera curiosidad.

Hacia principios del Siglo XVIII se inició la investigación detallada de los fenómenos eléctricos. Entre 1729 y 1736, los científicos ingleses Stephen Gray (1666-1736) y Jean Desaguliers (1683-1744) realizaron una serie de experimentos donde aparecía lo que llamaron una *virtud o fluido eléctrico*. Encontraron que la carga eléctrica podía moverse libremente a través de ciertos materiales que llamaron conductores (los metales, el cuerpo humano, el agua, el aire). También encontraron materiales que no conducen electricidad, a los que se llama aislantes. Sin embargo, existen materiales que bajo ciertas condiciones pueden conducir un poco la electricidad; éstos son los semiconductores.

#### 1.3.1. Densidad de Corriente

La corriente de conducción se produce en presencia de un campo eléctrico dentro de un conductor o sección transversal fija. La densidad de corriente viene dada por,

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}, \tag{1.9}$$

donde  $\sigma$  es la conductividad del material, sus unidades son siemens por metro (S/m). La relación  $\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$  se conoce a menudo como forma puntual de la Ley de Ohm. El factor  $\sigma$  tiene en cuenta la densidad de los electrones que se mueven libremente. Como es de esperarse,  $\sigma$  es función de la temperatura. A continuación, se presenta la clasificación de materiales función de su conductividad

Material	Portadores de Cargas	Intervalo de Conductividad
Conductor	Electrones	$10^{12} - 10^5$
Semiconductor	Electrones y Huecos	$10^5 - 10^9$
Aislante		$\geq 10^9$

Tabla 1.2: Materiales, portadores de cargas e intervalos de conductividad a temperatura ambiente.

#### 1.3.2. Conductores

Un conductor eléctrico es un material que ofrece poca resistencia al movimiento de la carga eléctrica debido a que los átomos que lo componen se caracterizan por tener *pocos electrones en su capa de valencia*. Su comportamiento está definido de la siguiente manera: *En condiciones estacionarias, el campo eléctrico y la densidad de carga dentro de un conductor son cero después de ser colocado en un campo eléctrico externo*. Es decir,

$$E = 0. \tag{1.10}$$

Un conductor ideal es aquel en el que los electrones se moverán en respuesta a cualquier campo eléctrico, por pequeño que este sea. Si consideramos un conductor aislado de forma arbitraria colocado en un campo eléctrico. Los electrones libres se acumularán sobre la superficie del conductor produciendo una *distribución de carga superficial*  $\sigma$  (no necesariamente uniforme). La intensidad

del campo eléctrico cerca de la superficie del conductor es igual a la densidad de carga eléctrica de la superficie dividida por  $\epsilon_0$ ,

$$E = \frac{\sigma}{\epsilon_0}. \tag{1.11}$$

### 1.3.3. Semiconductores

El término semiconductor fue introducido en 1782 por el físico italiano Alessandro Volta (1745-1827). Hacia 1833, el físico inglés Michael Faraday (1791-1867) observó que la resistividad del Sulfuro de Plata ( $Ag_2S$ ) disminuía rápidamente a medida que aumentaba la temperatura; siendo esta la primera observación documentada de un material semiconductor. En 1931, el matemático británico Alan H. Wilson (1906-1995) formuló la **Teoría de Bandas de Energía**. En términos de esta teoría encontramos que, a nivel atómico, se presentan *transiciones electrónicas que se producen entre las bandas de valencia y conducción*. No obstante, existe una *brecha de energía*, también denominada región prohibida, que separa ambas y en las cuáles no pueden residir electrones. Al excitar un electrón, éste pasa de la banda de valencia a la de conducción lo que permite producir una corriente eléctrica. Basándonos en su naturaleza existen 2 tipos de semiconductores:

- **Semiconductores intrínsecos.** Son aquellos que poseen una conductividad eléctrica fácilmente controlable y, al combinarlos de forma correcta, pueden actuar como interruptores o dispositivos de almacenamiento.
- **Semiconductores extrínsecos.** Se forman al agregar a un semiconductor intrínseco sustancias dopantes o impurezas, su conductividad dependerá de las concentración de estos átomos dopantes.

Dependiendo de esas impurezas existirán dos tipos:

- **Semiconductores tipo n.** En las redes de Silicio o Germanio se introducen elementos del *Grupo 15*.
- **Semiconductores tipo p.** En este caso se introducen elementos del *Grupo 13*, por lo que se comportan como aceptadores o captadores de electrones.

Actualmente, la industria de los semiconductores posibilita la fabricación de los circuitos clave en el desarrollo tecnológico en las últimas décadas, desde los transistores y circuitos integrados, hasta las celdas solares y dispositivos más complejos. Además debido a su resistencia no disipan demasiado calor.

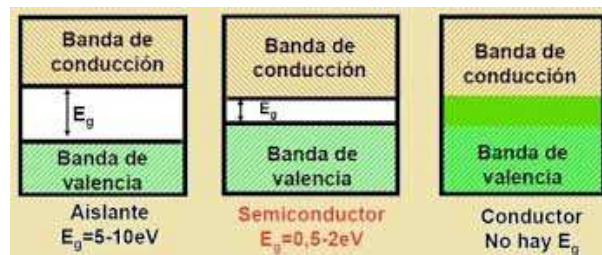


Figura 1.7: Estructura de bandas de energía en diferentes materiales a una temperatura de  $0^\circ \text{K}$ . De izquierda a derecha en la imagen: El aislante tiene una gran brecha de energía. El semiconductor tiene solamente una pequeña brecha de energía. Por último, el conductor no presenta una brecha de energía entre las bandas de valencia y conducción.

### 1.3.4. Dieléctricos

El término Dieléctrico, proviene del griego  $\delta\iota\alpha$  que significa *a través de*, fue acuñado por el físico inglés William Whewell (1794-1866). Un Dieléctrico es un aislante que tiene la propiedad de formar dipolos microscópicos debido a la acción de un campo eléctrico externo. Sus cargas se encuentran ligadas y no pueden moverse como lo hacen los conductores. Los dieléctricos ideales no tienen cargas libres en su interior.

### 1.3.5. Fenómeno de Polarización

La propiedad más importante que exhibe la materia es estar conformada por átomos, que aún siendo eléctricamente neutros, están compuestos por un núcleo que tiene carga positiva y una nube de electrones con carga negativa. En presencia de un campo eléctrico, el núcleo y la nube electrónica se ven influenciados y tienden a tener un desplazamiento. El núcleo sentirá una fuerza de atracción en la dirección del campo eléctrico, mientras que la nube electrónica sentirá una fuerza en la dirección opuesta. Si el campo eléctrico es lo suficientemente fuerte, ambas partes pueden separarse y se dice que el átomo ha sido ionizado. Sin embargo, si el campo es débil, se alcanza un estado de equilibrio en el que el núcleo queda un poco desplazado con respecto al centro de la nube electrónica, entonces se induce un dipolo en el átomo. En general, el momento dipolar es proporcional al campo eléctrico,

$$\mathbf{p} = \alpha \mathbf{E}, \quad (1.12)$$

donde  $\mathbf{p}$  es el momento dipolar (medida de separación entre cargas positivas y negativas) y  $\alpha$  es la constante de polarizabilidad atómica, cuyo valor depende de las características del átomo en cuestión.

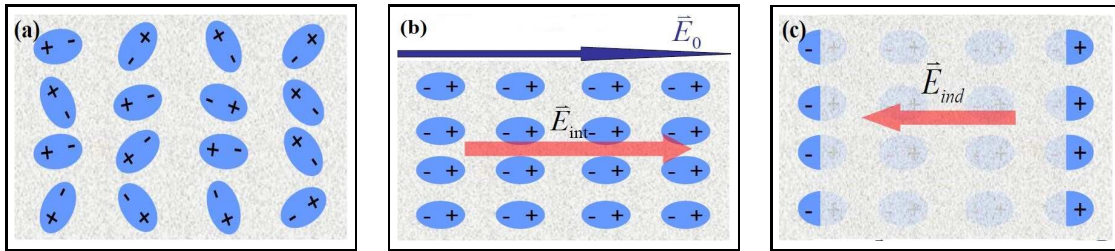


Figura 1.8: **Fenómeno de Polarización.** En la figura se aprecia: (a) Configuración de dipolos en un material dieléctrico. (b) Cuando un dieléctrico se polariza, el momento dipolar de las moléculas en el dieléctrico se alinea parcialmente con el campo eléctrico aplicado. (c) Esta polarización induce una carga negativa sobre la superficie en una de los lados del dieléctrico y una carga positiva en el lado opuesto.

Si consideramos un material dieléctrico inmerso en un campo eléctrico  $\mathbf{E}$ , se dice que el material está polarizado si el momento dipolar promedio de los átomos que la componen es distinto de cero. Esta polarización es proporcional al campo según la siguiente ecuación,

$$\mathbf{P} = \epsilon_0 \chi_e \mathbf{E}, \quad (1.13)$$

donde  $\mathbf{P}$  es el vector de polarización (medida de la polarización macroscópica),  $\epsilon_0$  es la permitividad eléctrica del vacío y  $\chi_e$  es la susceptibilidad eléctrica del material, que es una cantidad adimensional que depende del material que se polariza y la frecuencia del campo eléctrico con el que este se excita. Para la mayoría de las sustancias, esta cantidad es positiva.

## 1.4. La Doble Capa Eléctrica

Las superficies sólidas tienden a ganar cargas superficiales cuando se ponen en contacto con soluciones iónicas acuosas. Esto a su vez da lugar a una distribución volumétrica de carga alrededor de la interfase sólido-líquido originando así la estructura denominada Doble Capa Eléctrica, DCE (o EDL, acrónimo del inglés Electric Double Layer). Su estudio se remonta hacia el año 1879, cuando el físico alemán Hermann von Helmholtz (1821-1894) propuso un modelo para describir el fenómeno de distribución de especies iónicas alrededor de un electrodo. Entre los años 1910 y 1913 el físico francés Louis Georges Gouy (1854-1926) de manera independiente, pero simultánea con el físico-químico inglés David Leonard Chapman (1869-1959) propusieron mejoras significativas. Finalmente, en 1924, el físico alemán Otto Stern (1888-1969) formuló la teoría general de este fenómeno.

Nuestro estudio se centrará en considerar una superficie metálica cargada e inmersa en un electrolito. Si consideramos que la superficie se encuentra cargada negativamente, la interacción electrostática atraerá iones positivos y repelerá los iones negativos. Esto se traduce en la aparición de una distribución de cargas en el electrolito que apantalla el campo eléctrico creado por la carga del metal. A esta distribución de carga en la interfase metal-electrolito se le denomina capa doble. Esta consta de dos componentes: *Capa de Stern-Helmholtz (capa interna o compacta)* y *Capa de Gouy-Chapman (capa difusa)*.

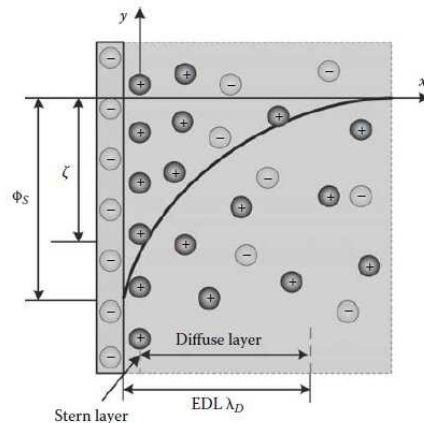


Figura 1.9: **Representación Esquemática de la Doble Capa Eléctrica (EDL).** En este diagrama la superficie sólida se encuentra cargada negativamente. Aquí  $\Phi_S$  es el potencial eléctrico en la superficie,  $\zeta$  es el potencial zeta. La longitud de Debye y el espesor de la EDL están representados por  $\lambda_D$  y EDL, respectivamente.

