



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

Estudio Teórico y de Simulación de la Dielectroforesis de
Micropartículas Metálicas y Dieléctricas: Esferas y Varillas

Tesis presentada al

Colegio de Física

como requisito parcial para la obtención del grado de

LICENCIADO EN FÍSICA APLICADA

por

Carlos Raúl Hernández Moreno

Asesorado por

Dr. José Eladio Flores Mena

y

Dr. Benito Flores Desirena.

Puebla Pue.
5 de junio de 2024



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

Estudio Teórico y de Simulación de la Dielectroforesis de
Micropartículas Metálicas y Dieléctricas: Esferas y Varillas

Tesis presentada al

Colegio de Física

como requisito parcial para la obtención del grado de

LICENCIADO EN FÍSICA APLICADA

por

Carlos Raúl Hernández Moreno

Asesorado por

Dr. José Eladio Flores Mena

y

Dr. Benito Flores Desirena.

Puebla Pue.
5 de junio de 2024

Título: Estudio Teórico y de Simulación de la Dielectroforesis de
Micropartículas Metálicas y Dieléctricas: Esferas y Varillas

Estudiante: CARLOS RAÚL HERNÁNDEZ MORENO

COMITÉ

Dr. Roberto Ramírez Sánchez
Presidente

Dra. Honorina Ruíz Estrada
Secretario

Dra. Patricia Mendoza Méndez
Vocal

Dr. Antonio Michua Camarillo
Vocal

Dr. José Eladio Flores Mena
y
Dr. Benito Flores Desirena.
Asesores

Dedicatoria

Dedico con profundo agradecimiento este logro a mis padres y mi hermana, quienes han sido los pilares inquebrantables de mi vida. Su apoyo incondicional ha sido la luz que guía cada paso en mi camino.

Agradecimientos

Mi sincero agradecimiento al Dr. Eladio por su invaluable apoyo. Sus conocimientos, orientación y dedicación han sido fundamentales para alcanzar el éxito de este proyecto.

Índice general

Resumen	XV
Introducción	XVII
1. Marco Teórico	1
1.1. Microfluídica	1
1.2. Electromagnetismo	3
1.2.1. Electrostática	3
1.2.2. Tensor de esfuerzos de Maxwell	5
1.2.3. Ley de ohm	7
1.2.4. Electrostática en dieléctricos.	7
1.3. Hidrodinámica	12
1.3.1. Efecto de un fluido en una partícula en movimiento	14
1.4. Fenómenos electrocinéticos	14
1.4.1. La doble capa eléctrica	14
1.4.2. Electroósmosis	17
1.4.3. Electroforesis	18
1.4.4. Dielectroforesis	19
1.5. COMSOL Multiphysics	20
2. Dielectroforesis de una partícula metálica esférica	27
2.1. Planteamiento del problema	28
2.2. Dipolo Eléctrico Inducido	30
2.3. Dielectroforesis	31
2.4. Campo Eléctrico No Uniforme	33
2.5. Flujo electroosmótico	35
2.6. Dipoloforesis Esfera Metálica	36
2.6.1. Aproximaciones Analíticas	36
2.6.2. Aproximación del dipolo puntal	37
2.6.3. Aproximación del tensor de esfuerzos de Maxwell	37
2.7. Dielectroforesis Esfera Dieléctrica	37
3. Resultados de la dipoloforesis	39
3.1. Valores típicos y escalamiento	40
3.2. Dipoloforesis partículas metálicas	41
3.2.1. Esquema numérico en COMSOL	41
3.2.2. Esfera metálica	42
3.2.3. Varillas metálica	44
3.3. Comparación Dielectroforesis Metálicas y Dieléctricas	45
Apéndice A	53

.1. Constancia Congreso Nacional de Física, Morelia, Michoacán, 2023	53
Apéndice B	55
.2. Poster presentado Congreso Nacional de Física, Morelia, Michoacán, 2023	55
Apéndice C	57
.3. Certificado 31th International Materials Research Congress, August 13th to 18th, 2023.	57

Índice de figuras

1.1. Ejemplo sistema microfluídico: Réplica de PDMS obtenida tras litografía blanda y estructuras en espiga [10].	2
1.2. a) Muestra la fuerza eléctrica de dos cargas puntuales de signo contrario según la ecuación (1.1), con una distancia de separación entre las cargas q_1 y q_2 . b) Muestra la contribución a la fuerza eléctrica de un diferencial de volumen dV' de una distribución de carga volumétrica V' sobre una carga puntual q según la ecuación (1.2), donde \vec{r} es la posición de la carga puntual, \vec{r}' es la posición del diferencial de volumen, y \vec{R} es la diferencia entre las posiciones.	4
1.3. Representación de las líneas de campo eléctrico \vec{E} generadas por una carga puntual positiva, q , las líneas de campo eléctrico salen de ella, S es una superficie Gaussiana esférica (representada por líneas punteadas rojas) que rodea a la carga y es atravesada por las líneas de campo eléctrico.	6
1.4. Molécula de agua: está constituida por tres átomos, uno de oxígeno parcialmente negativo, y dos átomos de hidrógeno separados entre sí por 104.45° parcialmente positivos, con la diferencia de carga entre los átomos de hidrógeno y el de oxígeno se genera un dipolo con dirección del átomo de oxígeno hacia la mitad de la separación de los hidrógenos representado por la flecha verde.	10
1.5. Frontera entre las regiones 1 y 2 de diferente polarización. El campo eléctrico y el campo de desplazamiento en la transición de un medio a otro, cambia según las ecuaciones (1.29)	11
1.6. Doble capa eléctrica. Se muestra la doble capa eléctrica alrededor de un material sólido cargado negativamente en su superficie, la configuración de los iones del fluido es la siguiente: los iones positivos se acercan a la superficie del sólido generando una capa de un solo ion alrededor, capa de Stern, después se concentra una mayor cantidad de iones positivos un poco alejados de la superficie capa difusa, y después hay una misma cantidad de iones positivos y negativos donde el fluido es neutro [2, 3]	15
1.7. Flujo electroosmótico. Se muestra el flujo electroosmótico en un canal de hendidura con una carga superficial uniforme negativa.	17
1.8. Electroforesis. Se muestra el movimiento electroforético de una esfera cargada negativamente bajo el efecto de un campo eléctrico.	18
1.9. Dielectroforesis. Se muestra una dielectroforesis negativa de una partícula sin carga sujeta a un campo eléctrico no homogéneo.	19
1.11. Geometría. Pantallas para el control de la geometría, <i>a</i>) es la barra de las opciones de geometría, <i>b</i>) muestra las figuras básicas para generar el dibujo, <i>c</i>) las opciones para importar o exportar el dibujo, <i>d</i>) son las opciones del constructor de modelo para las figuras agregadas.	21
1.12. Propiedades del material. Pantallas para el control de las propiedades del material, se muestran <i>a</i>) las herramientas de los materiales, <i>b</i>) las opciones para agregar materiales en el modelo, <i>c</i>) se muestran las bibliotecas de materiales disponibles.	22

1.13. Pantallas para el control de la física del modelo. Se muestran las pantallas, <i>a</i>) las opciones para la física del modelo, <i>b</i>) son las opciones para agregar físicas, <i>c</i>) la selección de las condiciones de frontera en la geometría, <i>d</i>) son las opciones del constructor del modelo para la física del sistema, <i>e</i>) son las físicas disponibles para agregar al modelo.	23
1.14. Pantallas para el control del mallado, se muestran <i>a</i>) las opciones del mallado, <i>b</i>) las opciones para agregar y construir el mallado, <i>c</i>) son las opciones automáticas para generar el mallado, <i>d</i>) son las opciones para generar el mallado manualmente, <i>e</i>) son las opciones del mallado del constructor del modelo.	24
1.15. Pantallas para la simulación. Se muestran las opciones <i>a</i>) del control de los pasos de cálculo, <i>b</i>) son las opciones para agregar cálculo y hacer la simulación, <i>c</i>) son las opciones del resolvidor y las gráficas que se mostrarán, <i>d</i>) son las opciones para el control del algoritmo de solución y los pasos para simulación, <i>e</i>) son las opciones del estudio que da el constructor de modelo.	25
1.16. Pantallas para la visualización de datos, se muestran <i>a</i>) las herramientas de visualización y exportación de datos, <i>b</i>) son las opciones del tipo de gráfico a visualizar, <i>c</i>) son las opciones para el control de los parámetros de las gráficas, así como el análisis de los gráficos con cotes o puntos, y <i>d</i>) muestra los gráficos de la simulación y más opciones del constructor de modelo.	26
2.1. Los electrodos son electrodos esféricos, uno mayor que otro para producir un campo no homogéneo.	28
2.2. Micropartícula esférica inmersa en un campo eléctrico no uniforme [6]	35
3.2. Velocidad dielectroforética calculada por medio de tres aproximaciones, resultado teórico, dipolo puntual y por medio de usar el tensor de esfuerzos de Maxwell. . .	43
3.3. Velocidad dielectroforética (U_{DEP}) y electroosmótica inducida (U_{ICEO}) para una esfera metálica. Solución numérica y la solución teórica	43
3.4. Velocidad dipoloforética, U_{DIP} , para la solución numérica y la solución teórica . .	44
3.6. Velocidad dielectroforética para partículas dieléctricas esféricas con $\sigma_p > \sigma_m$ y $\epsilon_p < \epsilon_m$ en comparación con la velocidad dielectroforética para esferas metálicas.	46
3.7. Velocidad dielectroforética para partículas dieléctricas esféricas con $\sigma_p < \sigma_m$ y $\epsilon_p > \epsilon_m$ en comparación con la velocidad dielectroforética para esferas metálicas.	47

Índice de tablas

1.1. Parámetros físicos y electroquímicos utilizados para conducir los fenómenos electrocinéticos. [9]	2
1.2. Esta tabla muestra algunas de las aplicaciones de la microfluídica donde destaca el lab on chip y las técnicas de separación de micropartículas [11, 12, 13, 14].	3
3.1. Dielectroforesis de una micropartícula metálica	40
3.2. Dielectroforesis de una micropartícula dieléctrica. Se toman dos sustancias: KCl disuelto en agua, y acetona disuelta en agua para asegurar que la permitividad de la partícula sea en un caso mayor a la del medio y en otro caso menor [22].	40

Resumen

En este trabajo de tesis se presenta un estudio de la dielectroforesis de partículas esféricas y varillas, tanto metálicas como dieléctricas. La dielectroforesis consiste en la interacción del dipolo inducido en micropartículas con el campo eléctrico no uniforme, lo cual origina una fuerza llamada dielectroforética que depende fuertemente de la constante dieléctrica de la partícula y del medio donde está inmersa. En partículas metálicas, el dipolo inducido es debido a la polarización de la carga libre, mientras que, en las partículas dieléctricas, el dipolo inducido se debe a la carga ligada. En ambos casos, el dipolo inducido interactúa con el campo eléctrico no homogéneo por el acoplamiento entre el dipolo y el gradiente del campo eléctrico aplicado. Otro efecto también presente es el llamado flujo electroosmótico alrededor de las partículas, el cual se debe a que se induce una doble capa eléctrica a su alrededor, la interacción de esta doble capa con el campo eléctrico produce un flujo electroosmótico a su alrededor, el cual ejerce una fuerza llamada electroosmótica. En el caso de las partículas dieléctricas, esta es extremadamente pequeña y en general no se considera en los estudios de dielectroforesis de partículas dieléctricas, pero el caso de partículas metálicas, la fuerza electroosmótica sí es considerable.

Las aplicaciones de la dielectroforesis están en la manipulación y caracterización de partículas. En particular, en la manipulación de células, bacterias y virus que son entes relevantes en la medicina.

La fuerza dielectroforética en ambos tipos de partículas (metálicas y dieléctricas), la calculamos por medio de la aproximación de dipolo puntual y la aproximación del tensor de esfuerzos de Maxwell. Se encuentra que ambos resultados coinciden en ambas aproximaciones, para esto consideramos la aproximación de doble capa eléctrica delgada, lo que nos permite incorporar la información de la doble capa eléctrica como una condición de frontera, y de este modo, en lugar de resolver la ecuación de Poisson, resolvemos la ecuación de Laplace para obtener el potencial eléctrico. Mientras que, la contribución del flujo electroosmótico lo determinamos por nuestro esquema, basado en el teorema de reciprocidad, por medio del cual obtenemos una expresión donde se acoplan: el Tensor de esfuerzos hidrodinámico y la velocidad de deslizamiento de la micropartícula; además, en esta expresión obtenemos una manera de calcular el coeficiente de fricción viscoso de la partícula, para esto se resuelve la ecuación de Navier-Stokes para flujo laminar.

Encontramos que nuestros resultados de simulación numérica, en ambos casos son validados por expresiones analíticas para el caso de esferas metálicas, en cuanto a los resultados para nanovarillas metálicas, su validación está en que nuestro marco de trabajo reproduce muy bien los valores de los coeficientes de fricción viscosos.

Finalmente, hacemos un estudio numérico con expresiones bien conocidas para partículas dieléctricas con pérdidas óhmicas y se contrastan con los de esferas metálicas. Se encuentra que en ambos tipos de partículas está presente la dielectroforesis negativa (nDEP) y dielectroforesis positiva (pDEP), pero en dielectroforesis de esferas dieléctricas, la aparición de nDEP y pDEP a frecuencias bajas o altas dependen de las combinaciones de las conductividades eléctricas de la partícula y el medio, y de las permitividades eléctricas. Se encuentra que el tiempo característico que define la formación del dipolo eléctrico inducido para la interfase dieléctrica es menor que el tiempo característico de la interfaz en partículas metálicas, es decir, $\tau < \tau_{RC}$.

Introducción

La materia se encuentra fundamentalmente en tres fases, sólida, líquida y gaseosa. La fase sólida ha sido ampliamente estudiada en física del estado sólido, en esta fase, se presentan los átomos o moléculas en forma ordenada y amorfa. Se han desarrollado métodos para su estudio que llevan al concepto de celda unitaria, lo cual facilita el estudio de la fase sólida, mientras que, en la fase gaseosa de la materia, los átomos o moléculas se encuentran distribuidos de manera aleatoria, de tal manera que, los métodos de la física estadística y termodinámica, nos han permitido comprender los fenómenos en esta fase. Sin embargo, la fase líquida, es un estado intermedio entre estas fases, en la cual no es posible aplicar los métodos de las fases anteriormente descritos, ya que, las moléculas y los átomos no están en forma ordenada como en la fase sólida, ni se encuentran azarosamente distribuidos como en la fase gaseosa. Así, ha sido mostrado que los fenómenos asociados a la fase líquida deben ser tratados como un problema de muchos cuerpos, la teoría de funciones de distribución resuelve este problema por medio de la ecuación de Orstein-Zernike [1, 2].

En la fase líquida se distinguen diversos sistemas acuosos. En la naturaleza y en la tecnología, se encuentran sistemas acuosos de diversas características; aquí mencionamos solo algunos. Los átomos o moléculas que componen a un líquido pueden estar cargados o bien inducirse carga en estos entes elementales, así aparecen los fluidos cargados dentro de los cuales sobresalen los electrolitos, las sales fundidas, los coloides y las suspensiones de partículas. En las soluciones electrolíticas, las moléculas de agua (solvente) son del orden de 3Å mientras que los iones (solute), su tamaño es del mismo orden de magnitud. En los coloides, las partículas suspendidas son del orden de 100Å hasta $1\mu\text{m}$. Y en las suspensiones de partículas, las macro partículas son de $2\mu\text{m}$ en adelante, en estas el efecto Browniano no es relevante [3].

En las suspensiones de partículas aparecen los llamados fenómenos electrocinéticos: doble capa eléctrica (EDL por sus siglas en inglés), es una capa de carga eléctrica de iones libres que aparece en la región cercana a la superficie de las partículas. La electroósmosis es el fenómeno que consiste en que los iones libres en la doble capa son actuados por un campo eléctrico externo, con lo cual se mueven y arrastran al líquido donde están inmersos. El conjunto de este movimiento se llama flujo electroosmótico. La electroforesis es el fenómeno asociado a la interacción entre un campo eléctrico aplicado sobre las partículas de la suspensión y al movimiento de estas. Se mueven con cierta velocidad que se llama velocidad electroforética. El fenómeno de electrorotación, consiste en que a las micropartículas se les induce un dipolo debido a la interacción de un campo eléctrico rotante, ahora, la interacción entre este dipolo inducido y el campo eléctrico rotante, da origen a la aplicación de un torque eléctrico sobre la micropartícula, provocando que las micropartículas roten, si además, estas micropartículas están inmersas en una solución acuosa se induce una doble capa alrededor de ellas, así, la carga libre de iones al rededor se ven afectadas por el campo eléctrico externo y se produce un flujo electroosmótico alrededor, este flujo aplica otro torque sobre las micropartículas y se le llama torque electroosmótico debido a carga inducida (Torque ICEO). Finalmente, el fenómeno de dielectroforesis, se debe a que un campo eléctrico externo

aplicado, y no homogéneo induce un dipolo eléctrico sobre las micropartículas, la interacción de este dipolo inducido con el campo eléctrico aplicado, da origen a una fuerza, conocida como fuerza dielectroforética, y en condiciones estacionarias, la partícula se mueve con una velocidad constante conocida como velocidad dielectroforética [3, 4].

La dielectroforesis es utilizada como una técnica para separar y manipular micropartículas, en las aplicaciones tecnológicas como la microfluídica. La dielectroforesis permite la separación de partículas en función de sus propiedades eléctricas bajo la influencia de un campo eléctrico no uniforme. En la dielectroforesis, las partículas suspendidas en un fluido se polarizan en respuesta al campo eléctrico, y se mueven debido a la fuerza eléctrica entre el dipolo y el campo. Las partículas con propiedades eléctricas distintas responden de manera variada al campo eléctrico, lo que ocasiona que se desplacen a diferentes velocidades. Esta distinción es la herramienta principal de la dielectroforesis para la separación de partículas[5].

La dielectroforesis en dieléctricos se produce cuando las partículas dieléctricas se mueven gracias a la influencia de un campo eléctrico, el cual induce un dipolo, la fuerza presente en el caso de dieléctricos es proporcional a la polarizabilidad, una propiedad que se refiere a la capacidad de polarizarse en presencia de un campo eléctrico, las partículas con mayor polarizabilidad que el medio acuoso, son atraídas a las regiones de mayor campo eléctrico, y las partículas con menor polarizabilidad que las del medio acuoso, son atraídas a las regiones con menor campo. La dielectroforesis de partículas dieléctricas tiene diversas aplicaciones en la manipulación y separación de partículas como lo son partículas biológicas (células y virus) [5].

Inicialmente, el fenómeno de dielectroforesis fue estudiado en partículas dieléctricas inmersas en una solución acuosa, y estos resultados fueron aplicados en la tecnología para efectos de separación de micropartículas por sus diferentes velocidades dielectroforéticas. En este trabajo de tesis nos proponemos a estudiar el fenómeno de dielectroforesis, pero considerando partículas metálicas y hacemos un estudio comparativo entre la dielectroforesis en micropartículas esféricas, dieléctricas y conductoras para resaltar las diferencias, también nos proponemos a estudiar la dielectroforesis de partículas metálicas en forma de nanovarillas. Finalmente, para esto, resolvemos la ecuación de Laplace y de Navier-Stokes, y calculamos la fuerza dielectroforética entre el dipolo inducido y el campo aplicado por medio de dos aproximaciones: la aproximación de dipolo puntual y el tensor de esfuerzos de Maxwell. Mientras que la interacción del flujo electroosmótico inducido, lo calculamos aplicando el teorema de reciprocidad para fluidos [6].

En la microfluídica, hay muchos problemas que no es posible resolverlos de forma analítica, es por ello que se usan aproximaciones o se recurre a soluciones numéricas. Un software útil para simular estos sistemas microfluídicos es COMSOL Multiphysics, es un software de simulación avanzado que utiliza el método de elementos finitos para resolver sistemas físicos complejos en una amplia gama de campos, entre ellos microfluídica [7, 8].

Esta tesis estudia la dielectroforesis de micropartículas esféricas metálicas inmersas en una solución electrolítica, por medio de la ecuación de Poisson, Navier-Stokes y el Teorema de reciprocidad de fluidos. De los siguientes objetivos, todos se han cumplido:

Objetivo general:

Describir el fenómeno de dipoloforesis de una micropartícula esférica metálica, sometida a la acción de un campo eléctrico no uniforme, y su interacción con el flujo electroosmótico.

Objetivos específicos:

1. Calcular numéricamente, usando el software COMSOL Multiphysics, la velocidad de la micropartícula esférica por medio de la aproximación de dipolo puntual, y del teorema de reciprocidad de fluidos.
2. Calcular la velocidad de la micropartícula esférica por medio del tensor de esfuerzos de Maxwell, y del teorema de reciprocidad de fluidos.
3. Calcular la velocidad de la nano varilla por medio del tensor de esfuerzos de Maxwell, y del teorema de reciprocidad de fluidos.
4. Comparar la velocidad de la micropartícula de manera analítica con las aproximaciones numéricas, mencionadas en los puntos 1 y 2.
5. Realizar un análisis comparativo entre las velocidades dielectroforéticas de micropartículas esféricas, dieléctricas y metálicas.
6. Publicar los resultados en un congreso o foro.

El presente documento está estructurado de la siguiente manera para una mejor lectura: El capítulo 1, se centra en los conceptos y teorías utilizadas para el desarrollo de la presente tesis. En seguida, en el capítulo 2, se presenta la teoría y métodos para la obtención de los resultados que se plantean en los objetivos. Mientras que, en el capítulo 3, se presentan los resultados de las cantidades obtenidas relevantes para el presente estudio, y una descripción de los mismos. Finalmente, se presenta una sección de conclusiones de lo más relevante de este trabajo de tesis.

Capítulo 1

Marco Teórico

1.1. Microfluídica

La microfluídica se define como una disciplina enfocada en el estudio y la manipulación de fluidos dentro de estructuras con dimensiones micrométricas más grandes que $1\mu m$ y más pequeñas que $1mm$ [9].

Los sistemas microfluídicos están formados por canales microfluídicos, que son estructuras que tienen dimensiones en el rango de micrómetros. Estos canales pueden tener formas y diseños diversos, y pueden ser fabricados con diferentes materiales, como silicona, vidrio y polímeros. Los canales microfluídicos se utilizan para manipular fluidos, como líquidos y gases, en escalas micrométricas. Los sistemas microfluídicos están formados por flujos microfluídicos que se caracterizan por ser laminados, es decir, que las partículas del fluido siguen trayectorias suaves y predecibles, y su movimiento no es turbulento.

Se presenta la Tabla 1.1 que muestra los valores típicos de los parámetros físicos y electroquímicos utilizados para conducir los fenómenos electrocinéticos en micro fluidos.

En las últimas décadas, los sistemas micro electromecánicos (MEMS) han sido uno de los mayores avances tecnológicos que han revolucionado numerosas disciplinas. Estos sistemas se originaron a partir de las tecnologías de fabricación de circuitos integrados, pero han evolucionado a un conjunto de técnicas diversas que involucran disciplinas como la química, la biología y la física. Los MEMS inicialmente fueron desarrollados en la década de 1960 como una extensión de la tecnología de los semiconductores.

Los dispositivos MEMS son dispositivos de dimensiones micrométricas que convierten las entradas en salidas, que pueden ser cargas eléctricas, señales analógicas o digitales, o movimiento mecánico o fluídico. Aquí es donde entra la disciplina de la microfluídica, a diferencia de los sistemas puramente mecánicos, la ventaja que se encuentra en los sistemas microfluídicos en comparación, es que sufren menos desgaste, lo que aumenta su vida útil, también al ser puramente diseñados a la manipulación de líquidos y gases, en escalas micrométricas, son ideales para aplicaciones en biología, química y medicina [9].

Parámetro	Rango del Parámetro
Grosor típico del Canal, h (μm)	0.01 \sim 300
Concentración del electrolito, n_0 ($mMoles$)	10 \sim 0.001
Longitud de Debye κ^{-1} (nm)	1 \sim 100
Potencial Zeta, ζ (mV)	$\pm 1 \sim \pm 100$
Campo Eléctrico, E_{0z} (V/mm)	1 \sim 100
Velocidad Electroosmótica	< 2
Número de Reynolds, Re	$10^{-4} \sim 1$

Tabla 1.1: Parámetros físicos y electroquímicos utilizados para conducir los fenómenos electrocinéticos. [9]

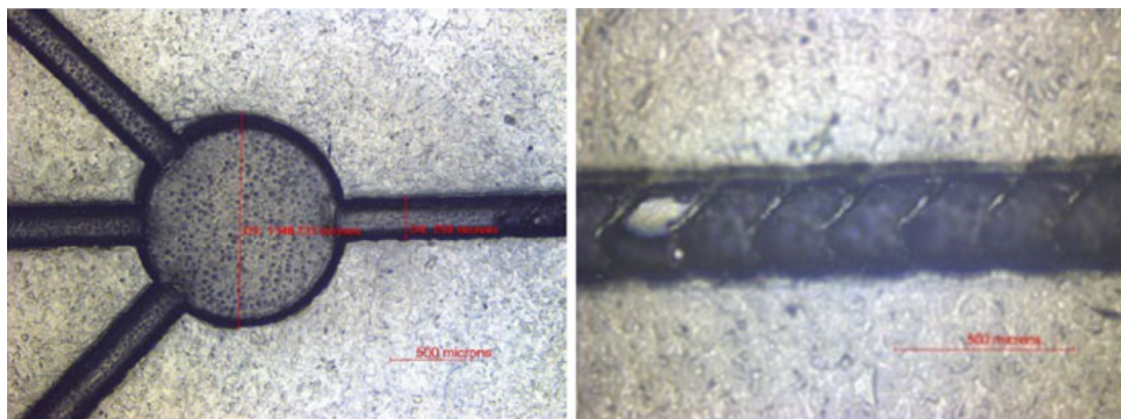


Figura 1.1: Ejemplo sistema microfluídico: Réplica de PDMS obtenida tras litografía blanda y estructuras en espiga [10].

Los sistemas microfluídicos se centran en la manipulación precisa de fluidos en estructuras de tamaño micrométrico, típicamente en el rango de $1\mu m$ a $1mm$. Estas estructuras microfluídicas permiten canalizar, mezclar, separar y controlar el flujo de líquidos o gases en dimensiones a escala microscópica. Al operar en este rango de tamaño, los sistemas microfluídicos ofrecen diversas ventajas en términos de control, precisión y eficiencia en la manipulación de fluidos. La microfluídica, por tanto, se utiliza en combinación con los MEMS para diseñar dispositivos miniaturizados que permiten realizar análisis y procesamientos de muestras líquidas en sistemas compactos y portátiles [9].

La integración de varios micro componentes MEMS y de microfluídica en un solo dispositivo, conocido como “lab on a chip”, es uno de los principales objetivos de los MEMS. Estos dispositivos son capaces de realizar múltiples análisis, manipulaciones y procesamientos en una sola plataforma, lo que los hace muy útiles en aplicaciones de diagnóstico, bioquímica, farmacología y otros campos de la biomedicina, como ejemplo de esto en la figura 1.1 mostramos un dispositivo microfluídico [11].

Debido a su tamaño y bajo costo de fabricación, los MEMS tienen un gran potencial para mejorar la eficiencia y reducir los costos en los procedimientos de diagnóstico y tratamiento médico. La tabla 1.2 muestra algunas aplicaciones de la microfluídica y una breve descripción de esta aplicación.

Áreas de Aplicación	Descripción
Diagnóstico Médico/Clínico	Contribuye a técnicas avanzadas de diagnóstico médico en escalas microfluídicas.
Análisis Biológico	Utilizado para análisis detallados de componentes biológicos en sistemas microfluídicos.
Síntesis Química	Facilita procesos de síntesis química en entornos microfluídicos precisos y controlados.
Descubrimiento de Fármacos	Apoya la investigación y desarrollo eficiente de nuevos medicamentos mediante micro dispositivos.
Secuenciación de Genes	Contribuye a técnicas de secuenciación de genes en escalas microfluídicas.
Técnicas de Bio separación en Micro escalas	Utilizado para separación de componentes biológicos en pequeñas escalas mediante las técnicas de Electroforesis y Dielectroforesis
Dispositivos Bio analíticos Ultrasensibles	Aplicaciones avanzadas para la detección precisa de bio moléculas y análisis bioquímicos reproduciendo la tecnología de laboratorio en un dispositivo a escala de chip en miniatura (Lab On Chip).
Vigilancia de la Contaminación	Contribuye a sistemas de monitoreo para la detección temprana y el control de la contaminación.
Detección de Riesgos Biológicos	Aplicado en la identificación y evaluación de riesgos biológicos en entornos específicos.

Tabla 1.2: Esta tabla muestra algunas de las aplicaciones de la microfluídica donde destaca el lab on chip y las técnicas de separación de micropartículas [11, 12, 13, 14].

1.2. Electromagnetismo

1.2.1. Electrostática

La electrostática estudia el comportamiento de las cargas, y campos eléctricos en estados estacionarios, esto es, cuando no cambian en el tiempo.

Tiene fundamento en dos postulados, el principio de superposición, que establece que la interacción entre dos partículas cargadas no es afectada por la presencia de otra, y la ley de Coulomb, que describe la fuerza entre dos cargas [15, 16, 17, 18].

La fuerza que produce una carga puntual estacionaria q_1 sobre una segunda carga puntual estacionaria q_2 está descrita por la fuerza de Coulomb:

$$\vec{F}_{1,2} = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 R^2} \hat{R} \quad (1.1)$$

donde $\vec{F}_{1,2}$ es la fuerza eléctrica de la carga puntual q_2 ubicada en \vec{r}' sobre la carga puntual q_1 ubicada en \vec{r} ; $\vec{R} = \vec{r} - \vec{r}'$ y $R^2 = |\vec{R}|^2$, y ϵ_0 es la constante de permitividad eléctrica del vacío¹.

La fuerza que siente una carga puntual q debido a una distribución de carga continua volumétrica V' , generalizando la fuerza de Coulomb, se puede escribir como:

¹La permitividad eléctrica del vacío es una propiedad intrínseca del espacio vacío y establece la relación entre la intensidad de un campo eléctrico en el vacío y la carga eléctrica que lo genera, generalmente se representa por ϵ_0 , y tiene un valor numérico de 8.854×10^{-12} Farads/m

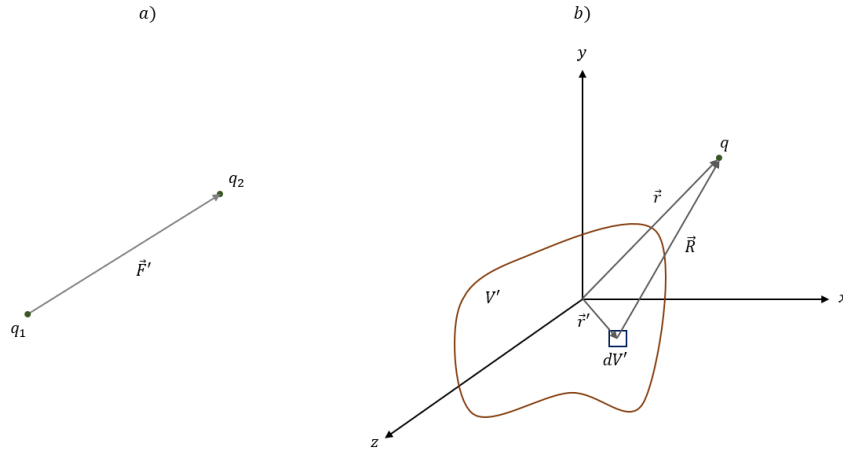


Figura 1.2: a) Muestra la fuerza eléctrica de dos cargas puntuales de signo contrario según la ecuación (1.1), con una distancia de separación entre las cargas q_1 y q_2 . b) Muestra la contribución a la fuerza eléctrica de un diferencial de volumen dV' de una distribución de carga volumétrica V' sobre una carga puntual q según la ecuación (1.2), donde \vec{r} es la posición de la carga puntual, \vec{r}' es la posición del diferencial de volumen, y \vec{R} es la diferencia entre las posiciones.

$$\vec{F} = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \int_{V'} \frac{\rho(\vec{r}') \hat{R} dV'}{R^2} \quad (1.2)$$

donde \vec{F} es la fuerza eléctrica de una distribución de carga volumétrica V' ubicada en \vec{r}' sobre una carga puntual q ubicada en \vec{r} ; $\vec{R} = \vec{r} - \vec{r}'$ y $R^2 = |\vec{R}|^2$, ρ es la densidad volumétrica de carga, y ϵ_0 es la constante de permitividad eléctrica del vacío. Se muestra un diagrama de las fuerzas de una partícula puntual y una distribución de carga en la figura 1.2

El campo eléctrico se define como la fuerza por unidad de carga que produce la fuerza de Coulomb sobre una carga de prueba positiva de unidad arbitraria ($1C$). Se puede obtener a partir de la Ley de Coulomb como:

$$\vec{E}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_{V'} \frac{\rho(\vec{r}') \hat{R} dV'}{R^2} \quad (1.3)$$

De estos resultados se encuentra la Ley de Gauss, que es equivalente a la ley de Coulomb. Establece que el flujo eléctrico total que atraviesa una superficie cerrada es igual a la carga encerrada dividida por la constante de permitividad eléctrica o equivalentemente, la divergencia del campo eléctrico es igual a la densidad de carga dividido por la permitividad eléctrica. La figura 1.3 muestra las líneas de campo generadas por una carga puntual y una representación de una superficie Gaussiana esférica que la rodea.

Ley de Gauss en forma integral.

$$\oint_S \vec{E} \cdot d\vec{a} = \frac{Q_{en}}{\epsilon_0} \quad (1.4)$$

Ley de Gauss en forma diferencial

$$\nabla \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (1.5)$$

El campo eléctrico es un campo conservativo, por lo cual es el gradiente de un escalar, este escalar se conoce como potencial electrostático se define como:

$$\Phi(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_{V'} \frac{\rho(\vec{r}') dV'}{R} \quad (1.6)$$

El campo eléctrico en términos del potencial electrostático es:

$$\vec{E}(\vec{r}) = -\nabla\Phi(\vec{r}) \quad (1.7)$$

De la ley de Gauss en forma diferencial (1.5), y (1.7) se obtiene la ecuación diferencial conocida de Poisson:

$$\nabla^2\Phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (1.8)$$

Esta ecuación diferencial es válida en todo el espacio, en el caso especial en que en el espacio no hay carga, es decir, la densidad de carga es cero, se obtiene la ecuación diferencial de Laplace que es de la forma:

$$\nabla^2\Phi = 0 \quad (1.9)$$

La ecuación de Laplace, reduce los cálculos en ciertas regiones del espacio, ya que el laplaciano del potencial eléctrico, es cero en cualquier región del espacio donde no exista carga.[15, 17, 18]

1.2.2. Tensor de esfuerzos de Maxwell

Como parte importante de este trabajo de tesis concerniente a los objetivos, es el cálculo de la fuerza dielectroforética mediante el tensor de esfuerzos de Maxwell.

El tensor de esfuerzos de Maxwell es una herramienta utilizada para describir y analizar las interacciones electromagnéticas en un medio material. Es una generalización del tensor de esfuerzos utilizado en la mecánica de sólidos.

Es una matriz simétrica de segundo orden que relaciona las componentes del campo electromagnético con las fuerzas y momentos electromagnéticos en un medio material. Estas componentes se derivan de las ecuaciones de Maxwell y contienen información sobre la energía y el momento electromagnético que se transmiten y se intercambian dentro del medio.

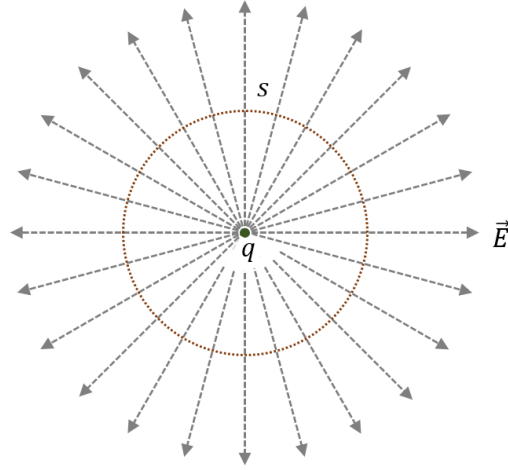


Figura 1.3: Representación de las líneas de campo eléctrico \vec{E} generadas por una carga puntual positiva, q , las líneas de campo eléctrico salen de ella, S es una superficie Gaussiana esférica (representada por líneas punteadas rojas) que rodea a la carga y es atravesada por las líneas de campo eléctrico.

Tiene nueve componentes principales, que representan las fuerzas y los momentos electromagnéticos en las tres direcciones espaciales. Estas componentes están relacionadas con las derivadas de los campos eléctricos y magnéticos, así como con las propiedades del medio material en el que se encuentra el campo electromagnético.

El tensor esfuerzos de Maxwell se define como [2, 17]

$$\mathbf{T} = \epsilon \left[\vec{E}\vec{E} + c^2 \vec{B}\vec{B} - \frac{1}{2} (\vec{E} \cdot \vec{E} + c^2 \vec{B} \cdot \vec{B}) \hat{I} \right] \quad (1.10)$$

donde ϵ es la constante de permitividad eléctrica del material, c es la velocidad de la luz en el vacío, y \hat{I} es la Matriz identidad 3×3 .

En el caso de las micropartículas que se consideran en este trabajo de tesis, los efectos del campo magnético son muy pequeños, y, por tanto, despreciables, entonces la expresión para el tensor de esfuerzos de Maxwell sin efecto magnético es la siguiente:

$$\mathbf{T} = \epsilon \left[\vec{E}\vec{E} - \frac{1}{2} E^2 \hat{I} \right] \quad (1.11)$$

donde E^2 es la magnitud cuadrada del campo eléctrico, e \hat{I} es la matriz identidad.

La fuerza que experimenta un cuerpo se puede obtener mediante

$$\vec{F} = \oint_S \mathbf{T} \cdot d\vec{s} = \oint_S \epsilon \left[\vec{E}\vec{E} - \frac{1}{2} E^2 \hat{I} \right] \cdot d\vec{s} \quad (1.12)$$

donde S es la superficie del cuerpo, $d\vec{s}$ es el vector diferencial de superficie. La fuerza descrita por la expresión anterior se usará para el cálculo de la fuerza electroforética [17].

1.2.3. Ley de ohm

Otra expresión importante para el desarrollo de este trabajo de tesis, es la ley de Ohm, esta ley describe el movimiento de la carga causado por la aplicación de un campo eléctrico, en muchos casos es proporcional al campo, esta relación en forma general es:

$$\vec{J} = \sigma \vec{E} \tag{1.13}$$

donde \vec{J} es la densidad de corriente, es decir, la densidad volumétrica de carga multiplicada por la velocidad $\vec{J} = \rho \vec{v}_c$ y σ es la conductividad eléctrica, entonces:

$$\sigma = \rho \frac{|\vec{v}_c|}{|\vec{E}|} = \rho \mu = (nq)\mu \tag{1.14}$$

donde q es la carga, μ es la movilidad de la carga en el campo eléctrico, y n es el número de densidad de carga [3, 17, 18, 19].