Existe una competencia entre la energía electrostática, que mueve a los iones en una dirección definida, alejándolos o acercándolos a la superficie metálica, y la energía térmica, que tiende a difundirlos en todas las direcciones. Esta competencia determina la distribución de la carga en la capa doble. Conforme los iones del electrolito neutralizan la carga de la superficie metálica, la intensidad del campo eléctrico disminuye. Cuando el campo disminuye, la fuerza con la que los iones son atraídos o repelidos por la superficie cargada también se reduce y la agitación térmica va ganando peso en la competencia, lo que se traduce en una disminución de la concentración de iones positivos y un aumento en el número de iones negativos. Cuando nos alejamos lo suficiente del metal, el campo eléctrico está totalmente apantallado y la densidad de carga es cero.

Los iones dentro de la capa de Stern son inmovilizados debido a la fuerza electrostática; los iones dentro de la capa difusa se pueden mover libremente. Si queremos conocer el potencial eléctrico dentro del electrolito, debemos considerar que la carga neta dentro de la capa difusa obedece la

ecuación de Poisson

$$\nabla^2 \Phi = -\frac{1}{\epsilon_0 \epsilon_f} \sum_{i=1}^n F z_i c_i \quad (1.14)$$

donde  $\epsilon_0$  es la permitividad eléctrica en el vacío,  $\epsilon_f$  permitividad eléctrica del fluido;  $\Phi$  es el potencial eléctrico;  $F$  la constante de Faraday;  $z_i$  la valencia de  $i$ -ésima especie iónica y  $c_i$  la concentración molar de  $i$ -ésima especie iónica. El flujo iónico, incluyendo la difusión, electromigración y la densidad de flujo convectivo, es escrito como

$$N_i = -D_i \nabla c_i - z_i \frac{D_i}{RT} F c_i \nabla \Phi + u c_i. \quad (1.15)$$

En ausencia de movimiento en el fluido y en estado estacionario, el flujo iónico satisface la ecuación de Poisson-Nerst-Plank simplificada

$$\nabla \cdot N_i = \nabla \cdot \left( -D_i \nabla c_i - z_i \frac{D_i}{RT} F c_i \nabla \Phi \right) = 0 \quad (1.16)$$

en esta ecuación,  $D_i$  es la difusión de  $i$ -ésima especie iónica;  $R$  es la constante universal de los gases y  $T$  es la temperatura absoluta de la solución electrolítica. La solución analítica de la concentración iónica está dada por

$$c_i = c_{i0} \exp \left( -z_i \frac{F \Phi}{RT} \right) \quad (1.17)$$

$c_{i0}$  es la concentración en bulto de la  $i$ -ésima especie. La ecuación anterior es conocida como la ecuación de Poisson-Boltzmann, la cuál se obtiene asumiendo la simetría iónica,

$$\nabla^2 \left( \frac{z F \Phi}{RT} \right) = \frac{1}{\lambda_D^2} \sinh \left( \frac{z F \Phi}{RT} \right) \quad (1.18)$$

donde  $\lambda_D$  es la longitud de la doble capa, ver figura (1.9), que físicamente nos indica que el campo externo producido por la pared cargada ha sido apantallado alrededor de un 70 %, y esta dada por

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0 \epsilon_f RT}{\sum_{i=1}^2 F^2 z_i^2 c_{i0}}}. \quad (1.19)$$

## 1.5. Campos Alternos y Fasores

Los *números complejos*  $z$  son números de la forma

$$z = x + iy \quad (1.20)$$

donde  $x$  y  $y$  son números reales e  $i$  denominado *unidad imaginaria*, tiene la propiedad  $i = \sqrt{-1}$ . Si  $z = x + iy$ , entonces  $x$  es llamada *parte real* de  $z$ , y  $b$ , *parte imaginaria* de  $z$ , y se les denota  $\Re(z)$  e  $\Im(z)$ , respectivamente. Cuando se utiliza a efectos de representar geoméricamente, este número puede pensarse como el segmento dirigido, o vector, que va desde el origen hasta el punto  $(x, y)$ , el plano  $xy$  se llama *plano*  $z$  o *diagrama de Argand*. El eje  $x$  se llama *eje real* y el eje  $y$  se llama *eje imaginario*.

Si escribimos un número complejo, no nulo, en forma polar

$$z = A(\cos \phi + i \sen \phi) \quad (1.21)$$

la fórmula de Euler permite expresar  $z$  en *forma exponencial*

$$z = A e^{i\phi} \quad (1.22)$$

entonces, la identidad de Euler se puede representar en el siguiente diagrama fasorial giratorio en el plano complejo.

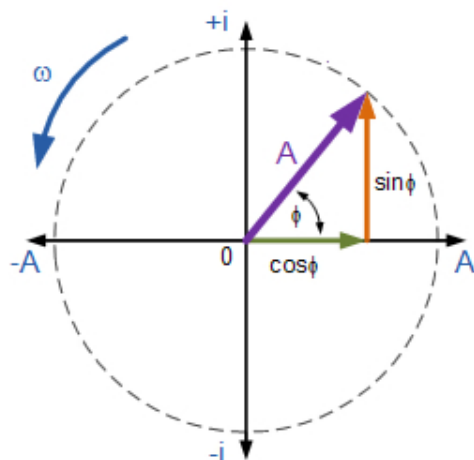


Figura 1.10: **Representación fasorial.** Un fasor es un vector que tiene una punta de flecha en un extremo que significa el valor máximo de la cantidad del vector y en la parte final del vector que gira.

Un fasor es la representación gráfica de un número complejo que se utiliza para representar la amplitud y fase de una función armónica, es decir, una oscilación. de forma que el fasor suma de varios fasores puede representar la magnitud y fase de la oscilación resultante de la superposición de varias oscilaciones.

Para nuestro estudio de Electrorrotación, los cuatro electrodos que generan el campo eléctrico rotatorio son alimentados por medio de corriente alterna, es una función armónica del tiempo de la forma

$$I(t) = I_m \cos(\omega t + \phi) \quad (1.23)$$

donde  $I(t)$  es la magnitud de la corriente eléctrica;  $I_m$  es la amplitud  $\omega$  es la frecuencia angular y  $\phi$  es el ángulo de fase. Esto trae como consecuencia que cualquier cantidad física de nuestro sistema podemos escribirla en la forma fasorial siguiente

$$\mathbf{\Gamma}(\mathbf{r}, t) = \Re[\tilde{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{r})e^{i\omega t}] \quad (1.24)$$

donde  $\tilde{\mathbf{\Gamma}}(\mathbf{r})$  es una función que depende solo de la coordenada espacial, que tiene parte real e imaginaria, y posiblemente depende de  $\omega$ . En los cálculos es conveniente utilizar la ecuación anterior sin la notación  $\Re$  y al final de los cálculos tomar únicamente la parte real.

## 1.6. La Ecuación de Poisson

Hacia 1813, el físico francés Siméon Denis Poisson (1781-1840) publicó una memoria titulada: "On the Distribution of Electricity at the Surface of Conducting Bodies" en el Boletín de la Société Philomatique de París. En este trabajo, estableció una ecuación diferencial parcial elíptica de segundo orden

$$\nabla^2 \Phi = f(x, y, z); \quad (1.25)$$

que describe, por lo general, distintos procesos estacionarios de distinta naturaleza física (oscilaciones, conducción de calor, difusión, etc.). En teoría electromagnética, la función  $\Phi(x, y, z)$  representa el potencial eléctrico en una región con su respectiva fuente denotada por  $f(x, y, z)$ . Esta ecuación es llamada *ecuación de Poisson*

$$\nabla^2\Phi = -\frac{\rho(\mathbf{r})}{\epsilon_0}, \quad (1.26)$$

donde  $\rho$  denota la densidad de carga volumétrica en el cuerpo y  $\epsilon_0$  es la permitividad eléctrica en el vacío. Si  $\rho = 0$ , lo que indica que una densidad de carga volumétrica cero, pero se permite que existan cargas puntuales, densidad de carga lineal y densidad de carga superficial como fuentes de campo localizadas en lugares bien definidos, entonces se reduce a la *ecuación de Laplace*

$$\nabla^2\Phi = 0 \quad (1.27)$$

donde  $\nabla^2$  denota el operador de Laplace, también conocido como *Laplaciano*.

En coordenadas cartesianas  $(x, y, z)$ , la ecuación de Laplace es

$$\nabla^2\Phi = \frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Phi}{\partial z^2} = 0 \quad (1.28)$$

la forma de  $\nabla^2\Phi$  en coordenadas cilíndricas y esféricas puede obtenerse mediante las expresiones para el gradiente y la divergencia, obtenidas para dichos sistemas de coordenadas. La ecuación de Laplace en coordenadas cilíndricas  $(r, \theta, z)$  es

$$\nabla^2\Phi = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial\Phi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial\Phi}{\partial\theta^2} \right) + \frac{\partial^2\Phi}{\partial z^2} = 0 \quad (1.29)$$

si la función buscada  $\Phi$  no depende de  $z$ , la ecuación anterior se simplifica

$$\nabla^2\Phi = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial\Phi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial\Phi}{\partial\theta^2} \right) = 0 \quad (1.30)$$

finalmente, la ecuación de Laplace en coordenadas esféricas  $(r, \theta, \phi)$  es

$$\nabla^2\Phi = \frac{1}{r^2 \sin\theta} \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \sin\theta \frac{\partial\Phi}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial\Phi}{\partial\theta} \right) + \frac{\partial}{\partial\phi} \left( \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial\Phi}{\partial\phi} \right) \right] = 0 \quad (1.31)$$

o, en definitiva,

$$\nabla^2\Phi = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial\Phi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial\Phi}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2} = 0. \quad (1.32)$$

La ecuación de Poisson debe resolverse sujeta a las siguientes *condiciones de frontera*

$$(\epsilon_2 \mathbf{E}_2 - \epsilon_1 \mathbf{E}_1) \cdot \mathbf{n} = \sigma, \quad (1.33)$$

$$(\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_1) \times \mathbf{n} = 0. \quad (1.34)$$

## 1.7. Las Ecuaciones de Navier-Stokes

La Dinámica de Fluidos es la disciplina de la Física que estudia el movimiento de los fluidos así como las fuerzas que lo originan. Un fluido es una sustancia que se deforma continuamente cuando actúan sobre él esfuerzos cortantes de cualquier magnitud. Para estudiar su comportamiento se recurre a la hipótesis del medio continuo. En este contexto, para deducir las ecuaciones que describen su evolución, se supone que en cada punto se tiene un valor único para las *variables de campo*

**CAPÍTULO 1. CONCEPTOS BÁSICOS**  
**1.7. LAS ECUACIONES DE NAVIER-STOKES**

---

$v_1(x, y, z, t)$ ,  $v_2(x, y, z, t)$ ,  $v_3(x, y, z, t)$ ; que son las componentes del campo de velocidad  $\mathbf{v}$ , y la densidad  $\rho(x, y, z, t)$  que varían continuamente en la posición  $(x, y, z)$  y tiempo  $t$ . La *ecuación de continuidad* se obtiene al aplicar la ley de conservación de masa a un pequeño elemento de volumen estacionario con el flujo del fluido. En forma vectorial se expresa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (1.35)$$

en esta expresión, la derivada parcial  $\frac{\partial \rho}{\partial t}$  denota la razón de cambio de masa por unidad de tiempo en un volumen de control arbitrario, fijo en el espacio y tiempo. La cantidad  $\nabla \cdot (\rho \mathbf{v})$  es llamada *divergencia* de  $\rho \mathbf{v}$ . El flujo de masa a través de esta superficie esta dado por la expresión  $\nabla \cdot \rho \mathbf{v}$ . Para un fluido incompresible, se tiene  $\nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0$ .

La ecuación de *conservación de momento* resulta de aplicar la segunda ley de Newton a un volumen de fluido en movimiento. Las fuerzas que actúan sobre la masa de un fluido se clasifican: *fuerzas volumétricas* y *fuerzas superficiales*. Las primeras, dependen de la masa y se deben, principalmente a *fuerzas externas*. Por otra parte, las fuerzas superficiales se deben a *esfuerzos*. El movimiento de un fluido newtoniano (fluido con viscosidad constante), incompresible con viscosidad  $\mu$  y sujeto a la presión hidrostática  $p$  en un campo gravitacional uniforme con aceleración  $\mathbf{g}$  satisface la ecuación

$$\rho \left[ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right] = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{v} + \rho \mathbf{g} \quad (1.36)$$

conocida como *ecuación de Navier-Stokes* en honor del físico e ingeniero francés Claude-Louis Marie Navier (1785-1836) quién fue el primero en derivarla, pero el matemático británico Sir George Gabriel Stokes (1819-1903) explicó por primera vez la comprensión del mecanismo físico detrás del término viscoso. Una expresión más general de esta ecuación viene dada por

$$\rho \left[ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right] = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{v} + \left( \frac{\eta}{3} + \zeta \right) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{v}) + \mathbf{f} \quad (1.37)$$

en la expresión anterior,  $\eta$  es la viscosidad dinámica;  $\zeta$  es el coeficiente de fricción de bulo. En esta ecuación, el primer miembro denota al operador diferencial *derivada material u operador de Stokes*, que se define

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \quad (1.38)$$

el primer término del miembro derecho se refiere a la *derivada local* que mide la variación de alguna propiedad de algún punto en el espacio; el segundo término se denomina *derivada convectiva* que mide la variación de un escalar en un punto dado por efecto de un campo vectorial. Finalmente, la ecuación de Navier-Stokes quedará expresada

$$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{v} + \left( \frac{\eta}{3} + \zeta \right) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{v}) + \mathbf{f}. \quad (1.39)$$

Una forma particular de las ecuaciones de Navier-Stokes viene dada cuando se considera *fluido viscoso, incompresible y de flujo homogéneo*

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} - \eta \nabla^2 \mathbf{v} + \nabla p = \mathbf{f}, \quad (1.40)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0. \quad (1.41)$$

## 1.8. El Método de Elementos Finitos

Los fenómenos físicos pueden ser descritos mediante modelos matemáticos para los cuales, en algunos casos, es imposible encontrar soluciones analíticas. Cuando esto sucede, es necesario recurrir a métodos numéricos que nos permitan obtener una solución aproximada ciertas ecuaciones diferenciales que caracterizan el comportamiento físico del problema. Una de estas técnicas es conocida como: Método de Elemento Finito (MEF) o (FEM, acrónimo de su nombre en inglés "Finite Element Method"). Este método, apoyado por los creaciones de softwares especializados, nos permite resolver y modelar una cantidad infinita de procesos físicos de comportamiento complejo presentes en diversos campos de la ciencia e ingeniería.

Los fundamentos básicos del MEF tienen sus orígenes en el año de 1943 cuando Richard Courant (1888-1972), matemático alemán exiliado en Estados Unidos, publicó un artículo titulado: "*Variational Methods for the solution of Problems of Equilibrium and Vibrations*" en el Boletín de la Sociedad Americana de Matemáticas. En este trabajo, realizó uso de la interpolación polinómica para obtener soluciones aproximadas a un sistema de vibración en dos dimensiones mediante la discretización del dominio espacial en elementos triangulares. Para el año 1967, el matemático británico Olgierd Cecil Zienkiewicz (1921-2009) publicó el libro titulado: "*The Finite Element Method in Structural and Continuum Mechanics*" que trata de manera profunda este método. En los siguientes párrafos se discute de manera condensada este método.

### 1.8.1. Fundamentos Matemáticos del Método de Elementos Finitos

El Método del Elemento Finito está basado en dos importantes conceptos:

- 1 Formulación de la ecuación diferencial parcial subyacente en términos de su denominada *forma débil*.
- 2 Aproximación de la variable dependiente en la forma débil usando una suma finita de funciones básicas

Es conveniente mostrar su metodología con un ejemplo sencillo, para ello consideremos el problema de difusión de una partícula en una dimensión, que es descrito mediante la siguiente ecuación diferencial,

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (1.42)$$

donde  $D$  es el coeficiente de difusión de las partículas,  $c = c(x, t)$  es la concentración de partículas en el punto  $x$  e instante  $t$  con  $x \in [0, 1]$ . Suponiendo que la solución de la expresión (1.42) está sujeta a las condiciones iniciales y de frontera siguientes,

$$\left\{ \begin{array}{l} c(x, 0) = c_0 \\ c(x = 0, t) = p(t) \\ D \partial c(x = 1, t) / \partial t = q(t) \end{array} \right. \quad (1.43)$$

El sistema de ecuaciones anteriores se denomina *forma fuerte* del problema en consideración.

A partir de la forma fuerte se obtiene la forma débil de nuestro problema, para esto se multiplica la expresión (1.42) por la función de prueba  $w(x)$ , integrando por partes e incorporando las condiciones iniciales y de frontera dadas por las ecuaciones (1.43), obtenemos

$$\frac{d}{dt} \int_0^1 c w dx + \int_0^1 D \frac{\partial c}{\partial x} \frac{dw}{dx} dx = q(t) w(1) \quad (1.44)$$

la expresión integro diferencial anterior es la forma débil.

Para resolver la ecuación 3.4 se aproxima la solución como una superposición de funciones de prueba, como sigue,

$$c(x, t) \approx \sum_{i=1}^N c_i(t)w_i(x) \quad (1.45)$$

donde  $w_i(x)$  es la  $i$ -ésima función base de prueba,  $c_i(t)$  es el  $i$ -ésimo coeficiente dependiente de tiempo, y  $N$  es el número total de funciones base. Las funciones base lineales que han mostrado ser muy útiles, están dadas por

$$w_i(x) = \begin{cases} \frac{x-x_{i-1}}{x_i-x_{i-1}} & x_{i-1} \leq x < x_i \\ \frac{x_{i+1}-x}{x_{i+1}-x_i} & x_i \leq x < x_{i+1} \\ 0 & x < x_{i-1} ; x \geq x_{i+1} \end{cases} \quad (1.46)$$

Ahora discretizando el intervalo  $x \in [0, 1]$  en nodos espaciados uniformemente de tamaño  $h$ , y también discretizando la expresión (3.4) y usando las ecuaciones (3.5) y (3.6), se llega a la siguiente ecuación matricial,

$$\begin{bmatrix} \frac{h}{3} & \frac{h}{6} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \frac{h}{6} & \frac{2h}{3} & \frac{h}{6} & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{h}{6} & \frac{2h}{3} & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \frac{2h}{3} & \frac{h}{6} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \frac{h}{6} & \frac{h}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{dc_1}{dt} \\ \vdots \\ \frac{dc_i}{dt} \\ \vdots \\ \frac{dc_N}{dt} \\ \frac{d\lambda}{dt} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{D}{h} & \frac{-D}{h} & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 \\ \frac{-D}{h} & \frac{2D}{h} & \frac{-D}{h} & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{-D}{h} & \frac{2D}{h} & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \frac{2D}{h} & \frac{-D}{h} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \frac{-D}{h} & \frac{D}{h} & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_i \\ \vdots \\ c_N \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ q \\ p \end{bmatrix} \quad (1.47)$$

la ecuación (1.47) es un sistema de  $N+1$  ecuaciones simultáneas que son resueltas para obtener la solución  $c(x, t)$ . Esto es lo que se denomina el Método de Elementos Finitos, que usa el software comercial COMSOL Multiphysics. A continuación se describen los pasos que se implementa este software.

### 1.8.2. Metodología General del Método del Elemento Finito

El análisis por elementos finitos está conformado por tres partes: *preprocesado*, *procesado* y *post-procesado*. En la presente sección se subrayan los aspectos a tener en cuenta a la hora de realizar la modelación de un fenómeno físico.

1. **Preprocesado.** El comportamiento de un fenómeno físico en un sistema depende de *geometría* o *dominio* del sistema, las *propiedades del material* o *medio* y las *condiciones de frontera*. Algunas veces, las condiciones de frontera pueden ser demasiado complicadas.

El procedimiento computacional consiste de los siguientes pasos:

- 1.1 *Modelado de la Geometría.* La modelación es el paso más crítico, porque representa la definición de las bases para el análisis posterior. Se deben considerar todas las variables que afectan de manera importante al modelo. Si se está trabajando con un software (como será el caso en la tercera parte de esta tesis) debe tenerse mucho cuidado con los datos que se están introduciendo, y estar seguros que el programa está interpretando adecuadamente lo que se le quiere decir.
- 1.2 *Mallado.* El proceso de discretización del dominio, también denominado Mallado, consiste en dividir el dominio en subdominios no intersectantes entre sí denominados *elementos finitos*. El conjunto de elementos finitos forma una partición del dominio, también denominada *discretización*. Dentro de cada elemento se distinguen una serie de puntos representativos llamados *nodos* y al conjunto de nodos considerando su adyacencia se le denomina *malla*. Existen diferentes tipos de elementos a usar para generar esta malla, por ejemplo, para problemas en una dimensión se utilizan elementos lineales; en dos dimensiones se utilizan elementos triangulares, rectangulares o cuadriláteros; y en tres dimensiones se utilizan tetraedros, etc. En la práctica, casi siempre el mallado se efectúa con la ayuda de algún software. La densidad de la malla depende del requisito de precisión del análisis y de los recursos computacionales disponibles. En general, una malla más fina producirá resultados más precisos, pero aumentará el costo computacional.

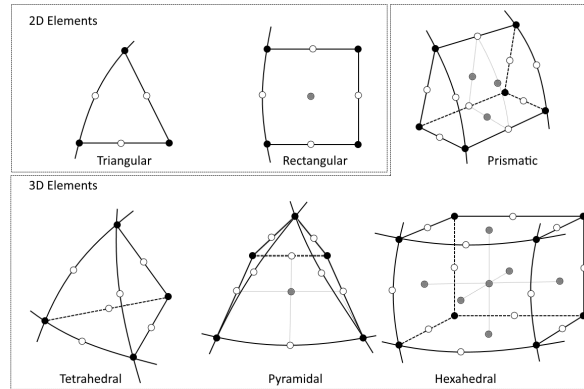


Figura 1.11: Tipos de mallado en el Método de Elemento Finito. .