1.2.4. Electroestática en dieléctricos.

Se considera que la materia está formada por partículas cargadas, positiva y negativamente, debido a que está formada por electrones y los núcleos, la primera suposición es que la materia es aquella que está formada por moléculas que tienen igual cantidad de cargas positivas y negativas.

La materia se puede dividir en dos grupos: en conductores, que tienen cargas libres de moverse en presencia de campos, y no conductores o dieléctricos, en estos, se dice que tienen una carga ligada.

Los dieléctricos se dividen en dos, los no polares, en los cuales, sus moléculas se consideran partículas cargadas puntuales, y los polares, en los cuales sus moléculas se consideran dipolos eléctricos puntuales².

Existen muchas moléculas que presentan dipolos permanentes con distintos tamaños, desde muy pequeños como las moléculas de agua, con un momento de $|\vec{p}| = 1.8D$ (1.8 Debye³), la figura 1.4 muestra una molécula de agua con su momento dipolar permanente, o las moléculas de albúmina sérica una proteína presente en la sangre de los mamíferos con un momento dipolar $|\vec{p}| = 380D$. En el ejemplo de la molécula de agua, está compuesta por dos átomos de Hidrógeno y uno de Oxígeno, las dos de hidrógeno están junto a la de oxígeno formando un ángulo de 106°, en esta, el oxígeno es negativo, mientras que los hidrógenos son positivos, entonces aparece un momento dipolar que

²Un dipolo eléctrico es un sistema compuesto por dos cargas eléctricas iguales pero de signo opuesto, separadas por una distancia d . El dipolo puntual es cuando la distancia de separación d es muy pequeña

³El Debye es una unidad común de momento dipolar eléctrico, es igual a $3.33564 \times 10^{-30} C \cdot m$, esta unidad no pertenece al sistema internacional

va desde el oxígeno hasta el punto medio de los hidrógenos, este dipolo es permanente, pues la estructura de la molécula no cambia [3].

Estadísticamente, en la materia, hay una distribución de cargas homogénea, con lo que la carga medida será $\langle q \rangle = \langle \sum q_i \rangle$, y el momento dipolar medido \vec{p} , en el caso de dieléctricos polares, será $\langle \vec{p} \rangle = \langle \sum \vec{p}_i \rangle$. Cuando un dieléctrico, en un principio descargado y con momento dipolar nulo⁴, es sometido a la presencia de un campo eléctrico, sus moléculas se ven afectadas por este campo, y sufren un desplazamiento dando origen a una nueva configuración en la cual aparecerá un momento dipolar no nulo, en el caso de los dieléctricos no polares, sus cargas al no ser libres, sus moléculas sufren un desplazamiento de su centro de gravedad, y en el caso de dieléctricos polares, sus dipolos puntuales se ordenan en dirección del campo eléctrico (en medios i.h.)⁵. A una partícula que realiza este proceso se dice que se polariza [2, 18, 19, 20].

El comportamiento de las moléculas es diferente para cada dieléctrico y es afectado por otros factores como la temperatura, los mismos dipolos y multipolos de orden superior. En un estudio macroscópico de este fenómeno, se considera que la única contribución es de los dipolos eléctricos.

Se define el momento dipolar como un vector que aparece cuando hay dos cargas iguales q pero de signo opuesto, separadas por una distancia d , con dirección de la carga negativa a la positiva, tal que:

$$\vec{p} = q\vec{d} \quad (1.15)$$

La contribución dipolar en términos del momento dipolar es

$$\Phi_D(\vec{r}) = \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{4\pi\epsilon_0 r^3} = \frac{\vec{p} \cdot \hat{r}}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{|\vec{p}| \cos \theta}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (1.16)$$

Esta expresión es válida para distancias $r \gg d$. Por otro lado, el campo eléctrico producido por un dipolo eléctrico es

$$\vec{E} = \frac{|\vec{p}|}{4\pi\epsilon_0 r^3} \left(2 \cos \theta \hat{r} + \sin \theta \hat{\theta} \right) \quad (1.17)$$

Un dipolo dentro de un campo eléctrico externo, sufre una fuerza debido a este campo [17], esto está descrito por la siguiente expresión:

$$\vec{F} = (\vec{p} \cdot \nabla) \vec{E} \quad (1.18)$$

Debido a las propiedades del gradiente, al ser un vector de derivadas parciales en el espacio, se tiene que la fuerza se hace cero si el campo eléctrico es constante en algún punto, ya que el campo no varía en el espacio; entonces para qué la fuerza que produce un campo eléctrico sobre

⁴En el caso de dieléctricos polares, los dipolos puntuales, están distribuidos de forma homogénea de modo que su promedio es cero $0 = \langle \sum \vec{p}_i \rangle$

⁵Los dieléctricos isotrópicos, homogéneos y lineales (i.h.l.): son lineales, ya que hay una relación lineal entre las componentes de P y E , isotrópicos porque en cualquier punto, sus propiedades eléctricas son independientes a la dirección del campo \vec{E} , y homogéneos porque sus propiedades eléctricas son independientes a la posición.

un dipolo no sea nula, es necesario que el campo eléctrico no sea constante. Esta expresión es la fuerza dielectroforética, y es muy importante en este trabajo de tesis.

Cuando un dipolo está en un campo eléctrico externo uniforme, es decir, constante, en este caso el dipolo experimenta una fuerza igual y opuesta, lo que ocasiona que se alinee paralelamente al campo. Dado que el dipolo no tiene carga neta, el dipolo no experimentará una fuerza, pero aparecerá un torque dado por

$$\vec{\Gamma} = \vec{p} \times \vec{E} \quad (1.19)$$

Se define la polarización \vec{P} como el momento dipolar por unidad de volumen, tal que

$$\vec{p}_{\text{total}} = \int_V \vec{P}(\vec{r}) dV \quad (1.20)$$

El promedio del momento dipolar de las moléculas en un material es proporcional al campo eléctrico, tal que

$$\langle \vec{p} \rangle = \alpha \vec{E} \quad (1.21)$$

En el caso de un dieléctrico de n moléculas por metro cúbico, la polarización \vec{P} es

$$\vec{P} = n \langle \vec{p} \rangle = n\alpha \vec{E} \quad (1.22)$$

donde α es la polarizabilidad del material.

El proceso de polarización, está relacionado con la polarizabilidad y tiene varios mecanismos, entre estos se encuentra la polarización eléctrica, que se produce por la influencia del campo eléctrico externo puramente; la polarizabilidad atómica, que son pequeños movimientos de las cargas causadas por los átomos; y la polarizabilidad orientacional, que es debido a la alineación de los átomos en moléculas que generan dipolos permanentes como las moléculas de agua [18].

El proceso de polarización, involucra el movimiento de cargas, y este es un movimiento finito, como consecuencia, cada mecanismo de polarización tiene diferentes tiempos asociados, a estos tiempos se les conoce como tiempos de relajación. *Entonces, cuando se aplican campos de corriente alterna, en bajas frecuencias, los dipolos tienen el tiempo suficiente para terminar el proceso de polarización, y se alienan con el campo, pero en frecuencias altas, si la frecuencia supera al tiempo de relajación, la polarización no ocurre*[3].

Ahora, volviendo al desarrollo teórico de la polarización, utilizando la definición de polarización (1.20) y el potencial (1.16), tenemos que:

$$d\Phi = \frac{d\vec{p}' \cdot \hat{R}}{4\pi\epsilon_0 R^2} = \frac{\vec{P}(\vec{r}') \cdot \hat{R} dV'}{4\pi\epsilon_0 R^2} \quad (1.23)$$

el potencial eléctrico es entonces

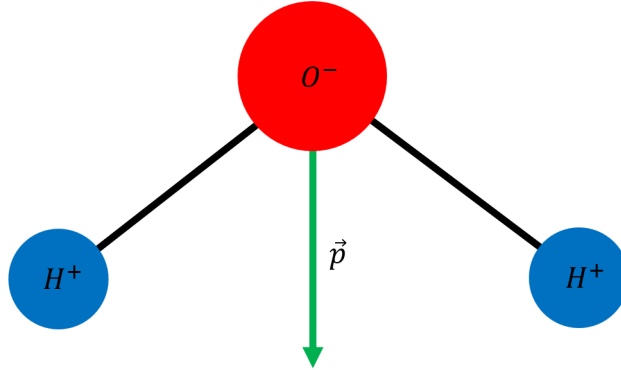


Figura 1.4: Molécula de agua: está constituida por tres átomos, uno de oxígeno parcialmente negativo, y dos átomos de hidrógeno separados entre sí por 104.45° parcialmente positivos, con la diferencia de carga entre los átomos de hidrógeno y el de oxígeno se genera un dipolo con dirección del átomo de oxígeno hacia la mitad de la separación de los hidrógenos representado por la flecha verde.

$$\Phi(\vec{R}) = \int_{V'} \frac{\vec{P}(\vec{r}') \cdot \hat{R} dV'}{4\pi\epsilon_0 R^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_{V'} \frac{(-\nabla' \cdot \vec{P})}{R} dV' + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \oint_{S'} \frac{\vec{P} \cdot \hat{n}' da'}{R} \quad (1.24)$$

este es el potencial que produce una densidad de carga volumétrica ρ_b y una densidad superficial σ_b , el subíndice b refiere a que las densidades son densidades de carga ligada. La densidad de carga volumétrica es

$$\rho_b = -\nabla \cdot \vec{P} \quad (1.25)$$

la densidad de carga total se puede ver como la suma de las cargas libres y las cargas ligadas, de esta manera, $\rho = \rho_l + \rho_b = \rho_l - \nabla \cdot \vec{P}$, sustituyendo la ley de Gauss en su forma diferencial (1.5) resulta que

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho_l \quad (1.26)$$

conocida como ecuación de Poisson para el campo de desplazamiento \vec{D} donde $\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}$.

En medios i.h.l, la polarización inducida, es paralela al campo eléctrico con un coeficiente de proporcionalidad, tal que

$$\vec{P} = \epsilon_0 \chi_e \vec{E} \quad (1.27)$$

donde χ_e es la susceptibilidad eléctrica del medio, y el campo de desplazamiento es entonces

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E} \quad (1.28)$$

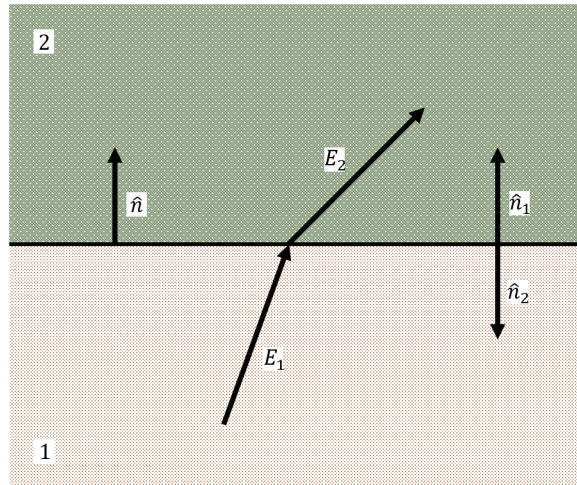


Figura 1.5: Frontera entre las regiones 1 y 2 de diferente polarización. El campo eléctrico y el campo de desplazamiento en la transición de un medio a otro, cambia según las ecuaciones (1.29)

donde $\epsilon = \epsilon_0 (1 + \chi_e)$ es la permitividad relativa o constante dieléctrica relativa, y $1 + \chi_e$ es la constante dieléctrica del material [18].

Cuando el medio dieléctrico no llena el espacio donde hay campo eléctrico, aparecen condiciones para las componentes normales de \vec{D} y las componentes tangenciales de \vec{E} en los límites del medio, estas son

$$\begin{cases} (\vec{D}_2 - \vec{D}_1) \cdot \hat{n} = \sigma_l \\ (\vec{E}_2 - \vec{E}_1) \times \hat{n} = 0 \end{cases} \quad (1.29)$$

donde σ_l es la densidad superficial de carga libre en la interface entre los medios 1 y 2, mientras que \hat{n} es el vector unitario perpendicular a la interface que va del medio 1 al medio 2.

Estas condiciones son válidas cuando existe un cambio en el medio, es decir, que el campo eléctrico y el campo de desplazamiento, pasan de un medio a otro [3, 15, 17, 18]. Se muestra en la figura 1.5 el cambio de una línea de campo eléctrico en la transición de un medio a otro.

1.3. Hidrodinámica

La hidrodinámica es la parte de la mecánica de fluidos que se basa en dos hipótesis fundamentalmente: la primera consiste en que en una molécula de fluido están contenidas una gran cantidad de moléculas o partículas que constituyen al fluido, y la segunda es que la longitud de onda con la que se observa un fluido es mucho mayor que la longitud de trayectoria libre media de las moléculas del fluido, esto es equivalente también a que el tiempo asociado a la frecuencia con la que observamos el fluido es mucho mayor que el tiempo de colisión media entre moléculas que componen el fluido, estas condiciones se expresan por medio de la ecuación

$$kl_c \ll 1 \quad \omega\tau_c \ll 1 \quad (1.30)$$

donde $k = 2\pi/\lambda$ es el vector de onda, l_c es la longitud de trayectoria libre media de las moléculas, $\omega = 2\pi/T$ es la frecuencia angular de la onda, T es el periodo de la onda, y τ_c es el tiempo de colisión medio entre las moléculas que componen el fluido.

En este régimen hidrodinámico existen cantidades físicas que se conservan, la ley de conservación de masa, la ley de conservación del momento lineal, la ley de conservación de la energía, la ley de conservación de la carga eléctrica, y la ley de conservación del momento angular. En este trabajo de tesis se considera una mezcla de diferentes partículas, moléculas de agua, iones tanto positivos como negativos, y moléculas suspendidas; a la primera especie, que es la mayoritaria (el agua), se le llama el solvente, a los iones pequeños se les llama el soluto, y las micropartículas en mucho menor proporción, se les llama partículas suspendidas. La densidad de este sistema, de esta mezcla de partículas, se calcula por la expresión siguiente:

$$\rho = \sum_{\gamma=1}^c \rho_{\gamma} \quad (1.31)$$

mientras que la velocidad de una molécula del fluido, está definida por

$$\vec{v} = \sum_{\gamma=1}^c \frac{\rho_{\gamma}\vec{v}_{\gamma}}{\rho} \quad (1.32)$$

estas son la densidad total y la velocidad del centro de masa de la molécula de fluido. Donde una molécula de fluido, es un elemento de volumen pequeño en comparación al volumen de todo el fluido, pero grande, de tal modo que comprende muchas moléculas.

Para un fluido como el que estudia este trabajo de tesis, la densidad local asociada con la variable de conservación de la masa, es $\rho(\vec{r}, t)$, la densidad de momento lineal $\rho\vec{v}(\vec{r}, t)$, de energía $E(\vec{r}, t)$. Las leyes de conservación asociadas con estas densidades, se expresan de forma diferencial de la siguiente manera respectivamente:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{v}) = 0 \quad (1.33)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho\vec{v}\vec{v} - \sigma) = \vec{f} \quad (1.34)$$

$$m \frac{\partial}{\partial t} E + \nabla \cdot [E\vec{v} - \boldsymbol{\sigma}\vec{v} + \vec{q}] = \vec{f} \cdot \vec{v} \quad (1.35)$$

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

$$E = \rho(e + \vec{v} \cdot \vec{v}/2) \quad (1.36)$$

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

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\hat{I} + \mathbb{T} \quad (1.37)$$

donde p es la presión, \hat{I} es la matriz identidad, y \mathbb{T} es el tensor de esfuerzo viscoso definido por,

$$\mathbb{T} = \mu [\nabla\vec{v} + (\nabla\vec{v}^T)] + \zeta (\nabla \cdot \vec{v}) \hat{I} \quad (1.38)$$

donde μ es el coeficiente de fricción de corte, ζ es el coeficiente de fricción de bulto [1].

En el presente trabajo de tesis, se estudia un sistema en el estado líquido, los líquidos, son difíciles de comprimir, en cambio, un gas es fácilmente comprimido, la condición de que un fluido es incompresible se expresa matemáticamente por medio de la relación

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad (1.39)$$

además en el sistema de estudio no aparecen fenómenos térmicos, es decir, los fenómenos dependientes de la temperatura no son relevantes, por lo que la ecuación de conservación de la energía no se considera, así, solo tomamos en cuenta las ecuaciones (1.35) y (1.36). La ecuación (1.36) se puede escribir de una manera más familiar como sigue [1, 2]

$$\rho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \rho \vec{v} \cdot \nabla \vec{v} = -\nabla p + \eta \nabla^2 \vec{v} + \left(\frac{\eta}{3} + \zeta\right) \nabla (\nabla \cdot \vec{v}) + \vec{f} \quad (1.40)$$

En este trabajo de tesis, como se ha dicho, se estudia un líquido, por lo que se cumple la condición de incompresibilidad (1.39) y además, nuestro sistema está en el estado estacionario, por lo que las cantidades físicas no dependen del tiempo, de este modo, la ecuación de Navier Stokes (1.40) se reduce a la expresión

$$0 = -\nabla p + \eta \nabla^2 \vec{v} + \vec{f} \quad (1.41)$$

en estas condiciones se habla de un flujo laminar, y en nuestro caso \vec{f} la fuerza externa, es la interacción de los entes cargados con el campo eléctrico aplicado.

1.3.1. Efecto de un fluido en una partícula en movimiento

En sistemas experimentales, es crucial analizar el impacto del fluido en las partículas. El fluido ejerce una fuerza de arrastre sobre la partícula, afectando su velocidad. Si el fluido está en movimiento, esta fuerza arrastra la partícula, lo que puede influir en la medición de otros efectos. En términos generales, cuando una partícula se mueve en relación con el fluido, experimenta una fuerza de arrastre viscosa debida a la acción del fluido. Esta fuerza es proporcional y actúa en contra de la velocidad relativa de la partícula.

En general, la fuerza que siente una partícula en movimiento dentro debido al fluido, es

$$\vec{F}_\eta = -f\vec{v} \quad (1.42)$$

donde el factor de proporcionalidad f se conoce como factor de fricción, y este es dependiente de algunos parámetros de la partícula tales como su tamaño y su forma.

Para una esfera, como es el objetivo principal de esta tesis, en fluidos a bajas velocidades, partículas pequeñas, y flujos sin turbulencia, el factor de fricción es:

$$f = 6\pi\eta R \quad (1.43)$$

donde η es la viscosidad del fluido, y R es el radio de la esfera [5].

1.4. Fenómenos electrocinéticos

Esta sección se enfoca en varios fenómenos electrocinéticos, importantes en el desarrollo teórico del problema que aborda esta tesis, estos efectos son: la doble capa eléctrica, electroósmosis, electroforesis, y dielectroforesis.

1.4.1. La doble capa eléctrica

La doble capa eléctrica es una estructura que se forma alrededor de una superficie sólida cargada cuando es inmersa en una solución electrolítica. Esta estructura se compone de dos capas de carga eléctrica que se distribuye a lo largo de la superficie sólida y el líquido. Tiene por característica que el sistema es globalmente neutro.

La primera capa es una película molecular de iones que se fijan (permanecen inmóviles) a la superficie sólida a causa del efecto de las fuerzas de atracción de las cargas. Esta capa se conoce como capa de Stern, esta capa es del orden de uno o dos iones, se considera que en esta el potencial decae linealmente. La segunda capa se le llama capa difusa, no está unida a las paredes del sólido, y las cargas no están fijas (son libres de moverse en el fluido), esta resulta de un equilibrio estadístico entre la agitación térmica del fluido, que tiende a homogeneizar la distribución de carga, y las fuerzas eléctricas que desplazan las cargas hacia la superficie, en esta capa el potencial

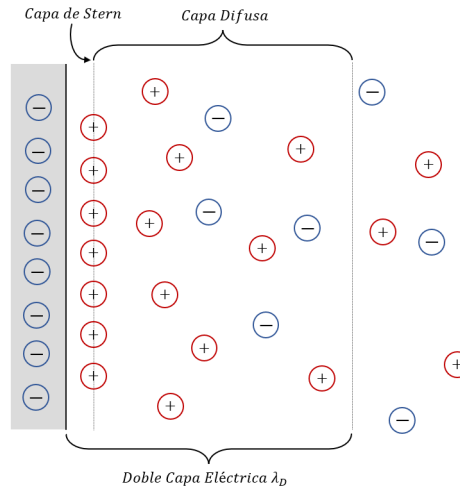


Figura 1.6: Doble capa eléctrica. Se muestra la doble capa eléctrica alrededor de un material sólido cargado negativamente en su superficie, la configuración de los iones del fluido es la siguiente: los iones positivos se acercan a la superficie del sólido generando una capa de un solo ion alrededor, capa de Stern, después se concentra una mayor cantidad de iones positivos un poco alejados de la superficie capa difusa, y después hay una misma cantidad de iones positivos y negativos donde el fluido es neutro [2, 3]

decae exponencialmente respecto a una distancia característica llamada longitud de Debye λ_D . La frontera entre las dos capas se le llama plano de Helmholtz.

Las características de esta doble capa son proporcionadas por la mecánica estadística, y por análisis electrodinámico. La capa de Stern, es muy pequeña, y se considera como una densidad de carga superficial. Se presenta la figura 1.6 con las partes de la doble capa eléctrica cerca de la superficie de un material sólido.

Análisis para la capa difusa. El potencial eléctrico dentro de la capa difusa, cumple con la ecuación de Poisson (1.8) siendo:

$$-\epsilon_0 \epsilon \nabla^2 \Phi = \sum_{i=1}^n F z_i c_i \quad (1.44)$$

donde ϵ es la permitividad eléctrica del fluido, F es la constante de Faraday⁶, z_i es la valencia de los iones de i -ésima especie, c_i es la concentración molar de iones de i -ésima especie, y n es el número de especies de iones.

El flujo de iones (N_i) puede describirse en tres términos, el término difusivo, el término electromigratorio, y el flujo de las densidades. Cuando no hay movimiento en el fluido, el término correspondiente al flujo de densidades es cero. La divergencia del flujo de iones conocida como ecuación de Nernst-Planck⁷.

⁶La constante de Faraday (F) es una unidad cuantitativa de electricidad que se utiliza para calcular la cantidad de carga eléctrica en un mol de electrones. Se representa con la letra F . Un F equivale a 96.485 coulomb/mol.

⁷Ecuación de Nernst-Planck: $\vec{N}_i = -D_i \nabla c_i - z_i \frac{D_i}{RT} F c_i \nabla \Phi + \vec{u} c_i$

$$\nabla \cdot \vec{N}_i = \nabla \cdot \left[-D_i \nabla c_i - z_i \frac{D_i}{RT} F c_i \nabla \Phi \right] \quad (1.45)$$

su solución analítica para la concentración de iones es:

$$c_i = C_{0,i} e^{-\Phi \frac{z_i F}{RT}} \quad (1.46)$$

donde $C_{0,i}$ es la concentración global de iones de i -ésima especie. Esta relación es la distribución de Boltzmann.

Para un electrolito simétrico⁸ en un espacio unidimensional, (1.44) queda como:

$$\nabla^2 \frac{zF\Phi}{RT} = \frac{1}{\lambda_D^2} \sinh \left(\frac{zF\Phi}{RT} \right) \quad (1.47)$$

donde λ_D es la longitud de Debye⁹

$$\lambda_D = \left[\frac{\epsilon_0 \epsilon_r RT}{\sum_{i=1}^2 F^2 z_i^2 C_{0,i}} \right] \quad (1.48)$$

Cuando $\Phi \ll \frac{RT}{zF}$, (1.47) se linealiza con la aproximación de Debye-Hückel¹⁰ quedando como:

$$\nabla^2 \frac{zF\Phi}{RT} = \frac{1}{\lambda^2} \frac{zF\Phi}{RT} \quad (1.49)$$

su solución para el potencial eléctrico es

$$\Phi = \Phi_0 e^{-\frac{r}{\lambda_D}} \quad (1.50)$$

donde r es la distancia desde la superficie hasta el punto medido, y Φ_0 es el potencial medido en la superficie sólida.

Cuando $\Phi \gg \frac{RT}{zF}$, la solución de (1.47) de acuerdo con la solución de Gouy-Chapman¹¹, el potencial eléctrico es:

$$\Phi = 4 \frac{RT}{zF} \tanh^{-1} \left[\tanh \left(\frac{zF\Phi_0}{4RT} \right) e^{-\frac{r}{\lambda_D}} \right] \quad (1.51)$$

⁸Es una solución que contiene dos tipos de iones idénticos y de carga opuesta ($z = z^+ = z^-$).

⁹La longitud de Debye es una longitud muy pequeña del orden de Ångströms A°

¹⁰La teoría de Debye-Hückel, publicada en 1923, fue hecha para dar una solución analítica aproximada para potenciales superficiales bajos [5].

¹¹La solución analítica a la ecuación fue desarrollada por Georges Gouy en 1910 y Leonard Chapman en 1913 para superficies planas en las que hay una EDL delgada limitada por una partícula [5].

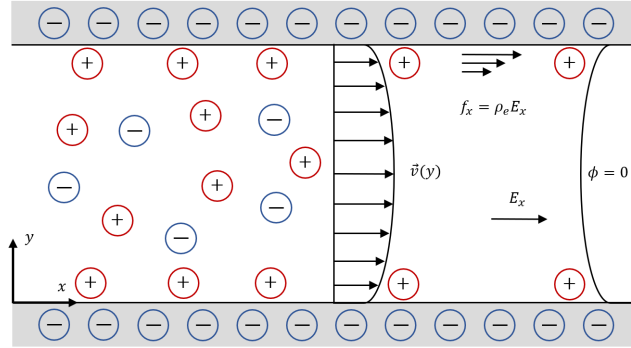


Figura 1.7: Flujo electroosmótico. Se muestra el flujo electroosmótico en un canal de hendidura con una carga superficial uniforme negativa.

1.4.2. Electroósmosis

Cuando se aplica un campo eléctrico paralelo a una superficie cargada estacionaria, el exceso de iones en la Doble Capa Eléctrica (EDL) se mueve en dirección del campo según su carga, arrastrando consigo el fluido y generando un flujo inducido. Este fenómeno se conoce como electroósmosis o flujo electroosmótico (EOF, por sus siglas en inglés) se muestra un esquema del flujo electroosmótico en la figura 1.7.

La fuerza que actúa sobre el líquido se puede describir mediante la siguiente ecuación:

$$\vec{F} = \vec{E} \sum_{i=1}^n F z_i c_i = \epsilon_0 \epsilon_r \nabla^2 \phi \vec{E} \quad (1.52)$$

El movimiento del fluido sigue las ecuaciones de Navier-Stokes (1.40), donde el término correspondiente a la fuerza se describe mediante la ecuación (1.52). Por lo tanto, las ecuaciones de Navier-Stokes para el flujo electro-osmótico son las siguientes:

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \vec{u} - \epsilon_0 \epsilon_r \nabla^2 \phi \vec{E} \quad (1.53)$$

Cuando el campo eléctrico externo es considerablemente menor en comparación con el campo inducido por la carga superficial, las cargas cercanas a la superficie no se ven afectadas significativamente por el campo externo. En este caso, cuando el flujo electroosmótico se estabiliza, el gradiente de presión externa a través de la superficie cargada se vuelve cero, y la ecuación (1.53) se simplifica como sigue:

$$\mu \frac{d^2 u}{dy^2} = \epsilon_0 \epsilon_r \frac{d^2 \phi}{dy^2} E_x \quad (1.54)$$

donde E_x y u son las componentes del campo eléctrico y la velocidad en la dirección x , respectivamente. La solución para la velocidad del fluido, considerando las condiciones de frontera $u(y=0) = 0$, $\frac{du}{dy} \Big|_{y \rightarrow \infty} = 0$, $\phi(y=0) = \phi_0$ y $\frac{d\phi}{dy} \Big|_{y \rightarrow \infty} = 0$, se obtiene como sigue:

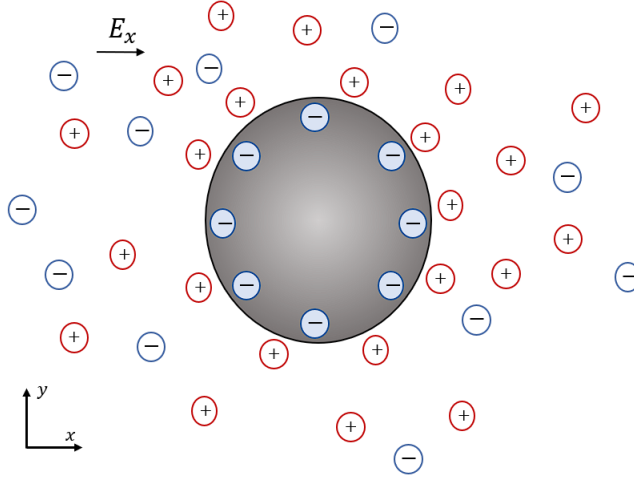


Figura 1.8: Electroforesis. Se muestra el movimiento electroforético de una esfera cargada negativamente bajo el efecto de un campo eléctrico.

$$u = \frac{\epsilon_0 \epsilon_r E_x}{\mu} [\phi(y) - \phi_0] \quad (1.55)$$

Cuando $y = \lambda_D$, se tiene $\phi(y) = 0$, lo que implica que

$$u = -\frac{\epsilon_0 \epsilon_r E_x \phi_0}{\mu} \quad (1.56)$$

Dado que la longitud de Debye (λ_D) es del orden de Ángstroms, mucho más pequeña que el tamaño de un dispositivo microfluídico, la velocidad del fluido en un microcanal se vuelve uniforme. Esta velocidad uniforme se conoce como velocidad de deslizamiento de Soluchowski.

1.4.3. Electroforesis

La electroforesis es un proceso en el cual partículas cargadas suspendidas en una solución acuosa se desplazan bajo la influencia de un campo eléctrico externo. Estas partículas adquieren una velocidad llamada velocidad electroforética, que se expresa mediante la ecuación:

$$\vec{v}_{EP} = \eta \vec{E} \quad (1.57)$$

donde, \vec{v}_{EP} representa la velocidad electroforética, η es la movilidad electroforética de la partícula y \vec{E} es el campo eléctrico aplicado.

Es importante destacar que, inicialmente, la carga superficial de las partículas está estacionaria en el flujo electroosmótico. Sin embargo, durante la electroforesis, la carga se vuelve móvil y provoca la migración de las partículas en el medio acuoso. La figura 1.8 muestra el movimiento electroforético de una esfera cargada bajo el efecto de un campo eléctrico [5].

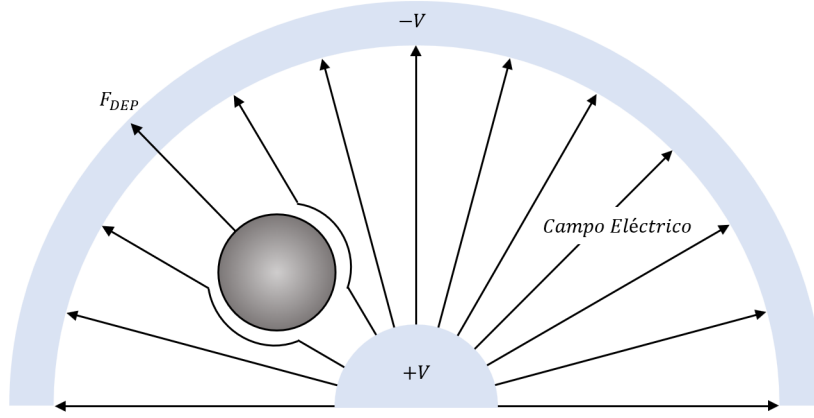


Figura 1.9: Dielectroforesis. Se muestra una dielectroforesis negativa de una partícula sin carga sujeta a un campo eléctrico no homogéneo.

1.4.4. Dielectroforesis

La dielectroforesis es el movimiento de partículas polarizables inmersas en una solución acuosa sujeta a un campo eléctrico AC no homogéneo, es decir, el campo eléctrico cambia de magnitud dependiendo de la posición, y las líneas de campo no son paralelas entre sí. Existen dos tipos de dielectroforesis, la positiva y la negativa, esta es determinada por la relación entre la polarizabilidad de las partículas y del fluido, una dielectroforesis positiva es que la fuerza dielectroforética está dirigida hacia la región con un campo eléctrico más alto, mientras que una dielectroforesis negativa se refiere a que la fuerza va dirigida a la región con menor campo. La figura 1.9 muestra la dielectroforesis negativa de una partícula sujeta a un campo no homogéneo.

La fuerza dielectroforética \vec{F}_{DEP} es proporcional al cuadrado del campo eléctrico, como consecuencia hay una electrocinética no lineal, y a su vez es proporcional al cubo del tamaño de la partícula.

El promedio temporal de la fuerza dielectroforética que actúa en una partícula esférica de radio r es

$$\vec{F}_{DEP} = 2\pi r^3 \epsilon_0 \epsilon_f \text{Re} [K(\omega)] \nabla \left| \vec{E}_{rms} \right|^2 \quad (1.58)$$

donde ω es la frecuencia del campo eléctrico AC, y \vec{E}_{rms} es la raíz cuadrática media del campo eléctrico [5].

La aproximación más rigurosa para la fuerza dielectroforética es mediante la integración del tensor de esfuerzos de Maxwell [17] sobre la partícula, dada por

$$\vec{F}_{DEP} = \int \mathbf{T} \cdot \hat{n} dS \quad (1.59)$$

donde \mathbf{T} es el tensor de esfuerzos de Maxwell, y S es la superficie de la partícula [5].

1.5. COMSOL Multiphysics

COMSOL Multiphysics es un software altamente versátil y poderoso utilizado para resolver una amplia gama de problemas físicos en disciplinas como la electrostática, la mecánica de fluidos, la óptica y muchas otras áreas establecidas de la física.

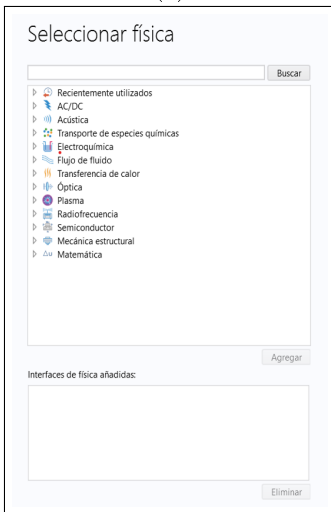
Este software se destaca por su capacidad para resolver de manera numérica ecuaciones fundamentales, como la ecuación de Laplace y la ecuación de Navier-Stokes. Utiliza algoritmos rigurosamente probados y optimizados [7], basados principalmente en el método de elemento finito [8], lo que garantiza resultados precisos y eficientes.



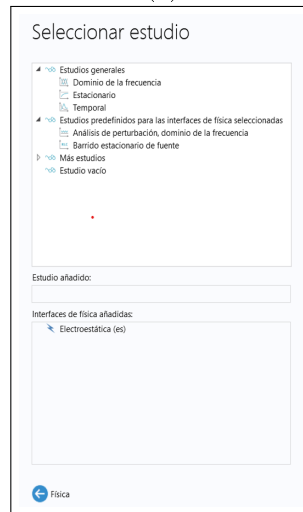
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 1.10: En torno del modelo. Pantallas para establecer el entorno del modelo. a) nuevo modelo, b) selección de dimensión de espacio, c) selección de físicas, y d) selección de estudio

Procedimiento para utilizar COMSOL Multiphysics

El uso de COMSOL Multiphysics para la simulación de sistemas físicos sigue un procedimiento de siete pasos:

Establecer el entorno del modelo. Al abrir el software, se presentan dos opciones: iniciar un modelo en blanco o utilizar el asistente para el modelo. Si se elige el asistente, se selecciona el tipo de modelo, como 3D, 2D axi simétrico, 2D, 1D axi simétrico, 1D o 0D. A continuación, se selecciona la física relevante para el sistema, como electromagnetismo, acústica, transferencia de calor, etc. Luego se elige el tipo de estudio y se definen los parámetros, variables y funciones necesarios para el modelo, en la figura 1.10 se muestra el seguimiento de las pantallas para este paso.

Establecer la geometría del sistema. En esta etapa, se utilizan las herramientas de geometría disponibles para construir el sistema físico a simular, las herramientas importantes para el diseño son las herramientas primitivas, en estas se encuentran los círculos, elipses, cuadrados, etc. a los cuales se les pueden aplicar operaciones como redondeo, tangentes, transformaciones, esto se logra en la sección de operaciones. Una ventaja importante de COMSOL, es que permite importar dibujos y modelos hechos en COMSOL y otros programas como dibujos CAD. En el constructor de modelo se puede acceder a más opciones para el dibujo enfocadas en la sección específica de interés. Ajustes son las opciones disponibles para cada parte del dibujo. Gráficos es el espacio donde se muestra el dibujo generado. La figura 1.11 muestra la pantalla para el control de la geometría.

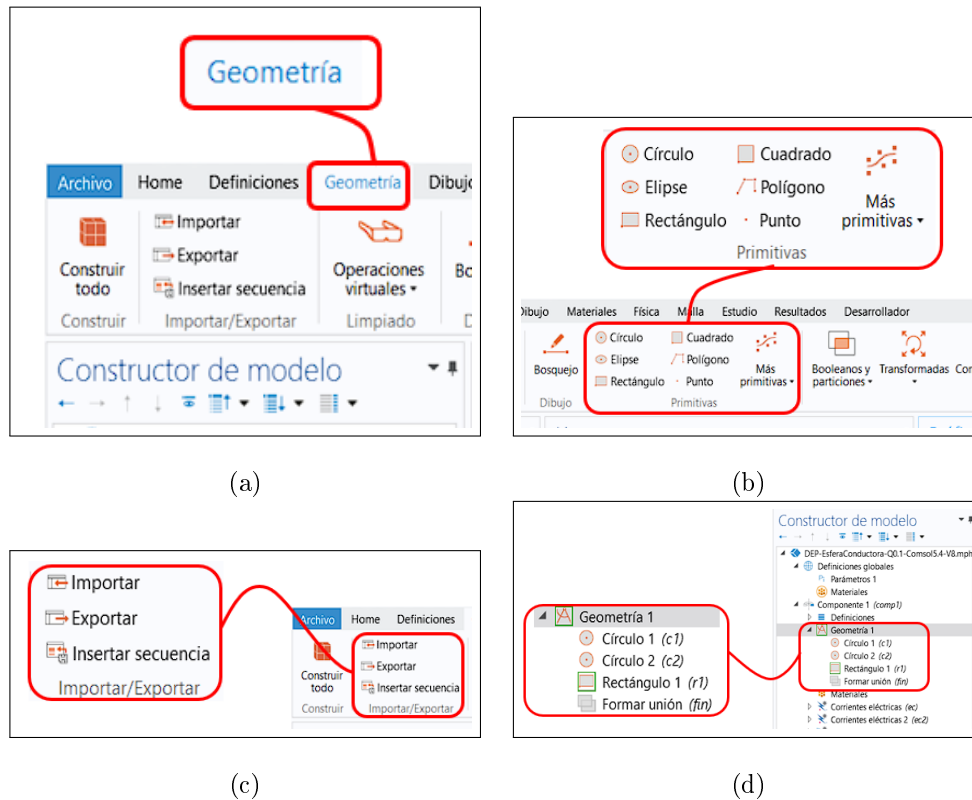


Figura 1.11: Geometría. Pantallas para el control de la geometría, *a*) es la barra de las opciones de geometría, *b*) muestra las figuras básicas para generar el dibujo, *c*) las opciones para importar o exportar el dibujo, *d*) son las opciones del constructor de modelo para las figuras agregadas.