- 1.3 *Especificación de las propiedades materiales.*
- 1.4 *Especificación de las condiciones de frontera.*
2. **Procesado.** El preprocesador es la parte en la que el programa de EF construye y resuelve la ecuación del modelo definido y discretizado en el preprocesador. Se recuerda que el tamaño de las matrices es igual al número de grados de libertad del modelo, de manera que cuantos más nodos (malla más refinada), más preciso es el resultado pero más tarda el ordenador en resolver la ecuación (mayor coste computacional del análisis).
3. **Postprocesado.** El postprocesador es la parte en la que el programa de EF ofrece las herramientas para visualizar los resultados obtenidos del procesador, con el objetivo de ayudar a conocer e interpretar la respuesta del modelo ante las solicitaciones impuestas.

En definitiva, debe quedar claro que la interpretación de resultados en el postprocesador es uno de los aspectos más importantes del análisis por EF de una pieza. Para llevarla a cabo correctamente, el analista debe tener conocimiento de ingeniería y del MEF, y ser consciente de las características y particularidades de su modelo.



## Capítulo 2

# Electrorrotación de una Esfera Metálica

En este capítulo estudiamos el fenómeno de Electrorrotación de una microesfera conductora inmersa en una solución electrolítica acuosa. Para nuestro estudio, dos contribuciones son relevantes: la parte eléctrica y el arrastre de flujo electroosmótico sobre la superficie de la microesfera. En la primera sección de este capítulo presentamos el planteamiento del problema, donde se exponen las consideraciones y las cantidades a obtener. Enseguida, en la sección 2.2, desarrollamos la formulación de nuestro problema, presentando las expresiones matemáticas para las cantidades físicas más relevantes en este trabajo. Posteriormente, en la sección 2.3, desarrollamos una solución analítica para la contribución a la velocidad angular debida al par eléctrico sobre el dipolo inducido. Finalmente, en la sección 2.4, presentamos el cálculo de la contribución a la velocidad angular debida al flujo electroosmótico mediante la aplicación del Teorema de Reciprocidad para Fluidos.

### 2.1. Planteamiento del Problema

El fenómeno electrocinético de Electrorrotación 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. Esta dispersión se coloca bajo la acción de un campo eléctrico rotante, creado por medio de cuatro electrodos colocados simétricamente, como se muestra en la figura 2.1, y alimentados con corriente alterna desfasados en noventa grados. La región donde actúa el campo eléctrico generado por los electrodos se divide en dos partes: la primera (de tono gris más oscuro) es donde ocurre el fenómeno de Electrorrotación, en ella el campo eléctrico es rotante; mientras que, la región menos oscura ocurre el fenómeno de Electroorientación, allí el campo eléctrico es orientacional, ver figura 2.2.

En este escenario cuatro fenómenos están presentes, o influencias sobre la micropartícula. El primero consiste en que debido al campo eléctrico aplicado se induce un dipolo eléctrico en la micropartícula, el cuál interactúa con el campo aplicado y produciendo sobre la micropartícula un par eléctrico,  $\Gamma_e$ . El segundo fenómeno 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  $\lambda_D$ , 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 ella,  $\Gamma_{iceo}$ . Un tercer efecto sobre la micropartícula es debido a la presencia de la pared que confina la dispersión. El último efecto corresponde al movimiento browniano, de acción de vibración térmica de las partículas de la solución electrolítica que rodean a la micropartícula

**CAPÍTULO 2. ELECTROROTACIÓN DE UNA ESFERA METÁLICA**  
**2.1. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA**

---

esférica. Para nuestro estudio hacemos las siguientes consideraciones:

- Suponemos que la doble capa eléctrica es delgada. De modo que la información de esta la incluimos como condición de frontera.
- Los efectos 3 y 4 no los consideramos por el momento.

Así que con estas consideraciones buscamos la velocidad angular de rotación de la micropartícula esférica metálica

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

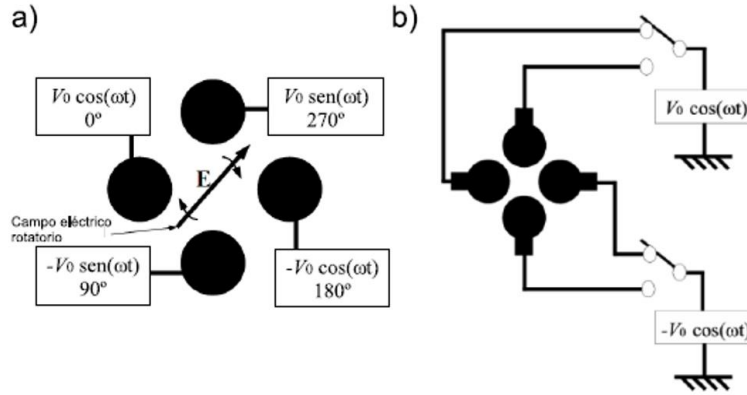


Figura 2.1: **Configuración y Diseño Experimental.** En la figura se aprecia de izquierda a derecha: **a)** Configuración usada para generar el campo eléctrico en los experimentos de Electrorotación; **b)** Configuración usada en los experimentos de Electroorientación.

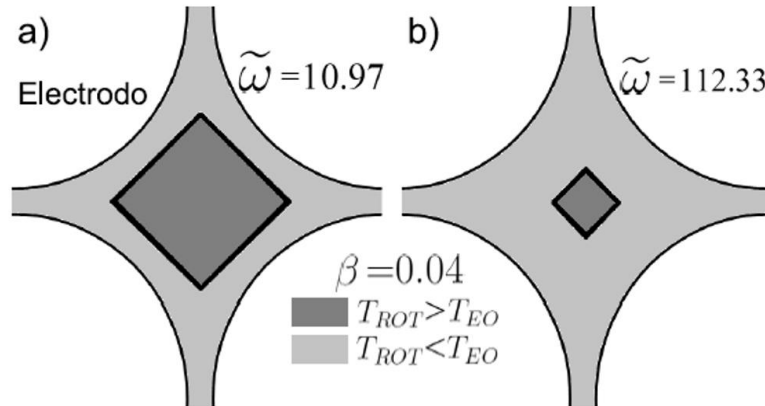


Figura 2.2: **Regiones experimentales de importancia.** Existen dos regiones: Una región donde domina el término de Electroorientación (en gris claro) y otra en la que domina el término de Electrorotación (en gris oscuro). En la figura: **a)** La frecuencia adimensional del campo aplicado es:  $\tilde{\omega} = 10.97$ . En **b)**  $\tilde{\omega} = 112.33$ . Los cálculos se hicieron para un cilindro con  $\beta = \frac{a}{b} = 0.04$ .

## 2.2. Formulación Matemática

En esta sección planteamos el efecto más relevante en el fenómeno de Electrorrotación, que se debe a la interacción del dipolo eléctrico inducido con el campo eléctrico aplicado. Consideremos una microesfera metálica de radio  $a$  inmersa en una solución electrolítica 1:1, esta induce una doble capa en su cercanía, y sujeta a la acción de un campo eléctrico rotante de corriente alterna con amplitud  $E_0$  y frecuencia angular  $\omega$ . En un sistema de referencia fijo en el centro de la microesfera podemos escribir este campo eléctrico en el plano  $zy$  como,

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

Este campo eléctrico rotante induce un dipolo eléctrico en la microesfera metálica, que está dado por la expresión siguiente,

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

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

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

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

aquí  $\Phi_z + z$  es el potencial debido al dipolo en la dirección paralela (en este caso en la dirección  $z$ ),  $\Phi_y + y$  el potencial debido al dipolo en la dirección perpendicular (en este caso en la dirección  $y$ ) y  $d\mathbf{S}$  es un elemento diferencial de área. En las expresiones (2.4) y (2.5), la integral se efectúa sobre una superficie cerrada que contenga al dipolo, por ejemplo una esfera. Ahora bien, un campo eléctrico que actúa sobre un dipolo puntual ejerce un par de fuerzas que viene dado por  $\mathbf{\Gamma}_e = \mathbf{p} \times \mathbf{E}$ . En el caso de un campo eléctrico alterno actuando sobre un dipolo debe considerarse el promedio temporal del par eléctrico, se tiene

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

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, es conocida como: **Aproximación de Dipolo Puntual** [12, 19].

El par eléctrico en condiciones estacionarias se equilibra con el par viscoso,  $\mathbf{\Gamma}_v = -\gamma\Omega$ , de tal manera que la micropartícula adquiere una velocidad angular  $\Omega_{rot}^e$  dada por la expresión,

$$\Omega_{rot}^e = -\frac{2\pi}{\gamma} \epsilon a^3 E_0^2 \mathbb{I}m(A + B)\hat{\mathbf{e}}_x. \quad (2.7)$$

en esta ecuación  $\gamma$  es el coeficiente viscoso de rotación, que 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  $a$ , es,

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

Ahora, para determinar el coeficiente  $A$  resolvemos numéricamente la ecuación de Laplace para determinar  $\Phi_z$  con las siguientes condiciones de frontera,

**CAPÍTULO 2. ELECTROROTACIÓN DE UNA ESFERA METÁLICA**  
**2.3. SOLUCIÓN ANALÍTICA DEL PROBLEMA ELECTROSTÁTICO**

---

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

siendo  $\hat{\mathbf{n}}$  un vector unitario normal a la superficie  $S$ ,  $C_{DL}$  es la capacidad diferencial por unidad de superficie de la doble capa,  $\sigma$  es la conductividad eléctrica de la solución electrolítica. La primera ecuación de la expresión (2.10) incorpora la consideración de la doble capa delgada, está nos permite resolver la ecuación de Laplace en lugar de la ecuación de Poisson. Un planteamiento similar es seguido para obtener  $\Phi_y$  y por consiguiente determinar el coeficiente B.

### 2.3. Solución Analítica del Problema Electrostático

En esta sección se describe la solución analítica para obtener la velocidad angular de rotación de la microsfera metálica debido al campo eléctrico externo rotante. El campo eléctrico rotante se divide en dos componentes una en la dirección  $z$  y otra en la dirección  $y$ . Para determinar la expresión analítica de la velocidad angular planteamos 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 la doble capa eléctrica es delgada, resolvemos la ecuación de Laplace

$$\nabla^2\Phi = \frac{1}{r^2 \sin\theta} \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \sin\theta \frac{\partial\Phi}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial\Phi}{\partial\theta} \right) + \frac{\partial}{\partial\phi} \left( \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial\Phi}{\partial\phi} \right) \right] = 0 \quad (2.11)$$

sujeta a las siguientes condiciones de frontera

$$(\nabla\Phi \cdot \hat{\mathbf{n}})|_s = i\omega \frac{C_{DL}}{\sigma} \Phi \quad \text{Para } r = a \quad (2.12)$$

$$\Phi \rightarrow -E_0 z \quad \text{Para } z \rightarrow \infty. \quad (2.13)$$

Para la solución debemos considerar que el potencial eléctrico total se debe a dos contribuciones: una debida al campo eléctrico aplicado y otra producto del dipolo eléctrico inducido en la esfera, por lo que el potencial es de la forma,

$$\Phi = \phi_{ext} + \phi' \quad (2.14)$$

en esta expresión  $\phi_{ext}$  denota el potencial debido al campo eléctrico aplicado y  $\phi'$  es el potencial creado por el dipolo inducido en la microsfera. Si asumimos simetría azimutal, el potencial total se expresa como,

$$\Phi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \left( A_l r^{-(l+1)} + B_l r^l \right) P_l(\cos\theta) \quad (2.15)$$

aplicando las condición de frontera (2.13) y considerando la contribución del dipolo eléctrico, se tiene

$$\Phi = -Er \cos\theta + \frac{A_1}{r^2} P_1(\cos\theta) \quad (2.16)$$

El primer término del segundo miembro desaparece debido a que no hay carga libre en la esfera conductora, pero el segundo término corresponde a la inducción del dipolo eléctrico debido al campo eléctrico externo. En donde ya hemos usado la condición de frontera dada por la expresión (2.12). Ahora empleando la condición de frontera (2.13) se obtiene,

$$\sigma \frac{\partial}{\partial r} \left( -E_0 r P_1(\cos \theta) + \frac{A_1}{r^2} P_1(\cos \theta) \right) = i\omega C_{DL} \left( -E_0 r P_1(\cos \theta) + \frac{A_1}{r^2} P_1(\cos \theta) \right) \quad (2.17)$$

definiendo

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

En la ecuación 2.17, el segundo término representa el potencial eléctrico de un dipolo de magnitud.

$$A_1 = E_0 a^3 \frac{(i\tilde{\omega} - \frac{1}{2})}{(i\tilde{\omega} + 1)} \quad (2.19)$$

de ésta se define el Factor de Clausius-Mossoti, dado por

$$K(\tilde{\omega}) = \frac{i\tilde{\omega} - \frac{1}{2}}{i\tilde{\omega} + 1} \quad (2.20)$$

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 está dado por,

$$\mathbf{\Omega}_{rot}^e = -\frac{4\pi}{\gamma} \epsilon a^3 E_0^2 \text{Im}[K(\tilde{\omega})] \hat{\mathbf{e}}_x. \quad (2.21)$$

## 2.4. Flujo Electrosmótico, ICEO

En esta sección presentamos el cálculo para el par aplicado sobre la micropartícula originado por flujo electrosmótico. Como se describió en la secciones 1.2 y 1.4 del capítulo anterior, este flujo se origina debido a los iones cargados que se localizan alrededor de la microesfera, formando así la estructura denominada capa doble eléctrica. Si aplicamos un campo eléctrico rotante, esta capa origina un flujo de la solución electrolítica alrededor de la microesfera; logrando así ejercer un par sobre ella. A este se le denomina flujo electrosmótico por carga inducida o ICEO (Induced Charge Electro-Osmosis) por sus siglas en inglés. Para calcular su contribución a la velocidad angular, recurrimos al *Teorema de Reciprocidad de Lorentz* [12, 19]

$$\int \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbb{T}_1 \cdot \mathbf{v}_2 \, dS = \int \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbb{T}_2 \cdot \mathbf{v}_1 \, dS, \quad (2.22)$$

a *grosso modo* este teorema expresa la relación entre dos escenarios, etiquetados con 1 y 2, que sumados dan el problema original. Para su aplicación en nuestro problema, consideramos lo siguiente: Si tenemos una micropartícula moviéndose en el interior de un fluido con velocidad  $\mathbf{v} = \mathbf{v}_s + \mathbf{\Omega}_{rot} \times \mathbf{r}$ . Los puntos de su superficie se mueven con una velocidad de arrastre de fluido  $\mathbf{v}_s$  denominada *velocidad de deslizamiento* (slip en inglés), mientras que,  $\mathbf{\Omega}_{rot} \times \mathbf{r}$  es la contribución a la *velocidad de rotación*. Ahora bien, nuestro escenario 1 consiste en la micropartícula moviéndose en un fluido con la velocidad  $\mathbf{v}_s$  con el *tensor de esfuerzos*  $\mathbb{T}_1$ ; en tanto que el escenario 2 es el de la micropartícula moviéndose con velocidad  $\mathbf{\Omega}_{rot} \times \mathbf{r}$  y *tensor de esfuerzos*  $\mathbb{T}_2$ . Aplicando (2.22)

$$\int \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbb{T}_1 \cdot (\mathbf{\Omega}_{rot} \times \mathbf{r}) \, dS = \int \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbb{T}_2 \cdot \mathbf{v}_s \, dS, \quad (2.23)$$

donde las integrales se realizan sobre la superficie de la micropartícula y  $\hat{\mathbf{n}}$  es un vector normal unitario a ella. Utilizando la identidad vectorial  $\mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = \mathbf{B} \cdot (\mathbf{C} \times \mathbf{A})$  y considerando que el problema completo está en equilibrio, la ecuación (2.23) se escribe

**CAPÍTULO 2. ELECTRROROTACIÓN DE UNA ESFERA METÁLICA**  
**2.5. COEFICIENTE VISCOZO DE ROTACIÓN PARA UNA ESFERA**

---

$$-\int \mathbf{r} \times (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbb{T}_2) dS \cdot \boldsymbol{\Omega}_{rot} = \int \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbb{T}_2 \cdot \mathbf{v}_s dS. \quad (2.24)$$

En el problema de la microesfera rotando, como los campos eléctricos están en  $z$  e  $y$ , la micropartícula rota en la dirección  $x$ . Así la velocidad angular de rotación se reduce

$$\boldsymbol{\Omega}_{rot}^{iceo} = -\frac{\int (t_x v_{sx} + t_y v_{sy} + t_z v_{sz}) dS}{\int (y t_z - z t_y) dS} \hat{\mathbf{e}}_x \quad (2.25)$$

en la última expresión (2.25)  $\mathbf{t} = \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbb{T}$  denota al *vector de esfuerzos*. Por simplicidad, hemos omitido los subíndices  $x, 2$  en  $\boldsymbol{\Omega}_{rot}$  y el tensor de esfuerzos, respectivamente. Finalmente, por la fórmula de Helmholtz-Smoluchowski, la velocidad de deslizamiento  $\mathbf{v}_s$  está dada

$$\mathbf{v}_s = -\frac{\epsilon}{2\eta} \mathbb{R}e [\Phi_s \nabla_s \Phi_s^*] \quad (2.26)$$

siendo  $\Phi_s$  el potencial eléctrico justo fuera de la capa doble de la superficie en la microesfera metálica,  $\nabla_s$  el operador gradiente superficial y  $\eta$  la viscosidad del líquido.

## 2.5. Coeficiente viscoso de rotación para una esfera

Esta última sección se encuentra destinada al cálculo del coeficiente viscoso de rotación de una microesfera inmersa en un fluido. Al tratarse de un parámetro necesario para poder evaluar las expresiones (2.7) y (2.21) y que físicamente depende de su forma geométrica además de la viscosidad del fluido donde se encuentra inmersa. Su expresión teórica viene dada por la ecuación (2.8). Uno de nuestros resultados importantes es: El coeficiente de viscosidad está dado por el denominador de la ecuación (2.25), es decir

$$\gamma_{rot} = \oint_S (y t_z - z t_y) dS \quad (2.27)$$

Esta integral se realiza sobre la superficie de la micropartícula debido a que se requiere conocer las componentes del vector de esfuerzos en esta región.

## 2.6. Detalles Experimentales

Esta sección está destinada exclusivamente para presentar algunas generalidades sobre el diseño y análisis de la parte experimental del fenómeno de Electrorrotación. En estos experimentos se utilizan esferas metálicas de Titanio (véase figura ). Su diámetro varía en un rango  $3.0 \mu\text{m}$  a  $45.0 \mu\text{m}$ . La generación del campo eléctrico rotante se realiza mediante una estructura plana de cuatro electrodos elaborados mediante la técnica denominada fotolitografía y conformados por una capa de platino de  $300 \text{ nm}$  de espesor sobre un sustrato de vidrio. Para ello, se utilizan dos estructuras distintas: la primera con un gap de  $0.5 \text{ mm}$  y otra con un gap de  $1 \text{ mm}$  entre electrodos opuestos, respectivamente. La velocidad de rotación se midió en una región circular de  $300 \mu\text{m}$  de radio cuyo centro coincide con el centro de la estructura de electrodos.

Las medidas se realizan con la esferas estando inmersas en una solución de cloruro potasio (KCl). Como las esferas son mucho más densas que el agua, se depositan rápidamente en el fondo y se apoyan sobre el sustrato en el que se encuentran los electrodos. La rotación de las esferas se observó con un microscopio invertido y se grabó en vídeo para su posterior análisis. Para poder observar la rotación de las esferas, las partículas se decoraron con nanoesferas fluorescentes de látex. Los resultados experimentales han sido publicados (*Arcenegui et al. (2013a)*).

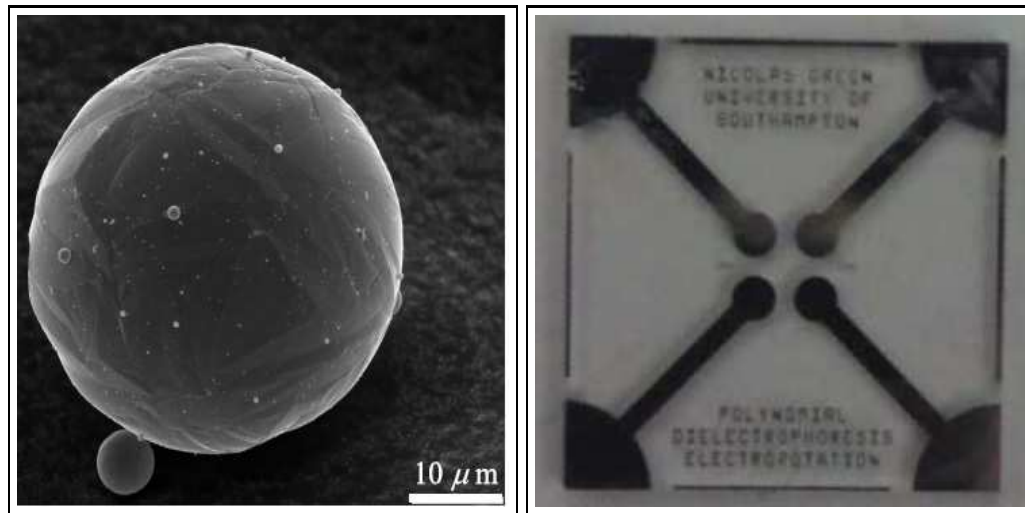


Figura 2.3: **Diseño experimental de un sistema de Electrotación.** En la figura se muestran de derecha a izquierda: (a) Imagen SEM de una micropartícula de titanio usada en los experimentos. (b) Fotografía de la estructura electrodos usada en los experimentos.