Especificar las propiedades de los materiales: Una vez que se ha construido la geometría del sistema, se deben asignar propiedades a los materiales que lo componen. COMSOL proporciona bibliotecas de materiales predefinidos para diferentes físicas, pero también se pueden personalizar las propiedades de los materiales según sea necesario, estas opciones están disponibles en la barra superior de herramientas. El constructor de modelo permite elegir qué materiales usar en el modelo. Ajustes proporciona opciones específicas de los materiales usados, aquí se pueden editar las propiedades dependiendo de las características específicas del material que se use. Gráficos es la pantalla donde se muestra el modelo construido, y donde se puede elegir de qué material está hecho cada sección.

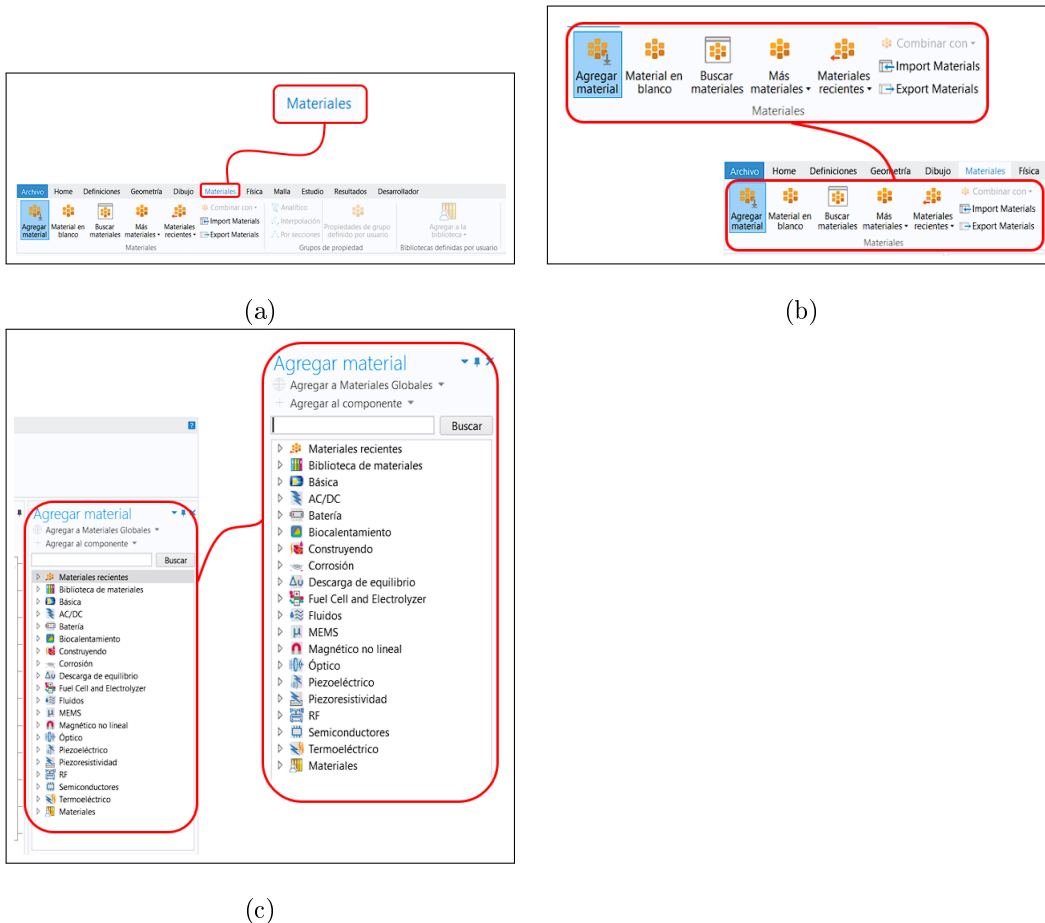


Figura 1.12: Propiedades del material. Pantallas para el control de las propiedades del material, se muestran *a)* las herramientas de los materiales, *b)* las opciones para agregar materiales en el modelo, *c)* se muestran las bibliotecas de materiales disponibles.

Definir las condiciones de frontera: En esta etapa, se establecen las condiciones en las que el modelo funcionará. Esto se realiza en la sección “Física” del software y en el constructor de modelos. Aquí se especifican las condiciones de contorno, como temperaturas, presiones, campos eléctricos, etc., en esta etapa, la física se agrega a la geometría dependiendo de secciones, contornos, superficies o puntos. También es posible agregar físicas extra que no se habían elegido en el primer paso en a sección agregar física, esta pantalla se muestra en la sección b) y e) de la figura 1.13.

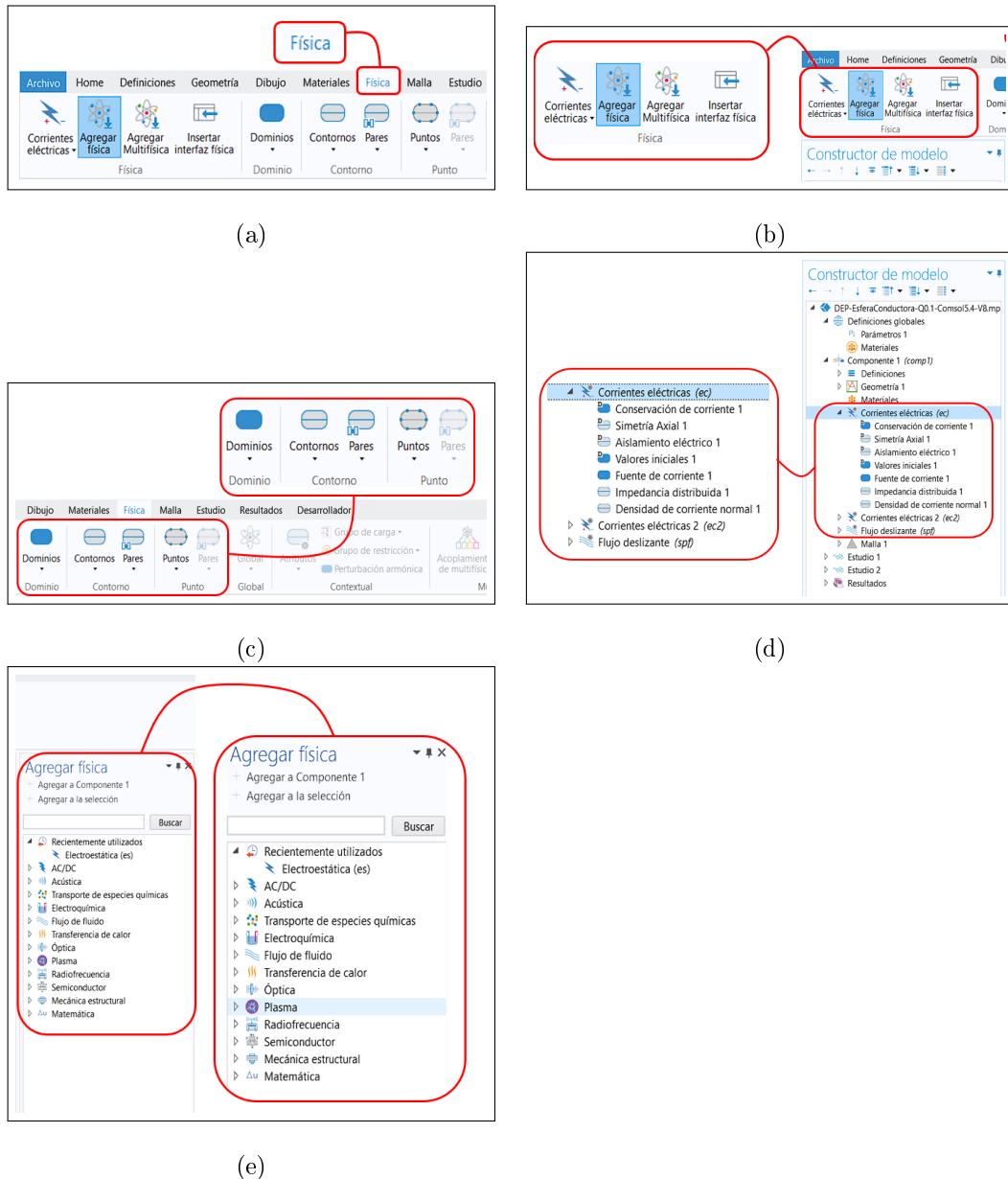


Figura 1.13: Pantallas para el control de la física del modelo. Se muestran las pantallas, a) las opciones para la física del modelo, b) son las opciones para agregar físicas, c) la selección de las condiciones de frontera en la geometría, d) son las opciones del constructor del modelo para la física del sistema, e) son las físicas disponibles para agregar al modelo.

Generar el mallado: El mallado es una parte fundamental para la solución numérica de la física del sistema. COMSOL ofrece opciones para generar el mallado, que incluyen la personalización del tamaño y la densidad del mallado, así como la opción de utilizar un mallado recomendado para la física del modelo. Es recomendable utilizar un mallado extremadamente fino para obtener resultados precisos, aunque esto puede requerir más poder de cómputo y tiempo de solución.

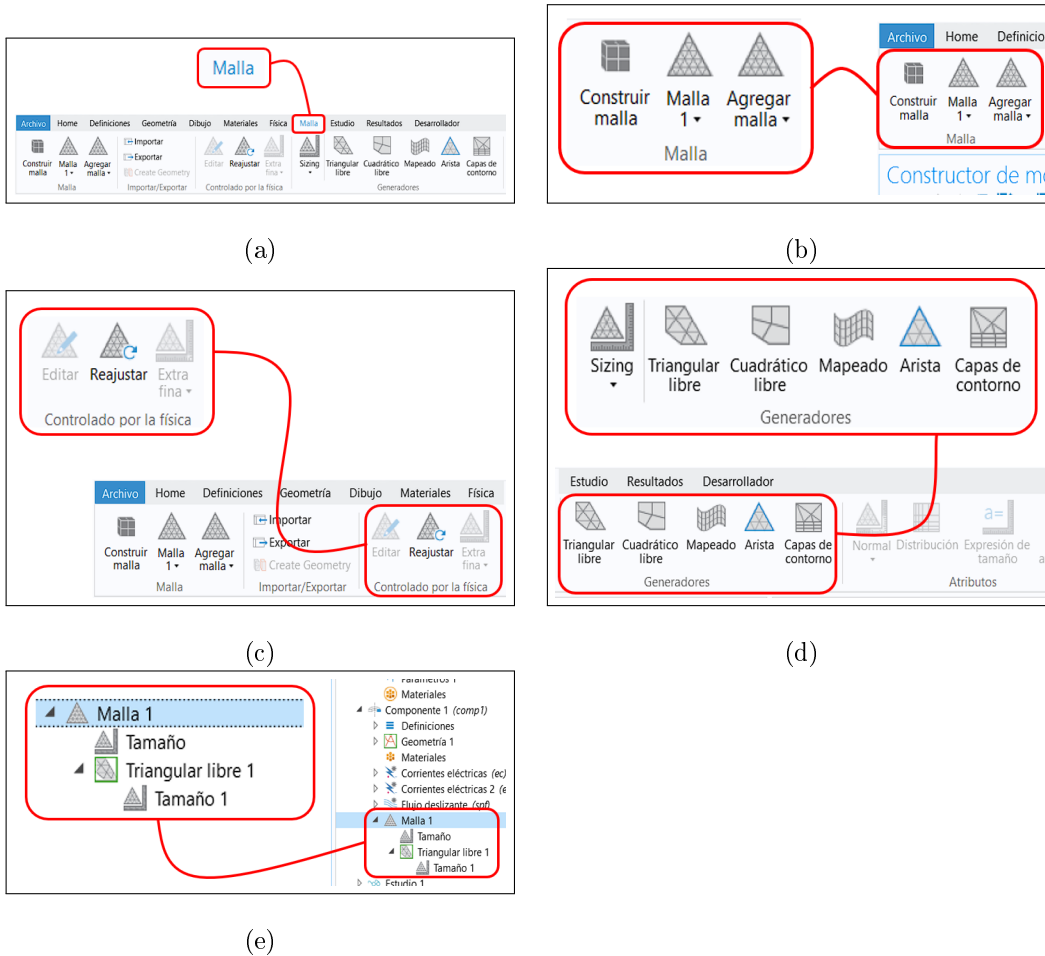


Figura 1.14: Pantallas para el control del mallado, se muestran a) las opciones del mallado, b) las opciones para agregar y construir el mallado, c) son las opciones automáticas para generar el mallado, d) son las opciones para generar el mallado manualmente, e) son las opciones del mallado del constructor del modelo.

Ejecutar la simulación. En la sección “Estudio”, se realiza la ejecución de la simulación. Aquí se pueden controlar las gráficas, las ecuaciones a resolver y cómo guardar los resultados. En la figura 1.15 se muestran las opciones de la simulación con más detalle.

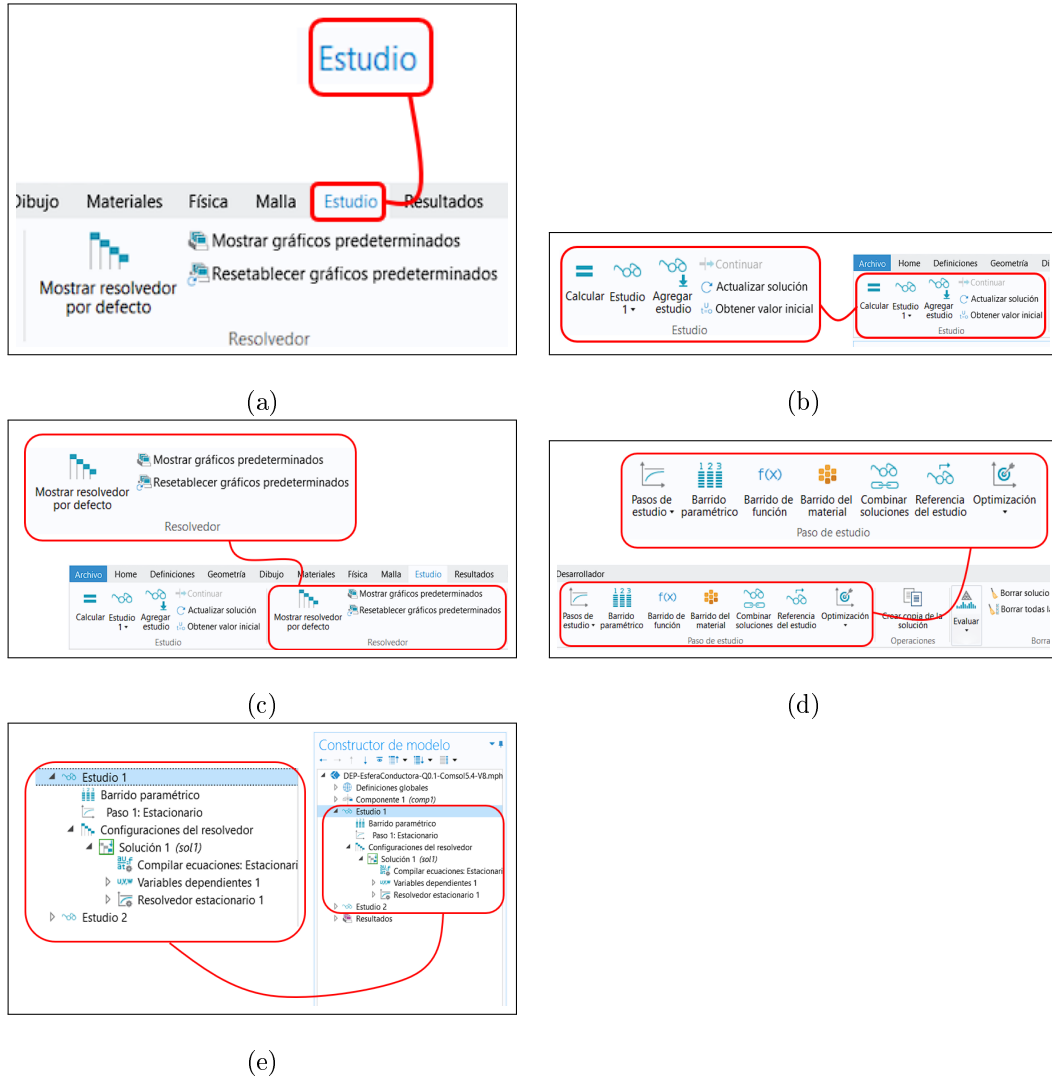


Figura 1.15: Pantallas para la simulación. Se muestran las opciones *a)* del control de los pasos de cálculo, *b)* son las opciones para agregar cálculo y hacer la simulación, *c)* son las opciones del resolvidor y las gráficas que se mostrarán, *d)* son las opciones para el control del algoritmo de solución y los pasos para simulación, *e)* son las opciones del estudio que da el constructor de modelo.

Visualización de datos de la solución. En la sección “Resultados”, se pueden visualizar y exportar los datos de la solución. Es posible elegir el formato de exportación y seleccionar los datos específicos que se desean guardar para un análisis más detallado. COMSOL tiene su propio espacio para análisis de datos, lo que permite un control total en las gráficas que muestra la simulación, así como la visualización de los datos en tablas y gráficas 2D y 3D.

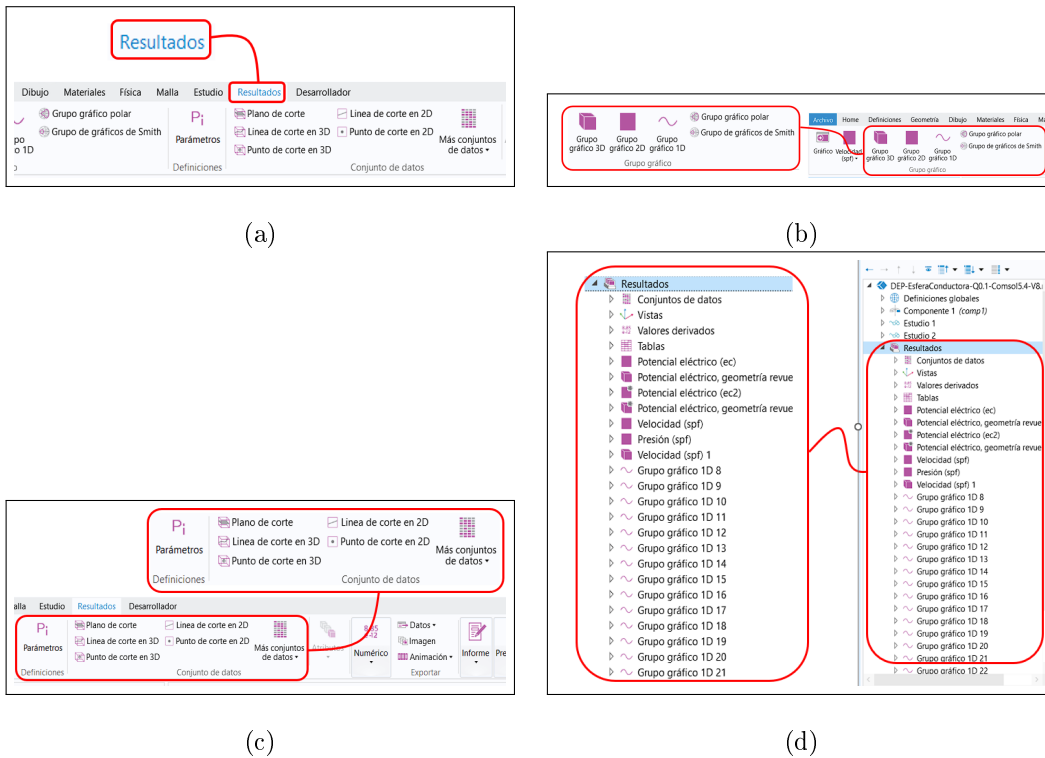


Figura 1.16: Pantallas para la visualización de datos, se muestran *a)* las herramientas de visualización y exportación de datos, *b)* son las opciones del tipo de gráfico a visualizar, *c)* son las opciones para el control de los parámetros de las gráficas, así como el análisis de los gráficos con cotes o puntos, y *d)* muestra los gráficos de la simulación y más opciones del constructor de modelo.