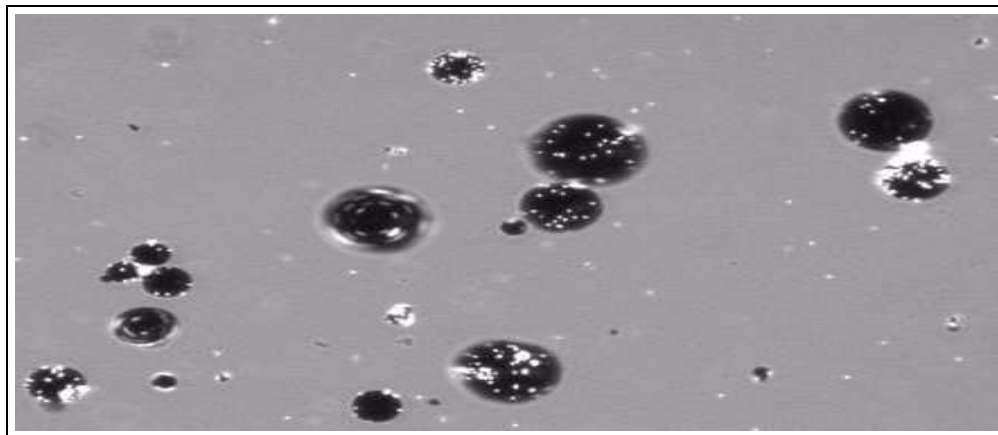


Figura 2.4: **Dispersión de micropartículas en una solución electrolítica sometidas a un campo eléctrico rotante.** En la figura se aprecian micropartículas metálicas de Titanio (cuyo tamaño oscila entre 3.0 y 45.0  $\mu\text{m}$ ). Su simetría esférica permite medir su rotación si se decora su superficie. Por ello se utilizan micropartículas fosforescentes de tamaño 0.05  $\mu\text{m}$ . **Fuente:** Imagen extraída de un vídeo propiedad de la Universidad de Sevilla.



## Capítulo 3

# Resultados de la Electrorotación

En el presente capítulo mostramos la metodología y modelado computacional del fenómeno de Electrorotación de una microesfera metálica inmersa en una solución electrolítica y actuada por un campo eléctrico rotante implementando el software comercial **COMSOL Multiphysics** en su versión 5.4. En la primera sección, describimos como se obtuvieron los cálculos de simulación por computadora. En la sección 2, mostramos específicamente los potenciales eléctricos y los perfiles de velocidad evaluados por medio de la simulación computacional, estos fueron obtenidos de resolver la ecuaciones de Laplace y de Navier-Stokes para flujo laminar, de acuerdo a como se describió en el capítulos precedente. Enseguida, se describe como se obtiene las polarizabilidades A y B, y se muestra su comparación con los resultados teóricos a saber con el factor de Clausius-Mossoti. Posteriormente, 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, se hace también la comparación con el resultado teórico. Finalmente, mostramos y discutimos el cálculo del coeficiente de fricción y su comparación con el valor teórico.

### 3.1. Simulación Computacional

El modelado (en ciencias básicas e ingeniería) se define como la formulación de una representación matemática o computacional de un sistema físico. Este proceso involucra la iteración de las siguientes etapas: *formulación, codificación, verificación y validación*. La primera etapa, consiste en *elegir apropiadamente las ecuaciones que describen el sistema que se quiere modelar*. El siguiente paso es implementar las formulaciones en la computadora, un proceso conocido como *codificación*. El uso de software especializado puede acelerar drásticamente esta etapa, debido a las interfaces de usuario incorporadas para ingresar ecuaciones, así como a las extensas bibliotecas de solucionadores numéricos entre los que puede seleccionar el modelado. Estas representaciones, conocidas como modelos, se resuelven numéricamente implementando una computadora; este proceso es conocido como *simulación*. El uso de software matemático o de modelado especializado puede acelerar drásticamente esta etapa de codificación debido a las interfaces de usuario incorporadas para ingresar ecuaciones, así como a las extensas bibliotecas de solucionadores numéricos entre los que puede seleccionar el modelado.

El software COMSOL Multiphysics (antes conocido como FEMLAB) es una herramienta computacional de simulación de fenómenos físicos desarrollada por Svante Littmark y Farhad Saeidi de la Universidad Tecnológica Real de Estocolmo, Suecia. Este programa permite resolver ecuaciones diferenciales parciales con condiciones a la frontera utilizando el método de elemento finito. Actualmente es aceptado por la comunidad científica debido a la alta eficiencia de sus algoritmos. En la figura 3.1 se muestra un esquema general de su funcionamiento.

El algoritmo implementado por COMSOL Multiphysics consta de las siguientes partes:

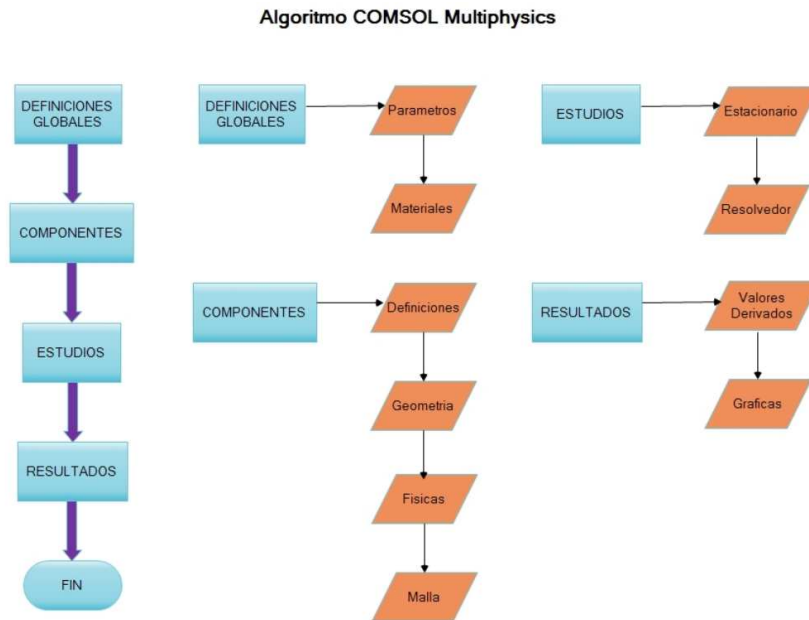


Figura 3.1: Diagrama de flujo del algoritmo del programa comercial COMSOL Multiphysics.

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 conformada por cuatro secciones:
  - 2.1 *Definiciones locales.* Son las variables y parámetros asociados a la componente actual.
  - 2.2 *Geometría.* Son las regiones relevantes: superficies, bordes y puntos. En cada una de ellas, se definen propiedades de los materiales que componen al sistema, además de las condiciones de frontera.
  - 2.3 *Físicas.* Son las ecuaciones diferenciales que están relacionadas con el sistema y objetivos de la simulación. Para nuestro estudio, por ejemplo, las ecuaciones de Laplace y Navier-Stokes.
  - 2.4 *Mallado.* 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) implica un tiempo de cómputo mayor
3. **Estudio.** En esta parte del algoritmo se elige el tipo de estudio a simular, *estacionario o no estacionario*, también se elige el *resolvedor* que es el método numérico con el cual se resuelven las ecuaciones físicas, junto con un parámetro la tolerancia relativa que define la calidad de los cálculos numéricos.
4. **Resultados.** En esta parte, se obtienen las variables físicas asociadas con el problema. Los valores se presentan en forma de *gráficas de salida*. Por lo general, estas variables físicas están asociadas a otras cantidades denominadas *valores derivados*.

### 3.2. Características de la Simulación

La simulación computacional se realizó en una computadora con las siguientes características: Intel64 Family 6 Model 60 Stepping 3, GenuineIntel. Using 1 socket with 4 cores in total on DESKTOP-MATC7EE. Memoria disponible: 16.33 GB. En la figura 3.2 se muestra la geometría tridimensional de nuestra simulación. En primer lugar, puede apreciarse a la microesfera con un mallado más fino, también se puede observar el volumen de control donde se realiza el estudio de simulación en este caso un cilindro cuyas dimensiones cumplen las condiciones de frontera lejos de la microesfera. La forma del elemento de mallado es tetraédrico y el tamaño entre la microesfera y el cilindro es de 1.1, mientras que, el tamaño del elemento sobre la superficie de la microesfera es de 0.004, esto debido a que la solución de las ecuaciones de Laplace y de Navier-Stokes es muy sensible en esta frontera. *El número de elementos finitos del mallado fue de 5,160,208.*

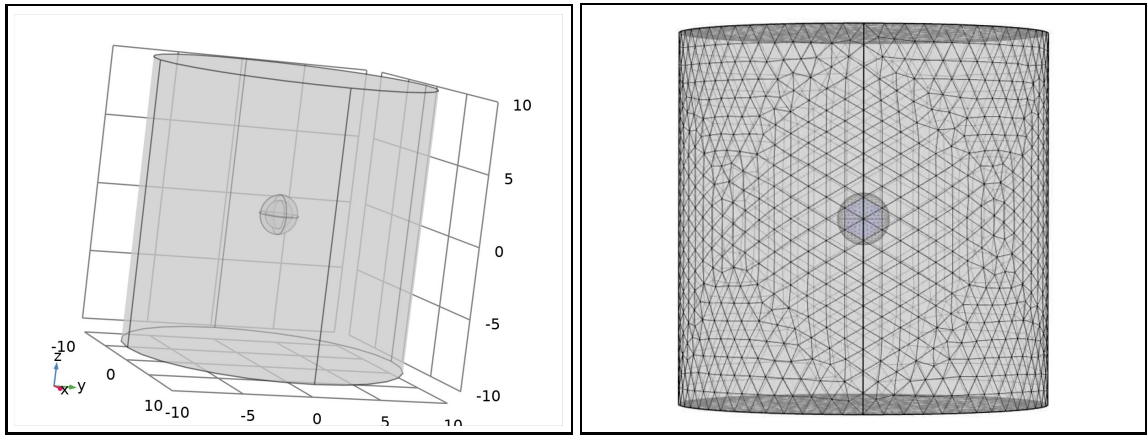


Figura 3.2: **Diseño computacional del fenómeno de Electrorotación.** En la figura se aprecia el proceso de mallado para la microesfera y su doble capa dentro del volumen de control. La implementación del software computacional COMSOL nos proporcionó las herramientas necesarias para realizar el diseño y posterior simulación computacional. De izquierda a derecha: **(a)** Geometría de la simulación computacional. **(b)** Diseño computacional y mallado.

Estudio	Física	Propiedad Física	Tiempo Máquina	Memoria Física	Tolerancia Relativa
Estudio 1	Ecuación de Laplace	$\Phi_z, \Phi_y$	13:29:46	15.53 GB	0.0001
Estudio 2	Ecuaciones de Navier-Stokes	$v, T$	08:23:04	16.00 GB	0.001

Tabla 3.1: **Características principales de nuestro modelo multifísica.** El Software COMSOL Multiphysics permitió resolver la ecuación de Laplace implementando el módulo AC/DC con una tolerancia relativa de 0.0001. Por otra parte, la ecuación de Navier-Stokes fue resuelta mediante el módulo CFD con una tolerancia relativa de 0.001.