Estos pasos son una descripción general del procedimiento en COMSOL Multiphysics y pueden variar dependiendo de la versión del software y del problema específico que se esté abordando. Se recomienda consultar la documentación y los recursos proporcionados por COMSOL Multiphysics para obtener instrucciones más detalladas y específicas según la versión del software [7].

Capítulo 2

Dielectroforesis de una partícula metálica esférica

En este capítulo, presentamos la formulación del problema de dielectroforesis de micropartículas dieléctricas como metálicas, para lo cual usamos dos aproximaciones: la aproximación del dipolo puntual, y la del tensor de esfuerzos de Maxwell. Estas aproximaciones nos permiten tomar en cuenta el efecto del campo eléctrico no homogéneo sobre el dipolo eléctrico inducido sobre la micropartícula, desde luego que la aproximación de dipolo puntual es una aproximación de orden cero, ver ecuación (1.58), ya que no considera la dimensión de la micropartícula mientras que, la del tensor de esfuerzos de Maxwell es una aproximación mayor debido a que toma en cuenta la forma geométrica de la micropartícula, expresión (1.59). Ambas aproximaciones deberán coincidir en la medida en que las fluctuaciones del campo eléctrico sean pequeñas o despreciables en la región que ocupa la micropartícula. Consideramos dos clases de partículas: metálicas y dieléctricas; para las partículas metálicas consideramos la interacción dielectroforética y la influencia debida al flujo electroosmótico. Mientras que, para partículas dieléctricas, solo consideramos la fuerza dielectroforética debido a que la doble capa en partículas dieléctricas es despreciable. El tamaño de las partículas que consideramos es del orden de $6 \mu m$, por lo que el efecto Browniano es despreciable. El contenido de este capítulo está estructurado de la siguiente manera: en la sección 1, se presenta el planteamiento del problema, donde de manera general se plantea el escenario en el cual están inmersa las partículas, ya sea metálica o dieléctrica; enseguida en la sección 2, se revisa la forma del dipolo inducido \vec{p} tanto en partículas metálicas como en dieléctricas, así como la polarizabilidad. Posteriormente, en la sección 3 se generaliza el concepto de dielectroforesis para partículas reales; en particular, se muestran la forma general de la velocidad dielectroforética en estado estacionario. En la sección 4, debido a que nuestro estudio es teórico y de simulación numérica, requerimos en nuestra formulación la forma del campo eléctrico no homogéneo. Para esto, en esta sección obtenemos una forma analítica del campo eléctrico no uniforme. En seguida, en la sección 5, presentamos la formulación de cómo calculamos la parte de la velocidad de la partícula debido a la acción del flujo electroosmótico, que se basa en el teorema de reciprocidad de fluidos. Mientras que, en la sección 6, hacemos una compilación de algunos resultados analíticos para esferas metálicas y dieléctricas, estos resultados analíticos nos servirán como una validación de nuestros resultados numéricos obtenidos por nuestra forma de trabajo. Finalmente, en la sección 7 presentamos las expresiones de la velocidad dielectroforética de partículas metálicas y dieléctricas en la misma escala, donde aparecen dos tiempos de relajación asociados a los procesos de carga en ambos tipos de partículas.

2.1. Planteamiento del problema

El problema que tratamos consiste en el estudio de una micropartícula sin carga, inmersa en una solución electrolítica acuosa. Sobre este sistema actúa un campo eléctrico no uniforme, \vec{E} , el cual es producido por electrodos alimentados con corriente alterna, AC. En este escenario, el campo eléctrico aplicado induce un dipolo eléctrico, \vec{p} , en la partícula, ver Figura 2.1. En ésta figura se considera el sistema formado por una partícula esférica dieléctrica de radio R , con constante de permitividad eléctrica ϵ_p sumergida en un fluido acuoso con constante de permitividad eléctrica ϵ_m , en los cuales pasa un campo eléctrico producido por dos electrodos idealmente en el infinito.

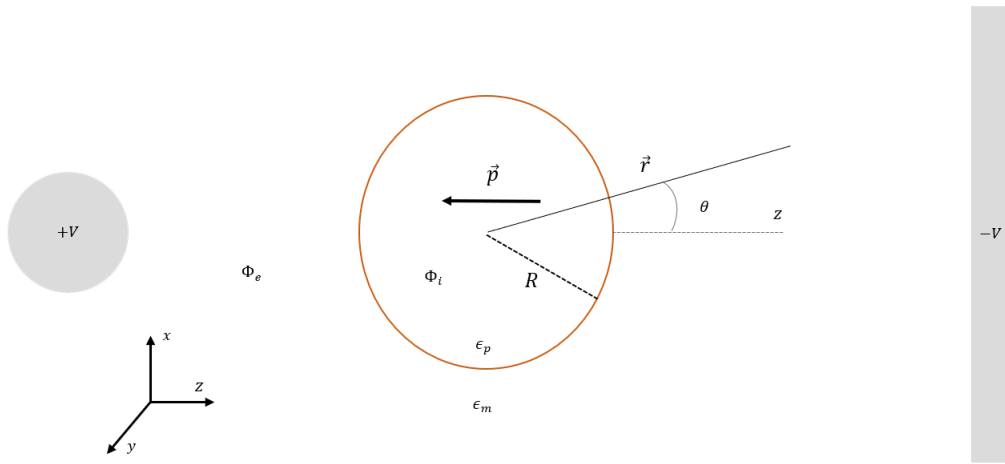


Figura 2.1: Los electrodos son electrodos esféricos, uno mayor que otro para producir un campo no homogéneo.

Como consecuencia de esto, aparecen tres interacciones importantes sobre la partícula:

1. Se induce un dipolo eléctrico \vec{p} en la microesfera. La interacción del dipolo con el campo eléctrico da origen a una fuerza sobre la partícula llamada fuerza dielectroforética \vec{F}_{DEP} .
2. Aparece una doble capa eléctrica, EDL, alrededor de la partícula, ver sección 1.4.3. La interacción de la EDL con el campo externo genera un flujo electroforético de carga inducida generando una fuerza electroforética de carga inducida \vec{F}_{ICEP} .
3. También se destaca la fuerza de arrastre de Stokes, \vec{F}_η , asociada al movimiento de la partícula en un fluido, ver sección 1.3.1.

Consideraciones:

Considerando las condiciones de movimiento del fluido y la partícula, que implican bajas velocidades, flujo no turbulento y partículas pequeñas, como se describe en la sección 1.3.1, la fuerza de arrastre de Stokes \vec{F}_η se expresa generalmente mediante la ecuación

$$\vec{F}_\eta = -f(\vec{u} - \vec{v}) \quad (2.1)$$

donde \vec{u} y \vec{v} representan la velocidad del fluido y la velocidad de la partícula, respectivamente, y f es el mismo factor de fricción para esferas en movimiento inmersas en un fluido como lo muestra la ecuación (1.43).

Las fuerzas gravitacional y de flotación que actúan en la partícula son resultado de su masa y de la diferencia de densidades entre la partícula y el fluido, sus expresiones son:

$$\vec{F}_g = -m_p g \hat{e}_x \quad (2.2)$$

$$\vec{F}_f = m_f g \hat{e}_x \quad (2.3)$$

donde m_p es la masa de la partícula y m_f es una constante de flotación. En los ambientes biológicos e industriales las suspensiones de partículas se consideran tamaño alrededor y mayores a $6\mu m$, este tipo de micropartículas son llamadas No Brownianas, ya que al ser muy grandes el efecto Browniano es despreciable [1], pero estas partículas tienen una masa grande de modo que eventualmente se manifiesta el fenómeno de sedimentación. En los experimentos sobre fenómenos electrocinéticos, incluyendo dielectroforesis, se prepara la suspensión en un tiempo alrededor de media hora, se realizan los experimentos antes de que se manifieste el fenómeno de sedimentación. Así, en nuestro trabajo no se consideran las fuerzas Browniana, Gravitacional, y de Flotación que hemos descrito en el párrafo anterior.

En este trabajo de tesis, consideramos partículas conductoras y dieléctricas. Para las primeras, además de calcular la velocidad dielectroforética, consideramos la contribución del flujo electroosmótico que contribuye con la velocidad electroosmótica. Mientras que, para las partículas dieléctricas, solo consideramos el cálculo de la velocidad dielectroforética. De este modo, hacemos un análisis comparativos de la velocidad dielectroforética con ambos tipos de partículas.

Se hace el desarrollo teórico para una partícula microscópica inmersa en una solución electrolítica bajo la acción de un campo eléctrico externo no homogéneo que oscila en el tiempo a una frecuencia dada.

$$\vec{E} = \text{Re} \left[\tilde{E} e^{i\omega t} \right] \quad (2.4)$$

donde Re es la parte real del número complejo, \tilde{E} es el campo eléctrico \vec{E} en notación de fasor, i es el número imaginario, ω es la frecuencia de oscilación del campo, t es el tiempo.

Debido a que una doble capa eléctrica se induce alrededor de la partícula se requiere resolver la ecuación de Poisson en la region exterior de la partícula, para darle vuelta a este problema y resolver la ecuación de Laplace. Aprovechamos el hecho de que la doble capa eléctrica puede ser considerada como dos capacitores en serie o bien un capacitor e incorporar esta información como condición de frontera, esto es posible siempre que se cumpla la condición de doble capa eléctrica delgada que se expresa por medio de la siguiente expresión

$$\lambda_D \ll R \quad (2.5)$$

Finalmente, suponemos un campo eléctrico no homogéneo independiente del ángulo azimutal, por lo que existe una simetría axial. Este campo lo deducimos en la sección 2.4 por medio de un desarrollo de Taylor alrededor de la posición del dipolo puntual.

Por determinar

Se estudia el caso estacionario, donde la suma de las fuerzas dielectroforética y de carga electroforética inducida son iguales a la fuerza viscosa que ejerce el fluido sobre la partícula, como consecuencia, aparece un movimiento con velocidad constante \vec{U}_T de tal manera que

$$\vec{U}_T = \vec{U}_{DEP} + \vec{U}_{ICEP} \quad (2.6)$$

donde \vec{U}_{DEP} es la velocidad generada por la fuerza dielectroforética, y \vec{U}_{ICEP} es la velocidad generada por la fuerza electroforética de carga inducida.

2.2. Dipolo Eléctrico Inducido

Un elemento muy importante en el fenómeno de la dielectroforesis es el dipolo eléctrico inducido \vec{p} . Para mostrar la forma matemática del dipolo eléctrico inducido revisamos el problema académico, ver Jackson, una partícula esférica de radio R descargada polarizable sujeta a un campo eléctrico uniforme. Para encontrar el potencial eléctrico se resuelve la ecuación de Laplace, dentro y fuera de la esfera,

$$\begin{aligned} \nabla^2 \Phi_p &= 0 \quad \text{para } r < R, \\ \nabla^2 \Phi_m &= 0 \quad \text{para } r \geq R. \end{aligned} \quad (2.7)$$

estas ecuaciones se resuelven con las condiciones de frontera siguientes,

$$\begin{aligned} \Phi_p(0, \theta) &\rightarrow \infty & ; & & \Phi_p(R, \theta) &= \Phi_m(R, \theta) \\ (a) & & & & (b) \\ \epsilon_p \frac{\partial}{\partial r} \Phi_p(R, \theta) &= \epsilon_m \frac{\partial}{\partial r} \Phi_s(R, \theta) & ; & & \lim_{r \rightarrow \infty} \Phi_s(r, \theta) &= -E_0 r \cos(\theta) \\ (c) & & & & (d) \end{aligned} \quad (2.8)$$

La ecuación (2.8)(a) establece que el potencial eléctrico interno Φ_p en el origen ($r = 0$) es infinito, una condición de frontera importante para el potencial interno. La ecuación (2.8)(b) establece que el potencial eléctrico interno Φ_p en la superficie de la esfera ($r = R$) es igual al potencial eléctrico externo Φ_m en la misma ubicación. La ecuación (2.8)(c) establece la continuidad del vector de desplazamiento dada por la ley de Gauss al no haber carga libre sobre la esfera. Esta relación se basa en las propiedades de permitividad eléctrica de los medios. Esta ecuación cuantifica cómo varían los gradientes de potencial eléctrico en la interfaz. La ecuación (2.8)(d) establece que cuando la distancia r tiende a infinito, el potencial eléctrico externo Φ_m es proporcional a $-E_0 r \cos \theta$, donde E_0 es una constante del campo eléctrico y θ es el ángulo en coordenadas polares.

Debido a la simetría del problema, el potencial eléctrico, dentro y fuera, tiene la forma [17], aplicando las condiciones de frontera expresiones (2.8) se obtiene el potencial eléctrico siguiente

$$\begin{aligned}\Phi_p(r, \theta) &= -E_0 \frac{3\epsilon_m}{(\epsilon_0 + 2\epsilon_m)}, & \text{para } r < R \\ \Phi_m(r, \theta) &= -E_0 r \cos \theta + E_0 \frac{R^3}{r^2} \left(\frac{\epsilon_p - \epsilon_m}{\epsilon_p + 2\epsilon_m} \right), & \text{para } r \geq R\end{aligned}\tag{2.9}$$

Por otro lado, el potencial eléctrico de un dipolo puntual está dado por la expresión (1.16) de modo que:

$$\Phi = \frac{\vec{p} \cdot \hat{r}}{4\pi\epsilon_m r^2}\tag{2.10}$$

haciendo una comparación con las ecuaciones (2.9) y (2.10), se tiene que el momento dipolar eléctrico está dado por

$$\vec{p} = 4\pi\epsilon_m R^3 K \vec{E}_0\tag{2.11}$$

donde el factor K esta dado por

$$K = \frac{\epsilon_p - \epsilon_m}{\epsilon_p + 2\epsilon_m}\tag{2.12}$$

se conoce como Factor de Clausius-Mossotti [5]. Este factor determina en gran medida el fenómeno de la dielectroforesis, ya que contiene la información de la partícula y del medio que la rodea. Mientras que, la polarizabilidad del dipolo está dada por la ecuación (1.22)

$$\alpha = \frac{p}{E_0} = 4\pi\epsilon_p R^3 K\tag{2.13}$$

En la deducción de estos resultados, obsérvese que no se toma en cuenta la formación de una doble capa eléctrica. Para el caso de esfera dieléctrica, la doble capa eléctrica es despreciable, no así en esferas conductoras donde la doble capa eléctrica se debe tomar en cuenta.

Para una esfera metálica descargada resolviendo un problema semejante, considerando que el interior de la esfera es una equipotencial, las expresiones del dipolo y polarizabilidad son también las expresiones (2.11) y (2.13), respectivamente. En cambio, el factor Clausius-Mossotti para una esfera metálica se obtiene por un método semejante, pero considerando la doble capa eléctrica.

2.3. Dielectroforesis

Cuando un dipolo está dentro de un campo eléctrico, éste experimenta una fuerza debido a la interacción de sí mismo y el campo, la fuerza que experimenta está dada por la ecuación (1.18) (esta ecuación tiene algunas consecuencias importantes, revisar la subsección 1.2.4). En un principio, el dipolo es finito, es decir, ocupa un tamaño (en este caso el tamaño de la micropartícula). Así, la

fuerza cambia con el tamaño de la partícula, y como consecuencia de la ecuación (1.18), el campo eléctrico externo, es un campo no uniforme.

La fuerza que experimenta la partícula es la fuerza dielectroforética, así la ecuación (1.18) se reescribe como

$$\vec{F}_{DEP} = (\vec{p} \cdot \nabla) \vec{E} \quad (2.14)$$

Considerando el dipolo como un dipolo puntual (aproximación válida, ya que la micropartícula es de orden $R \ll \lambda$, donde λ es la variación del campo eléctrico no uniforme), y desarrollando la contribución multipolar de la fuerza

$$\vec{F} = q\vec{E}^{(0)}(0) + \{\nabla [p \cdot E^0(x)]\}_0 + \left\{ \nabla \left[\frac{1}{6} \sum_{jk} Q_{jk} \frac{\partial E_j^0}{\partial x_k}(\vec{x}) \right] \right\}_0 + \dots \quad (2.15)$$

dado que la carga de la partícula es cero, y para el tamaño del sistema, los multipolos mayores al orden 2 son insignificantes, entonces

$$\vec{E} = \vec{E}_0 + \dots \quad (2.16)$$

entonces la fuerza dielectroforética es

$$\vec{F}_{DEP} = (\vec{p} \cdot \nabla) \vec{E}_0 \quad (2.17)$$

ahora de la Ley de Ohm (1.13), el factor de Clausius Mossotti (2.12) y la fuerza dielectroforética (2.17), desarrollando mediante identidades vectoriales se obtiene

$$\vec{F}_{DEP} = 4\pi\epsilon_m K R^3 (\vec{E}_0 \cdot \nabla) \vec{E}_0 = 2\pi\epsilon_m K R^3 \nabla (\vec{E}_0 \cdot \vec{E}_0) \quad (2.18)$$

Hasta este punto se han considerado dieléctricos ideales (la partícula p y el medio m), es decir, su conductividad es cero. Para dieléctricos reales, se incorpora su conductividad mediante una permitividad eléctrica compleja de la siguiente manera

$$\hat{\epsilon}_n = \epsilon_n - i \frac{\sigma_n}{\omega}; \quad \text{donde } n = m, p \quad (2.19)$$

Considerando las conductividades de los dieléctricos, la fuerza dielectroforética se reescribe como

$$\vec{F}_{DEP} = 2\pi R^3 \epsilon_m \text{Re} [\hat{K}] \nabla (\vec{E}_0 \cdot \vec{E}_0) \quad (2.20)$$

donde

$$\hat{K} = \frac{\hat{\epsilon}_p - \hat{\epsilon}_m}{\hat{\epsilon}_p + 2\hat{\epsilon}_m} \quad (2.21)$$

es el factor de Clausius Mossotti para permitividades eléctricas complejas [5].

La partícula al estar en movimiento inmersa en el fluido, experimenta una fuerza de arrastre que se opone a su movimiento, como se menciona en la sección 1.3.1. La fuerza que siente la partícula esférica de radio R con una velocidad \vec{v} está dado por la ecuación (1.42) y el factor de la ecuación (1.43), es decir, la fuerza de arrastre que experimenta la partícula es

$$\vec{F}_H = 6\pi\mu R\vec{v} \quad (2.22)$$

La micropartícula esférica dieléctrica experimenta las fuerzas \vec{F}_{DEP} y \vec{F}_H , en condiciones de equilibrio, es decir,

$$\vec{F}_{DEP} = \vec{F}_H \quad (2.23)$$

la fuerza neta sobre la partícula es cero, entonces se mueve a velocidad constante, esta velocidad es la velocidad dielectroforética dada por la expresión

$$\vec{U}_{DEP} = \frac{R^2\epsilon_m}{3\mu} \text{Re} \left[\hat{K} \right] \nabla \left(\vec{E}_0 \cdot \vec{E}_0 \right) \quad (2.24)$$

Esta expresión es la que utilizamos para calcular la velocidad dielectroforética, a ésta le llamamos aproximación dipolo puntual.