La tabla 3.2 presenta una síntesis de los elementos relevantes de nuestra simulación realizada para el fenómeno de Electrorotación de la microesfera metálica sumergida en una solución acuosa. En nuestro primer estudio se resolvió la ecuación de Laplace, para determinar los potenciales eléctricos  $\Phi_z$  y  $\Phi_y$ , sujeta a las condiciones de frontera dadas por las ecuaciones (2.10). Para realizar esta tarea se eligió una tolerancia relativa de 0.0001 (el valor por default es 0.001) que implicó un tiempo de cómputo total de 13 horas con 29 minutos y 46 segundos. Por lo anterior, los resultados

**CAPÍTULO 3. RESULTADOS DE LA ELECTROROTACIÓN**  
**3.2. CARACTERÍSTICAS DE LA SIMULACIÓN**

---

numéricos tienen muy buena precisión aunado a que contamos con una computadora con memoria física de 20 GB. De manera complementaria a nuestra simulación computacional, se realizó otro estudio (denominado estudio 2) que consistió en resolver la ecuación de Navier-Stokes para flujo laminar y con la condición de frontera de no deslizamiento sobre la micropartícula. El objetivo primordial de este estudio fue obtener los perfiles de velocidad,  $\mathbf{v}$  alrededor de la microesfera metálica y el tensor de esfuerzos,  $\mathbb{T}$ . En este caso, la tolerancia relativa se escogió de 0.0001, pero no se encontró convergencia en la solución; así que se optó por elegir una tolerancia relativa de 0.001 que nos llevó a la solución. El tiempo destinado para realizar esta tarea fue de 8 horas con 23 minutos y 4 segundos.

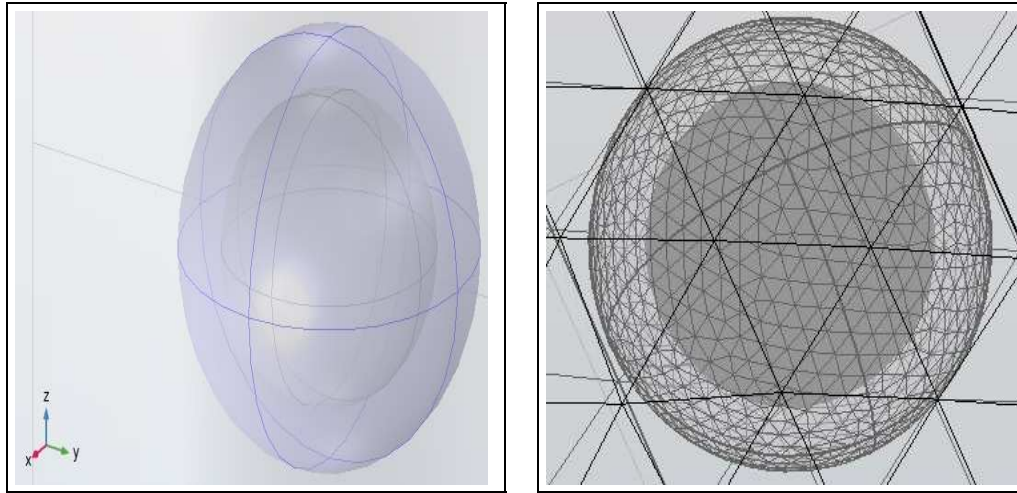


Figura 3.3: **Diseño computacional y modelado de la microesfera metálica.** En la figura se muestran de izquierda a derecha: **(a)** Estructura de la microesfera metálica conductora. **(b)** Implementación del mallado. Nótese el Mallado extremadamente fino sobre la superficie de la micropartícula.

Se implemento un elemento de malla con las siguientes características:

Tamaño	Máximo	Mínimo	Curvatura	Crecimiento
Más Fino	1.1	0.08	0.4	1.4
Extremadamente Fino	0.01	0.004	0.2	1.3

Tabla 3.2: **Características principales del ajuste de malla en el modelo multifísica.** En nuestro estudio numérico, el coeficiente viscoso de rotación es muy sensible al mallado sobre la micropartícula, por ello se realizó un mallado extremadamente fino. Mientras que, los parámetros A y B son menos sensibles al mallado. Por ello el mallado sobre la segunda esfera es más fino.

Finalmente, se muestra una tabla con estadística general de nuestra simulación computacional

Número	Valor	Descripción	Valor
Dominios	3	Tetraedros	5106208
Contornos	22	Triángulos	312252
Aristas	37	Vértices	21

Tabla 3.3: **Estadísticas generales de la geometría y malla de nuestra simulación computacional.**

### 3.3. Potenciales Eléctricos y Perfil de Velocidades

El campo eléctrico rotante debido a los cuatro electrodos simétricamente dispuestos (ver figura 2.1) induce un dipolo eléctrico en la microesfera metálica. La interacción de este campo eléctrico externo con el dipolo se manifiesta en la aplicación de un par eléctrico que hace rotar a la partícula. Este dipolo eléctrico se puede descomponer en dos partes: una componente en la dirección  $z$  y otra en la dirección  $y$  como lo indica la expresión (2.3). Los resultados numéricos de resolver la ecuación de Laplace con las condiciones de frontera dadas por las expresiones (2.10) aunado a la versatilidad del software nos permitió obtener los potenciales eléctricos generados por los dipolos inducidos en las direcciones  $z$  e  $y$ . A continuación (ver figura 3.4) se muestran estos resultados.

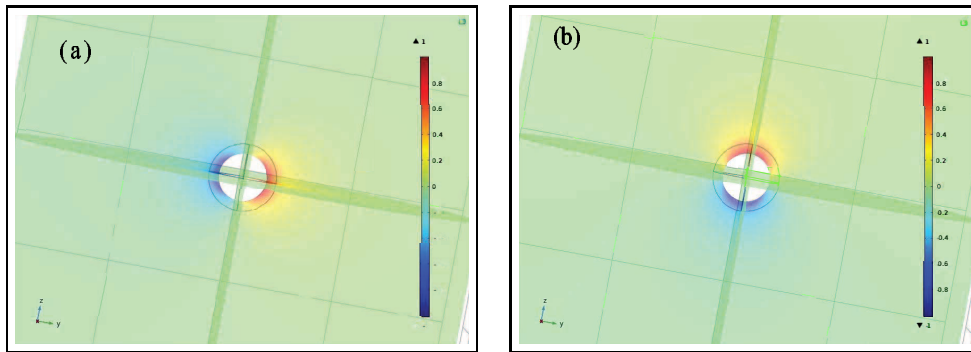


Figura 3.4: **Potenciales eléctricos producidos por el dipolo inducido en la microesfera.** En la figura se muestran de izquierda a derecha: **(a)** Potencial eléctrico debido a la componente del dipolo inducido en la dirección  $z$ . **(b)** Potencial eléctrico debido a la componente del dipolo eléctrico en la dirección  $y$ .

Por otra parte, en la figura 3.5 se muestran los perfiles de velocidad del flujo de la solución electrolítica alrededor de la microesfera metálica el cual es consecuencia tanto de la rotación de la microesfera metálica como de la carga eléctrica de la doble capa que ante la presencia del campo eléctrico presente se produce un flujo electroosmótico. Estos resultados numéricos se obtienen al resolver la ecuación de Navier-Stokes sujeta a la condición de non-slip alrededor de la superficie de la microesfera. Puede notarse en la figura que cerca de la microesfera el flujo es más intenso.

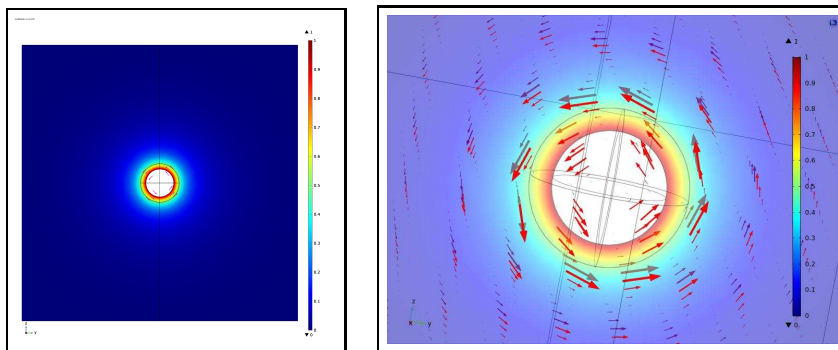


Figura 3.5: **Campo de velocidades  $v$  alrededor de la microesfera metálica.** Al resolver la ecuación de Navier-Stokes, como puede notarse hay un flujo rotante de la solución alrededor de la microesfera. El esquema de la derecha muestra con detalle las líneas de flujo alrededor de la esfera.

### 3.4. Polarizabilidades

Una vez obtenidos los potenciales eléctricos,  $\Phi_z$  y  $\Phi_y$ , tal como se indico en el Diagrama de Flujo del algoritmo de COMSOL Multiphysics es posible derivar valores adicionales, llamados valores derivados. Las Polarizabilidades A y B que están dadas por las expresiones (2.4) y (2.5), respectivamente, son valores o cantidades derivadas ya que por medio del conocimiento de los potenciales eléctricos pueden ahora ser evaluados mediante la integral de superficie cerrada tomada sobre una esfera que esta cerca de la microesfera metálica, está esfera cercana se puede notar en la figura 3.2.

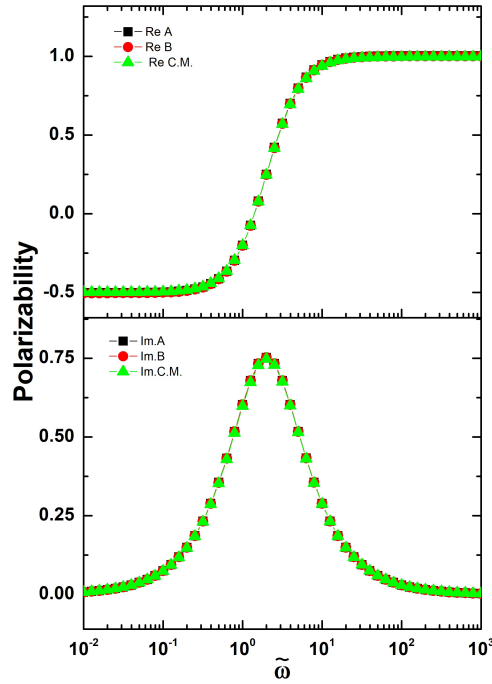


Figura 3.6: **Factores de Polarizabilidad.** En esta gráfica se muestran la **parte real e imaginaria** de A y B calculadas mediante (2.4) y (2.5). Se comparan con el **valor teórico de Clausius-Mossoti, C.M.** expresado por la ecuación (2.20).

Debido a que el campo eléctrico aplicado rotante es de la forma dada por la expresión (2.2), producido por corriente alterna de frecuencia  $\omega$ , está expresión es una función compleja y por consiguiente todas las cantidades físicas del sistema son cantidades complejas, luego entonces las polarizabilidades tienen parte real y compleja. En la figura (3.6) se muestran los valores derivados de las polarizabilidades A y B, y se compara su parte real e imaginaria con los valores teóricos dados por el Factor Clausius-Mossoti dado por la expresión (2.20). Como se puede observar tanto la parte imaginaria y real coinciden con los valores teóricos del Factor Clausius-Mossoti, y además como es de esperarse por la simetría los coeficientes de polarizabilidad A y B son iguales. Cabe mencionar que como lo muestra la expresión (2.7) la parte imaginaria de los coeficientes de polarizabilidad está relacionada con la Electrorrotación de la microesfera, mientras que, la parte real está relacionada con el fenómeno de Electrorrotación [1]. También debe ser notado que la parte imaginaria de las polarizabilidades A y B adquieren un valor máximo de 0.75 cuando la frecuencia adquiere el valor  $\tilde{\omega} = 1,9953$ . En cuanto al fenómeno de Electroorientación puede verse, que para frecuencias menores

a  $10^0$  se favorece la Electrorotación en una dirección contraria al campo aplicado, enseguida se nota una región de transición para frecuencias entre  $10^0$  y  $10^1$ , luego para frecuencias mayores a  $10^1$  la Electrorotación es en la dirección del campo aplicado.