2.4. Campo Eléctrico No Uniforme

Como muestra la expresión de la fuerza dielectroforética (2.24), para calcular la velocidad dielectroforética requerimos conocer el campo eléctrico no uniforme. Por esta razón, como nuestro estudio es teórico y de simulación numérica, en esta sección presentamos la manera de construir un campo eléctrico No uniforme. Para esto hacemos un desarrollo de Taylor del campo eléctrico de una distribución de carga alrededor del dipolo eléctrico inducido y lejos de los electrodos.

Expandiendo el potencial eléctrico $\Phi(x)$ en serie de Taylor alrededor del origen donde está el dipolo eléctrico [16, 17, 18, 19], se tiene

$$\Phi(\vec{x}) = \Phi(0) - \vec{x} \cdot \vec{E}(0) - \frac{1}{6} \sum_{i,j} (3x_i x_j - r^2 \delta_{ij}) \frac{\partial E_j(0)}{\partial x_i} + \dots \quad (2.25)$$

donde $\vec{x} = x_1 \hat{i} + x_2 \hat{j} + x_3 \hat{k}$, y $r = |\vec{x}|$. Consideremos $\Phi(\vec{x})$ hasta el termino cuadripolar se tiene que

$$\Phi(\vec{x}) \approx \Phi(0) - \vec{x} \cdot \vec{E}(0) - \frac{1}{6} \sum_{i,j} (3x_i x_j - r^2 \delta_{ij}) \frac{\partial E_j(0)}{\partial x_i} \quad (2.26)$$

Y también considerando que el campo eléctrico tiene simetría axial en coordenadas cilíndricas tal que el campo eléctrico y el potencial serán funciones de las coordenadas ρ y z , y no hay dependencia de la coordenada φ , es decir

$$\vec{E}(\rho, z) = -\nabla\Phi(\rho, z) \quad (2.27)$$

Transformando a coordenadas cilíndricas la expresión (2.26), y dado que no hay dependencia en φ^1 , se llega a que

$$\Phi(\vec{x}) = \Phi(0) - zE_\rho(0) - \frac{1}{6}(2\rho^2 - z^2)\frac{\partial E_\rho}{\partial \rho} - \frac{1}{6}(3\rho z)\frac{\partial E_\rho}{\partial \rho} - \frac{1}{6}(3\rho z)\frac{\partial E_z}{\partial \rho} - \frac{1}{6}(2z^2 - \rho^2)\frac{\partial E_z}{\partial z} \quad (2.28)$$

Si ahora se considera el caso en que $E_z \gg E_\rho$, y siendo que al ser una micropartícula, en su interior el potencial es constante, y eligiéndolo por conveniencia como $\Phi(\vec{x}_{in}) = 0$, para \vec{x}_{in} dentro de la micropartícula, entonces se tiene que

$$\frac{\partial E_\rho}{\partial z} \approx 0 \text{ y } \frac{\partial E_z}{\partial z} \approx 0 \quad (2.29)$$

entonces se obtiene

$$\Phi(\rho, z) = -zE_z(0) - \frac{1}{6}(2z^2 - \rho^2)\frac{\partial E_z(0)}{\partial z} \quad (2.30)$$

introduciendo el grado de no homogeneidad Q se obtiene

$$\Phi(\rho, z) = -zE_0 - QE_0(2z^2 - \rho^2) \quad (2.31)$$

Considerando la expresión (2.26) se obtiene la expresión del campo eléctrico

$$\vec{E}(\rho, z) = -2E_0Q\rho\hat{u}_\rho + E_0(1 + 4zQ)\hat{u}_z \quad (2.32)$$

Este campo eléctrico no homogéneo lo hemos graficado con el software comercial Mathematica y se muestra en la figura 2.2, con un factor de no homogeneidad Q=0.1.

¹En el desarrollo matemático, ya que se considera que no hay dependencia en la coordenada φ , se elige por simplicidad $\varphi = 0$ para las transformaciones de coordenadas.

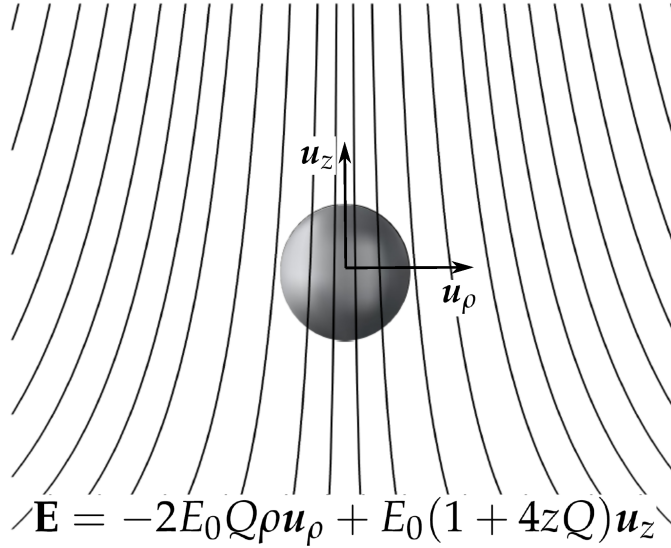


Figura 2.2: Micropartícula esférica inmersa en un campo eléctrico no uniforme [6]

2.5. Flujo electroosmótico

Para tomar en cuenta el flujo electroosmótico debido a la acción del campo eléctrico no homogéneo sobre la doble capa al rededor de la micropartícula hacemos uso del teorema de reciprocidad para fluidos, el cual nos permite cuantizar la velocidad imprimida sobre la micropartícula debido al flujo electroosmótico (ICEO).

El teorema de reciprocidad de fluidos dice que

$$\int \hat{n} \cdot \mathbb{T}_1 \cdot \vec{u}_2 dS = \int \hat{n} \cdot \mathbb{T}_2 \cdot \vec{u}_1 dS \quad (2.33)$$

donde un problema general se parte en dos problemas 1 y 2, siendo \mathbb{T}_1 y \vec{u}_1 el tensor de esfuerzos hidrodinámico y la velocidad de la partícula en el problema 1, respectivamente. Mientras que, \mathbb{T}_2 y \vec{u}_2 , el tensor hidrodinámico y velocidad de la partícula del problema 2, respectivamente. En nuestro caso, el problema general consiste el de una partícula que se mueve con velocidad, dada por

$$\vec{u} = \vec{u}_s + \vec{U} \quad (2.34)$$

donde \vec{u}_s es la velocidad slip y \vec{U} es la velocidad de traslación, de la partícula. Considerando equilibrio mecánico entre los dos problemas que se expresa como

$$\int \hat{n} \cdot \mathbb{T}_1 dS = - \int \hat{n} \cdot \mathbb{T}_2 dS \quad (2.35)$$

$$\int \vec{r} \times (\hat{n} \cdot \mathbb{T}_1) dS = - \int \vec{r} \times (\hat{n} \cdot \mathbb{T}_2) dS \quad (2.36)$$

Considerando estas dos condiciones en la expresión (2.33), se obtiene la expresión de la velocidad de la partícula debido al flujo electroosmótico dada por la expresión

$$\vec{U}_{ICEP} = - \frac{\int_s (\hat{n} \cdot \mathbb{T} \cdot \vec{v}_s)}{\int_s (\hat{n} \cdot \mathbb{T} \cdot \vec{u}_z)} \quad (2.37)$$

donde \vec{v}_s es la velocidad de deslizamiento que está dada por

$$\vec{v}_s = - \left(\frac{\epsilon}{4\mu} \right) \nabla_t \left| \tilde{\Phi} - V \right|^2 \quad (2.38)$$

mientras que el denominador de la ecuación (2.37) nos permite encontrar el coeficiente de fricción viscoso para la micropartícula que en el caso de una esfera de radio R el coeficiente de fricción viscoso es $6\pi R$.

2.6. Dipoloforesis Esfera Metálica

2.6.1. Aproximaciones Analíticas

En esta sección presentamos algunos resultados teóricos que han sido obtenidos en la literatura y que nos servirán como una manera de validar nuestros resultados de simulación numérica, es decir validar nuestra metodología, para partículas metálicas esféricas [21]. Así para la velocidad dielectroforética se tiene la siguiente expresión,

$$U_{DEP} = \frac{\epsilon R^2}{6\mu} \left(\frac{-2 + \tilde{\omega}^2}{4 + \tilde{\omega}^2} \right) \nabla E^2 \quad (2.39)$$

Mientras que, para la velocidad electroforética de carga inducida esta dada por,

$$U_{ICEP} = \frac{R^2 \epsilon}{2\mu} \left(\frac{6 + \tilde{\omega}^2}{36 + 13\tilde{\omega}^2 + \tilde{\omega}^4} \right) \nabla E^2 \quad (2.40)$$

Por otro lado, el coeficiente de fricción viscoso, f , de la expresión (2.1), para una esfera de radio R está dado por

$$f = 6\pi\mu R \quad (2.41)$$

Para la evaluación numérica de las expresiones (2.39) y (2.40), tomamos en cuenta la expresión del campo eléctrico No uniforme (2.32), con $Q=0.1$.

2.6.2. Aproximación del dipolo puntal

Los cálculos de simulación numérica en nuestro sistema de trabajo se basan en la consideración (2.5), la cual se cumple ya para un amplio rango de concentraciones del electrolito debido a que λ_D es de unos cuantos decenas de nanómetros, mientras que consideramos partículas cuya longitud característica es de $6\mu m$. Debido a que la doble capa eléctrica se puede considerar como un capacitor con capacitancia C_{DL} , incorporamos la información de la doble capa eléctrica como condición de frontera, con esto en lugar de resolver la ecuación de Poisson resolvemos la ecuación de Laplace con la condición de frontera en la superficie de la partícula dada por

$$\sigma \frac{\partial \Phi}{\partial n} \Big|_S = i\omega C_{DL}(\Phi - V) \quad (2.42)$$

donde V es el voltaje en la partícula metálica, consideramos que $V=0$, y σ es la conductividad eléctrica del electrolito.

Resolvemos la ecuación de Laplace para determinar el dipolo eléctrico puntal, y por medio de la expresión de la velocidad dielectroforética (2.24), en ésta el campo es el dado por la expresión (2.32).

2.6.3. Aproximación del tensor de esfuerzos de Maxwell

En esta subsección describimos el método para calcular numéricamente la velocidad dielectroforética U_{DEP} , por medio del tensor de esfuerzos de Maxwell dado por la expresión (1.11). Para esto la fuerza dielectroforética, \vec{F}_{DEP} , sobre la partícula esférica, en este caso la calculamos por medio de la expresión (1.59), mientras que, el campo eléctrico lo calculamos como se mencionó en la subsección anterior por medio de la ecuación (2.32), para lo cual consideramos la aproximación de doble capa eléctrica delgada, ecuación (2.42).

Con base en lo anterior, la velocidad dielectroforética en estado estacionario está dada por medio de la expresión siguiente.

$$\vec{U}_{DEP} = \frac{\vec{F}_{DEP}}{f} \quad (2.43)$$

donde f es el coeficiente de fricción viscoso, que lo evaluamos numéricamente por medio del numerador de la expresión (2.37) que es una de las contribuciones importantes de nuestra metodología.

2.7. Dielectroforesis Esfera Dieléctrica

En partículas dieléctricas, la doble capa eléctrica es muy pequeña, por lo que en los estudios de dielectroforesis con dieléctricos no se considera [22]. En la sección 2.3 se ha discutido el caso de partículas dieléctricas esféricas de radio R y se llega a que la velocidad dielectroforética para partículas dieléctricas esféricas está dada por la expresión (2.24), mientras que el factor Clausius Mossotti compleja tiene la forma dada por la relación (2.21).

Dielectroforesis de una partícula metálica esférica
2.7 Dielectroforesis Esfera Dieléctrica

Tomando en cuenta la forma del campo eléctrico no uniforme dado por la relación (2.32) y sustituyendo en la expresión de la velocidad dielectroforética (2.24), tenemos

$$\vec{U}_{DEP} = \frac{8}{3} U_0 \text{Re} [\hat{K}] \quad (2.44)$$

donde

$$U_0 = \frac{\epsilon_m Q E_0^2 R^2}{\mu} \quad (2.45)$$

Como estamos interesados en comparar el comportamiento de la velocidad dielectroforética entre partículas esféricas, metálicas y dieléctricas, para esto hacemos un estudio adimensional, por lo que introducimos las siguientes cantidades sin dimensiones: la frecuencia sin dimensiones.

$$\tilde{\omega} = \frac{\omega C_{DL} R}{\sigma_m} \quad (2.46)$$

donde el tiempo característico de carga de la doble capa eléctrica, τ_{RC} , que de acuerdo a Morgan a Green [5], ellos consideran a la doble capa como un condensador de capacidad C_{DL} y al electrolito como un resistor de resistencia r , así

$$\tau_{RC} = r C_{DL} \approx \frac{R C_{DL}}{\sigma_m} \quad (2.47)$$

Las partículas dieléctricas también tienen asociado un tiempo característico, que de acuerdo con Pething el parámetro dado por,

$$\tau = \frac{\epsilon_p + 2\epsilon_m}{\sigma_p + 2\sigma_m} \quad (2.48)$$

éste representa "el tiempo en que cambia la suma algebraica, la carga ligada y libre alrededor de la partícula que está asociada al dipolo eléctrico" [22]. Tomando en cuenta las expresiones (2.45) - (2.48) en la ecuación (2.44) obtenemos la velocidad dielectroforética para partículas dieléctricas esféricas en forma adimensional, y está dada por

$$\frac{U_{DEP}}{U_0} = \frac{8}{3} \left[\left(\frac{\left(\frac{\tilde{\omega}\tau}{\tau_{RC}} \right)^2}{1 + \left(\frac{\tilde{\omega}\tau}{\tau_{RC}} \right)^2} \right) \left(\frac{\epsilon_p - \epsilon_m}{\epsilon_p + 2\epsilon_m} \right) + \left(\frac{1}{1 + \left(\frac{\tilde{\omega}\tau}{\tau_{RC}} \right)^2} \right) \left(\frac{\left(\frac{\sigma_p}{\sigma_m} \right) - 1}{\left(\frac{\sigma_p}{\sigma_m} \right) + 2} \right) \right] \hat{e}_z \quad (2.49)$$

Capítulo 3

Resultados de la dipoloforesis

En este capítulo presentamos los resultados de nuestro estudio de la dielectroforesis de esferas y varillas metálicas, así como de esferas dieléctricas, que están inmersas en una solución electrolítica acuosa. En el caso de partículas metálicas, se calcula la velocidad dipoloforética, U_{DIP} , que consiste de las contribuciones de la velocidad dielectroforética, U_{DEP} , y aquella debida al flujo electroosmótico U_{ICEO} . Mientras que, en el caso de una microesfera dieléctrica, solo calculamos su velocidad dielectroforética U_{DEP} . En el capítulo 2 de se ha mostrado la formulación para dieléctricos, así como nuestra metodología para trabajar con micropartículas metálicas. Así también se han mostrado en el capítulo 2 resultados analíticos tanto para partículas metálicas como dieléctricas, que nos servirán de referencia para validar nuestros resultados numéricos. La dielectroforesis es de gran importancia para la ciencia y la tecnología, ya que ha mostrado ser una gran herramienta para separar micropartículas, aunque también es muy útil para la caracterización de micropartículas, esto se debe a que la fuerza dielectroforética es una fuerza que depende de las propiedades dieléctricas de las partículas y del medio acuoso, lo cual la hace conveniente para definir su trayectoria, además de que es una fuerza no destructiva. Es por eso que, en este trabajo de tesis, nos interesa la diferencia de esta fuerza en partículas conductoras y dieléctricas. Este capítulo está estructurado de la siguiente manera, en la sección 1, presentamos valores típicos en los experimentos de dielectroforesis de las partículas metálicas, dieléctricas y la solución acuosa, así como la manera de escalar las cantidades físicas de modo que los resultados presentados son adimensionales. En la siguiente sección 2, mostramos los resultados numéricos obtenidos por medio de nuestro esquema de trabajo resolviendo la ecuación de Laplace y de Navier-Stokes, con lo que obtenemos la velocidad dielectroforética de esferas y nanovarillas metálicas como también la contribución debida al flujo electroosmótico cerca de las partículas metálicas. Posteriormente, en la sección 3, presentamos nuestros resultados numéricos para dielectroforesis de partículas esféricas dieléctricas, en términos de la razón de dos tiempos característicos. En la sección 4 hacemos un análisis comparativo entre dielectroforesis de partículas metálicas y dieléctricas, de lo cual se muestran las diferencias esenciales entre partículas metálicas y dieléctricas. Finalmente, en la sección 5, realizamos una breve discusión de los resultados numéricos y su validación con los resultados analíticos en partículas esféricas.

3.1. Valores típicos y escalamiento

En esta sección presentamos los valores típicos en un experimento de dielectroforesis de partículas metálicas y dieléctricas inmersas en una solución acuosa y expuesta a la acción de un campo eléctrico no homogéneo. En la Tabla de abajo mostramos en primer lugar los valores típicos en la dipoloforesis de partículas metálicas. Y la siguiente tabla se muestran los valores típicos en un experimento de dielectroforesis de partículas dieléctricas, así como las características de la solución electrolítica donde están inmersas las partículas.

	Partícula	Medio
Sustancia	Ti	KCl disuelto en agua
Conductividad [S/m]	2.38×10^6	1.5×10^{-3}
Permitividad relativa	-	$80\epsilon_0$
Radio [m]	5.0×10^{-6}	-
Campo Eléctrico [V/m]		10^8
Temperatura [k]		300
Factor de no Homogeneidad		0.1
Velocidad Dielectroforética obtenida [$\mu m/s$]		50

Tabla 3.1: Dielectroforesis de una micropartícula metálica

	Partícula	Medio
Sustancia	Porcelana	KCl disuelto en agua
Conductividad [S/m]	10×10^{-3}	1.5×10^{-3}
Permitividad relativa	$10\epsilon_0$	$80\epsilon_0$
Radio [m]	5.0×10^{-6}	-
Sustancia	Virus del Tabaco	Acetona
Conductividad [S/m]	0.1×10^{-3}	1.5×10^{-3}
Permitividad relativa	$60\epsilon_0$	$20\epsilon_0$
Radio [m]	5.0×10^{-6}	-
Campo Eléctrico [V/m]		10^8
Temperatura [k]		300
Factor de no Homogeneidad (Q)		0.1

Tabla 3.2: Dielectroforesis de una micropartícula dieléctrica. Se toman dos sustancias: KCl disuelto en agua, y acetona disuelta en agua para asegurar que la permitividad de la partícula sea en un caso mayor a la del medio y en otro caso menor [22].

Para nuestro análisis comparativo entre la dielectroforesis de partículas metálicas y dieléctricas, hemos elegido los factores de escala para las cantidades físicas del sistema, de manera que los resultados los presentamos de manera adimensional. Así, los factores de escalas son los siguientes:

1. Para la escala en longitud hemos elegido el radio R de las partículas esféricas, mientras que, para las nanovarillas elegimos el semi largo de las varillas a .
2. El potencial eléctrico lo escalamos con el factor RE_0
3. La frecuencia del potencial eléctrico ω la escalamos con el factor $\sigma/C_{DL}R$
4. Finalmente, las velocidades las escalamos con el factor $U_0 = \epsilon_m Q E_0^2 R^2 / \mu$

3.2. Dipoloforesis partículas metálicas

En esta sección presentamos los resultados de la velocidad dipoloforética de partículas esféricas y nanovarillas metálicas. En la primera subsección describimos el esquema de simulación numérica que se utiliza para calcular las velocidades dielectroforética y electroforética de carga inducida, tanto para partículas esféricas como nanovarillas. En la subsección siguiente mostramos los resultados numéricos para esferas metálicas y se comparan con aquellos obtenidos por un modelo teórico. Finalmente, presentamos los resultados numéricos de simulación para nanovarillas, para diferentes valores de β .