### 3.5. Velocidad Angular de Rotación

En el capítulo 2 se describió que la velocidad angular de rotación se debe a dos contribuciones principalmente, la primera debido al par eléctrico que ejerce el campo eléctrico aplicado sobre el dipolo eléctrico inducido,  $\Omega_{rot}^e$ , mientras que, la segunda contribución se debe a que la carga eléctrica de la doble capa cerca de la microesfera 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  $\Omega_{rot}^{iceo}$ ; de manera que la velocidad angular de rotación total de la micropartícula esta dada por la expresión (2.1).

Las contribuciones a la velocidad angular de rotación total de la microesfera metálica son evaluadas numéricamente por medio de las expresiones (2.7) y (2.25), 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 (2.26) y las componentes del vector de esfuerzos. No obstante, debe notarse que en la ecuación (2.7) el coeficiente viscoso de la microesfera es justo el denominador de la expresión (2.25).

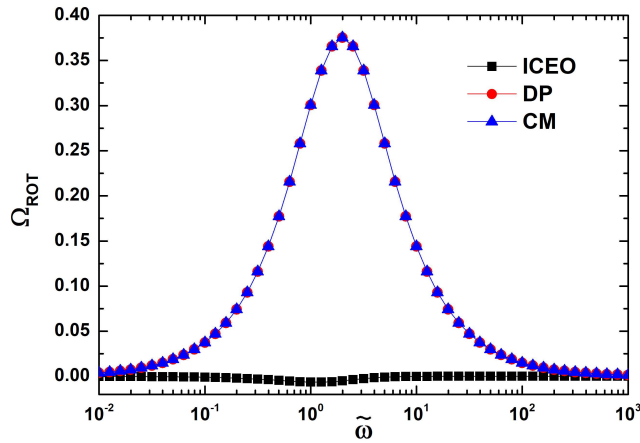


Figura 3.7: **Espectro de velocidad angular de rotación de la microesfera metálica.** En la presente gráfica la **parte eléctrica numérica, DP** coincide con el resultado teórico que llamamos **Clausius-Mossoti, CM**. También se muestra la parte debida al **flujo electroosmótico, ICEO** que es muy pequeña.

La expresión para el campo rotante (2.2) nos indica que rota alrededor del eje  $x$  en la dirección contraria a las manecillas del reloj con velocidad angular  $\omega$ . De la ecuación (2.7) para la velocidad angular debido a la interacción del dipolo eléctrico inducido con el campo eléctrico rotante aplicado nos muestra que esta en sentido contrario al eje  $x$ , se dice entonces que  $\Omega_{rot}^e$  es contra-campo (counterfield). Por otro lado, de las expresiones (2.25) y (2.26) se puede ver que la velocidad angular debido al flujo electroosmótico esta a lo largo del eje  $x$ , en este caso se dice que  $\Omega_{rot}^{iceo}$  es a favor-campo (cofield).

**CAPÍTULO 3. RESULTADOS DE LA ELECTROROTACIÓN**  
**3.6. COEFICIENTE VISCOSO DE ROTACIÓN**

---

Se mencionó en el capítulo 2, donde se planteo el problema de la Electrorotación de la microesfera conductora que cuatro son los efectos que contribuyen a la velocidad total de rotación, pero solo dos se consideran en este estudio de modo que la velocidad angular de rotación total esta dada por la expresión (2.1). En la figura 3.7 se muestra el espectro de velocidad angular de rotación de la microesfera metálica de los cálculos numéricos de simulación de las velocidades angulares de rotación  $\Omega_{rot}^e$  y  $\Omega_{rot}^{iceo}$  por medio de las expresiones (2.7) y (2.25), respectivamente. Y se compara la velocidad angular de rotación eléctrica numérica con el resultado teórico dado por la expresión (2.7), denominada velocidad angular de rotación eléctrica teórica de Clausius-Mossoti (C.M.), se observa en la figura que ambos resultados coinciden.

Por otra parte, no tenemos un resultado teórico para la velocidad angular de rotación debido al flujo electroosmótico, por lo que, no se muestra la comparación con nuestros resultados numéricos respectivos. Nótese en la figura 3.7 la velocidad de rotación eléctrica es mucho mayor que la velocidad angular de rotación debida al flujo electroosmótico, con estos resultados predican que la microesfera metálica rota en el sentido contrario al campo eléctrico rotante es decir la velocidad angular de rotación total es contra-campo (counterfield).

Finalmente, se observa en la figura 3.7 que la velocidad angular de rotación de la micropartícula metálica alcanza un valor máximo de 0.3727 cuando la frecuencia del campo eléctrico rotante es de  $\tilde{\omega} = 1,9953$ .

### 3.6. Coeficiente Viscoso de Rotación

La última sección de este capítulo está destinada a mostrar en la tabla 3.4 el coeficiente viscoso de una esfera de radio  $a$  obtenido mediante la expresión (2.27) y se compara con el resultado teórico dado por la ecuación 2.8, se observa que ambas aproximaciones coinciden, lo cual es otro resultado que válida nuestra formulación para el estudio de la Electrorotación de una micropartícula inmersa en una solución electrolítica. La comparación con el resultado las mediciones experimentales no se presentan debido a que como se dijo en el capítulo 2, que dos efectos no son considerados, pero podemos decir que si hay buena coincidencia con el experimento.

Aproximación	$\gamma$
Teórica	25.132
Numérica	25.210

Tabla 3.4: **Cálculo del coeficiente viscoso de rotación para la microesfera.** La simulación computacional y nuestro resultado teórico difieren de un **error porcentual = 0.3%**.

## Conclusiones

Estudiamos tanto teóricamente como numéricamente el fenómeno de la Electrorotación de una microesfera metálica, inmersa en una solución electrolítica acuosa. Considerando dos efectos: la interacción del dipolo inducido en el campo eléctrico externo y la acción del flujo electroosmótico sobre la microesfera.

Nuestro método de simulación numérico se basó en la solución de la ecuación de Laplace con una condición de frontera sobre la microesfera que toma en cuenta la información de la doble capa, que hemos considerado delgada. Por medio de resolver la ecuación de Navier-Stokes e implementar el Teorema de Reciprocidad para Fluidos hemos calculado la acción del flujo electroosmótico sobre la microesfera.

Encontramos por medio de nuestro método que los factores de polarizabilidad A y B dados por las expresiones (2.4) y (2.5), son iguales, y coinciden con el valor teórico de Clausius-Mossoti expresado por la ecuación (2.21).

Hemos calculado los espectros de rotación de la microesfera metálica, debido a la interacción del dipolo con el campo eléctrico externo y a la influencia del flujo electroosmótico. Para el primero hemos considerado la aproximación de dipolo puntual, mientras que, para el segundo hemos considerado flujo laminar. El espectro de rotación eléctrico obtenido por nuestro método coincide con el teórico. Los espectros de rotación de micropartículas pueden servir para la caracterización de las micropartículas.

Se encuentra que el coeficiente de viscosidad de la microesfera calculado por medio de expresión (2.27) coincide con el valor teórico de una esfera homogénea. Este valor numérico es igual a 25.210.

Los resultados obtenidos numéricamente por nuestro método coinciden con los resultados teóricos, lo cual da validez a nuestro método numérico y nos da confianza para aplicarlo a geometrías arbitrarias de micropartículas.

## Apéndice A



Figura 3.8: Constancia de Participación en el LXII Congreso Nacional de la Sociedad Mexicana de Física: Modalidad Póster. Celebrado del 07 al 11 de Octubre de 2019 en el Centro Internacional de Vinculación y Enseñanza de la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, Villahermosa, Tabasco.

## Apéndice B



*División de Dinámica de Fluidos*

**La División de Dinámica de Fluidos de la Sociedad  
Mexicana de Física**

Agradece la asistencia y participación de:

**Luis A. Muñoz Martínez**

Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas, BUAP

En el **XXV Congreso de la División de  
Dinámica de Fluidos**

Del 5 al 8 de noviembre de 2019

Centro Cultural UNAM, CCU, Santiago de Querétaro,  
Qro.

**Dra. Rosanna Bonasia**

DDF – SMF

Presidente

Figura 3.9: Constancia de Participación en el XXV Congreso de la División de Dinámica de Fluidos: Modalidad Ponencia. Celebrado del 05 al 08 de Noviembre de 2019 en Centro Cultural UNAM, CCU, Santiago de Querétaro, Querétaro.







# Bibliografía

- [1] **A. Ramos**, *Electrokinetics and Electrohydrodynamics in Microsystems*, (Vol. 530, Springer Science & Business Media Editorial, Udine, 2011).
- [2] **N. T. Nguyen**, *Mikrofluidik Entwurf, Herstellung und Charakterisierung*, (B. G. Teubner Verlag , Wiesbaden, 2004).
- [3] **E. D. Schukin, A.V. Pertsov and E.A. Amélinea**, *Química Coloidal*, (Editorial MIR, Moscú, 1988).
- [4] **D. Fernández-Rivas**, *Revista Cubana de Física*, ( 25(2B), 142-149, 2005).
- [5] **R. Arno**, *Elettrico Rotante per mezzo di differenze di potenziali alternative*, Atti Accad. Naz. Lincei Rend., 1, 139- 142, 1892.
- [6] **H. Bruus**, *Theoretical Microfluidics*, (Oxford University Press, New York, 2007).
- [7] **Stuart Lindsay**, *Introduction to Nanoscience*, (Oxford University Press, UK, 2010).
- [8] **P. Tabeling**, *Introduction to Microfluidics*, (Oxford University Press, London, 2005).
- [9] **H. Morgan and N.G. Green**, *AC Electrokinetics: Colloids and Nanoparticles*, (Research Studies Press, London, 2003).
- [10] **S. Quian and Y. Ai**, *Electrokinetic Particle Transport in Micro-Nanofluidics: Direct Numerical Simulation Analysis*, (CRC Press Taylor & Francis Group, New York, 2012).
- [11] **B. J. Kirby**, *Microscale and Nanoscale Fluid Mechanics: Transport in Microfluidics Devices*, (Cambridge University Press, Cambridge, 2010).
- [12] **J.E. Flores-Mena, P. García-Sánchez and A. Ramos**, *Phys. Rev. E* **99**, 99 (2019) 032603-1 032603-16.
- [13] **J.E. Flores-Mena, P. García-Sánchez and A. Ramos**, *Micromachines*, **11** (259) (2020).
- [14] **P. García-Sánchez, J.E. Flores-Mena and A. Ramos**, *Micromachines* **10**(2) 1-16 (2019).
- [15] **H. Fredriksson and U. Åkerlind**, *Physics of Functional Materials*, (John Wiley & Sons, Sussex, 2008).
- [16] **J. D. Jackson**, *Classical Electrodynamics*, Third Edition, (Wiley, New York, 1999).
- [17] **D.F. Young, B.R. Munson and T.H. Okiishi**, *A Brief Introduction to Fluid Mechanics*, (John Wiley & Sons Inc., New York, 2011).
- [18] **S. Dokos**, *Modelling Organs, Tissues, Cells and Devices using MATLAB and COMSOL Multiphysics*, (Springer, Berlín, 2017).
- [19] **J. Happel and H. Brenner**, *Low Reynolds Number Hydrodynamics: With Special Applications to Particle Media*, (Springer, Netherlands, 1981).