3.2.1. Esquema numérico en COMSOL

En el esquema de simulación numérico con COMSOL resolvemos la ecuación de Laplace y de Navier-Stokes, con las condiciones de frontera, como se muestra en la Figura 3.1. En la Figura 3.1a se puede destacar la consideración de doble capa eléctrica delgada, incorporando esta información como un capacitor efectivo. Mientras que, en la Figura 3.1b simulamos el movimiento de la partícula metálica moviéndose en la dirección z , y considerando un flujo laminar en un fluido incompresible.

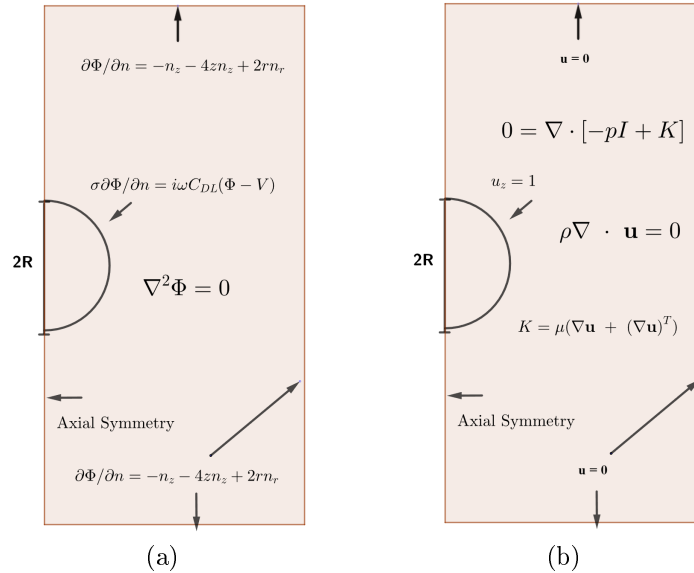


Figura 3.1: Esquema de simulación numérica con el software comercial COMSOL. En (a) el volumen de control junto con las condiciones de frontera para resolver la ecuación de Laplace. Mientras que, en (b) para resolver la ecuación de Navier-Stokes.

Al resolver la ecuación de Laplace con las condiciones de frontera, como se muestra en la Figura 3.1a, obtenemos el potencial eléctrico en toda la región de interés. Con el conocimiento del potencial eléctrico, podemos calcular la velocidad dielectroforética U_{DEP} , expresión (2.24). Esta requiere que conozcamos el dipolo eléctrico inducido p , ecuación (2.11) y que calculamos numéricamente por medio de la expresión (3.1)

$$\vec{p} = 3\epsilon \oint \Phi'(\vec{r}) \vec{n} dS \quad (3.1)$$

donde Φ' es el potencial eléctrico debido al dipolo, que es igual al potencial eléctrico total menos el campo eléctrico aplicado por los electrodos. Así, esta integral sobre la superficie de la partícula se obtiene del conocimiento del potencial eléctrico que resulta de resolver la ecuación de Laplace [17]. Las condiciones de frontera en los límites del volumen de control nos permiten encontrar numéricamente el campo no homogéneo $\vec{E}(\rho, z)$, relación (2.32). Con esto queda completamente determinada la velocidad dielectroforética.

Por otro lado, de resolver la ecuación de Navier-Stokes, como se muestra en la Figura 3.1b obtenemos el tensor de esfuerzos hidrodinámico \mathbb{T} que aparece en la ecuación (2.37) para la velocidad electroforética de carga inducida \vec{U}_{ICEP} . En relación (2.37) también se requiere la velocidad de deslizamiento alrededor de la partícula esférica metálica, que como se puede ver está en términos del potencial eléctrico $\tilde{\Phi}$, que es la solución de la ecuación de Laplace, mientras que V es el potencial en el interior de la partícula metálica que elegimos igual a cero. De este modo, queda completamente determinada la velocidad electroforética de carga inducida.

Este esquema de simulación numérica también lo aplicamos al caso de nanovarillas metálica, en la subsección 3.2.3 presentaremos dichos resultados.

3.2.2. Esfera metálica

En esta subsección presentamos los resultados numéricos obtenidos por varias aproximaciones. En primer lugar, en la Figura 3.2 se muestran los valores numéricos del espectro de la velocidad dielectroforética U_{DEP} , obtenidos por las siguientes aproximaciones:

1. Los resultados de la "analítica metálica" se refiere a la expresión teórica expresada por la relación (2.39), donde para calcular ∇E^2 , utilizamos la ecuación analítica (2.32).
2. Para la aproximación "numérica Dip" nos basamos en la aproximación dipolo puntual (2.24), para la evaluación de ésta empalemos nuestro esquema de simulación numérica con COMSOL delineado en la subsección 3.2.1.
3. La aproximación "numérica TEM" se refiere a que fueron obtenidos por medio de nuestro esquema de simulación numérica con COMSOL delineado en la subsección 3.2.1. Para esto nos basamos en la expresión (2.43) en la cual calculamos la fuerza dielectroforética empleando la expresión de Tensor de Esfuerzos de Maxwell (1.59), mientras que el denominador " f " el coeficiente de fricción viscoso lo calculamos empleando el denominador de la ecuación (2.37).

Podemos observar de estos resultados que las tres aproximaciones coinciden muy bien. Este primer resultado valida nuestra metodología de simulación numérica por su coincidencia con el resultado teórico. Vemos que las dos aproximaciones numéricas nos dicen que, en el caso de partículas metálicas, la aproximación de dipolo puntual es correcta. También observamos que para frecuencias pequeñas la partícula se mueve en la dirección negativa, mientras que para frecuencias grandes la velocidad dielectroforética es en la dirección positiva. Considerando los datos de la tabla 3.1 y un valor de $\tilde{Q} = 0.1$ vemos que a frecuencias altas la partícula se mueve con una velocidad de $46\mu\text{m}/\text{s}$, mientras que a frecuencias bajas se mueve con velocidad de $-23\mu\text{m}/\text{s}$, se invierte el sentido del movimiento de la esfera metálica.

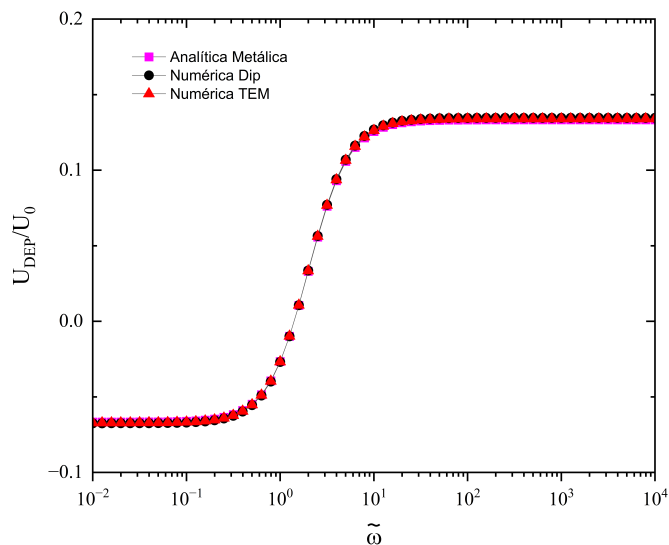


Figura 3.2: Velocidad dielectroforética calculada por medio de tres aproximaciones, resultado teórico, dipolo puntual y por medio de usar el tensor de esfuerzos de Maxwell.

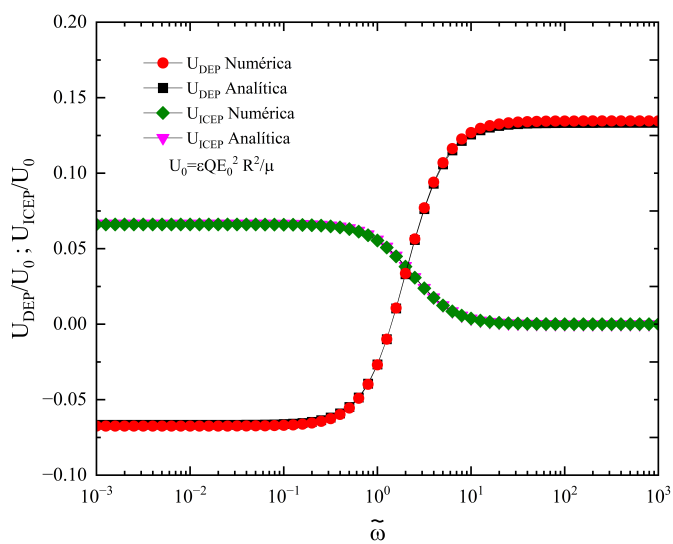


Figura 3.3: Velocidad dielectroforética (U_{DEP}) y electroosmótica inducida (U_{ICEO}) para una esfera metálica. Solución numérica y la solución teórica

En la Figura 3.3 se muestran conjuntamente las velocidades dielectroforéticas y electroforéticas. También observamos la coincidencia con los resultados teóricos (2.39) y (2.40), para la velocidad dielectroforética y electroforética, respectivamente. La coincidencia numérica es completa, lo que valida TODO nuestro esquema de simulación numérica con COMSOL. Y se observa que, a bajas frecuencias, la velocidad dielectroforética $U_{DEP} = -23\mu m/s$ y la velocidad electroforética $U_{ICEP} = 23\mu m/s$. Mientras que, a altas frecuencias, la velocidad dielectroforética $U_{DEP} = 46\mu m/s$, como ya se había mencionado, y la velocidad electroforética en este rango $U_{ICEP} = 0\mu m/s$. En forma simbólica se observa que:

$$|U_{DEP}(\tilde{\omega} = 0)| = |U_{ICEP}(\tilde{\omega} = 0)| \quad (3.2)$$

y también,

$$|U_{DEP}(\tilde{\omega} = \infty) - U_{ICEP}(\tilde{\omega} = \infty)| = 2U_{ICEP}(\tilde{\omega} = 0) \quad (3.3)$$

Como resultado de sumar las velocidades U_{DEP} y U_{ICEP} , de la Figura 3.3 anterior, obtenemos la Figura 3.4 que muestra la Velocidad dipoloforética U_{DIP} , esta nos muestra que para frecuencias bajas no hay velocidad de la partícula, de este modo la partícula esférica solo se mueve a frecuencias mayores a $\tilde{\omega} = 10$.

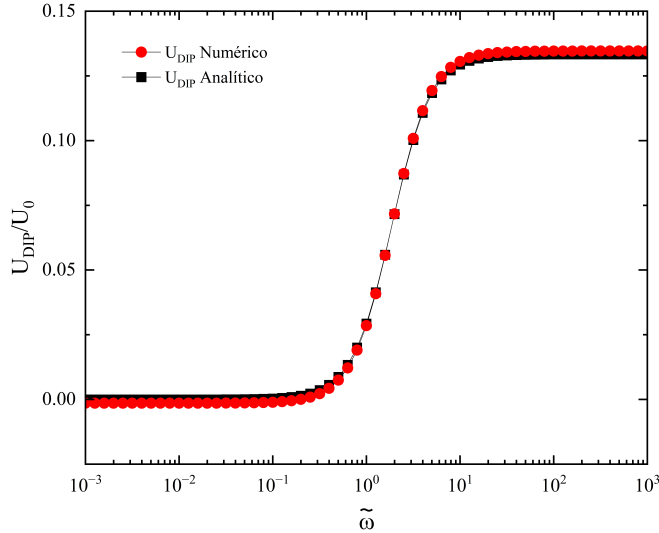


Figura 3.4: Velocidad dipoloforética, U_{DIP} , para la solución numérica y la solución teórica

3.2.3. Varillas metálica

El estudio de nanovarillas metálicas es completamente numérico, donde hemos implementado nuestro esquema de simulación descrito en la subsección 3.2.1. En la Figura 3.5, en (a) se muestra la geometría utilizada para nuestra simulación numérica, para diferentes razones de semieje a con el radio de las nanovarillas b , es decir, para varios valores del parámetro $\beta = b/a$. Para el cálculo de la velocidad dielectroforética U_{DEP} se ha considerado las dos aproximaciones, a saber la aproximación dipolo puntual, DP, y la aproximación basada en el Tensor de esfuerzos de Maxwell, TEM, se observa que ambas aproximaciones coinciden muy bien para todos los valores de β . Observamos que conforme β va aumentando, la velocidad dielectroforética va aumentando tanto

Resultados de la dipoloforesis
3.3 Comparación Dielectroforesis Metálicas y Dieléctricas

a frecuencias bajas como a frecuencias altas. En cuanto a la Velocidad electroforética U_{ICEP} a frecuencias altas, la velocidad electroforética es cero como en el caso de las esferas metálicas, pero a frecuencias bajas la velocidad electroforética va aumentando conforme β aumenta. Finalmente, observamos que las ecuaciones (3.2) y (3.3), ahora no se cumplen, esto debido al rompimiento de la simetría en relación con una partícula esférica.

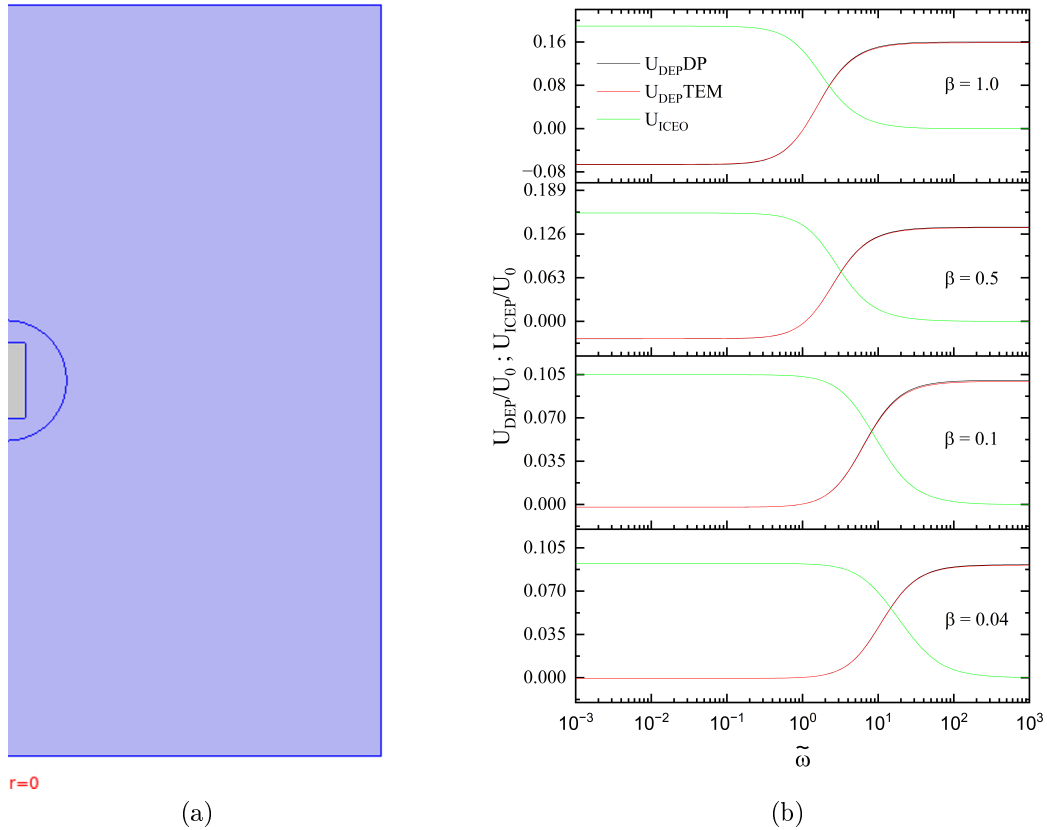


Figura 3.5: Dielectroforesis de nanovarillas metálicas. En (a) se muestra la geometría para implementar nuestro esquema de simulación numérica. (b) Velocidad dielectroforética, U_{DEP} y electroosmótica inducida, U_{ICEO} para una nano varilla metálica.

3.3. Comparación Dielectroforesis Metálicas y Dieléctricas

En esta sección presentamos una comparación de la Velocidad dielectroforética U_{DEP} , entre nuestros resultados de simulación numérica para la Velocidad dielectroforética para esferas metálicas y aquellos obtenidos para una esfera dieléctrica obtenidos por medio de la expresión analítica (2.49).

Los resultados de la velocidad dielectroforética para esferas metálicas ya los hemos descrito en la subsección 3.2.2, en las Figuras 3.6 y 3.7 se presentan los obtenidos por las dos aproximaciones, DP y TEM. Los valores reales para esferas metálicas se deben utilizar los datos de la Tabla 3.1,

Resultados de la dipoloforesis
3.3 Comparación Dielectroforesis Metálicas y Dieléctricas

que son datos típicos en un experimento. También se han incluido los resultados de la velocidad dielectroforética obtenidos por la expresión analítica, expresión (2.39).

En cuanto a los resultados para esferas dieléctricas, se utilizan los datos presentados en la Tabla 3.2. Para obtener la velocidad dielectroforética de partículas esféricas dieléctricas, hemos usado el primer conjunto de datos de la Tabla 3.2 para obtener la Figura 3.6. Vemos de ésta que para esferas dieléctricas para frecuencias bajas se presenta DEP positiva, mientras que, para frecuencias altas, se presenta DEP negativa. En contraste, para esferas metálicas, aun cuando, de acuerdo con la tabla 3.1 para esta también $\sigma_p > \sigma_m$, no obstante, para esferas metálicas se tiene que a frecuencias bajas se tiene DEP negativa y para frecuencias altas DEP positiva. Además, para estos datos de las tablas 3.1 y 3.2, se obtienen los tiempos característicos siguientes

$$\tau = 1.158 * 10^{-7} s, \quad \tau_{RC} = 7.66 * 10^{-5} s, \quad \frac{\tau}{\tau_{RC}} = 0.00151. \quad (3.4)$$

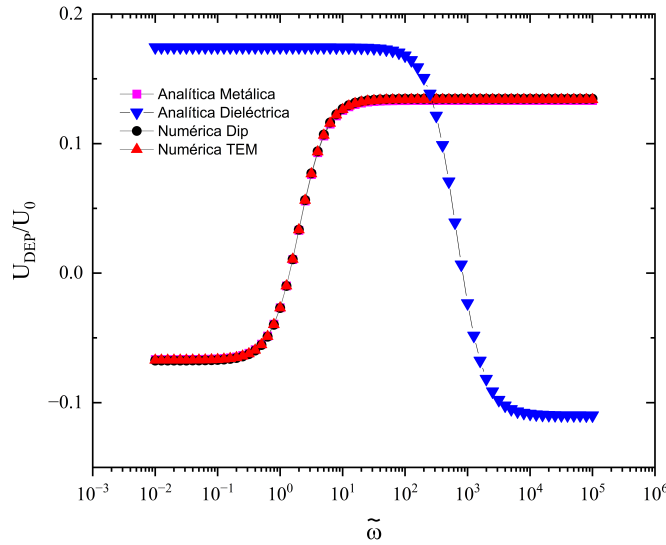


Figura 3.6: Velocidad dielectroforética para partículas dieléctricas esféricas con $\sigma_p > \sigma_m$ y $\epsilon_p < \epsilon_m$ en comparación con la velocidad dielectroforética para esferas metálicas.

Finalmente, en la Figura 3.7, se muestran los resultados numéricos de la velocidad dielectroforética para esferas dieléctricas, donde hemos tomado ahora el segundo conjunto de datos de la Tabla 3.2, para los cuales ahora $\sigma_p < \sigma_m$, y $\epsilon_p > \epsilon_m$, estos se contrastan con los de esferas metálicas. Ahora se tiene que para esferas dieléctricas a frecuencias bajas se presenta DEP negativa y para frecuencias grandes DEP positiva. Además, para estos datos de las tablas 3.1 y 3.2, se obtienen los tiempos característicos siguientes

$$\tau = 2.474 * 10^{-7} s, \quad \tau_{RC} = 7.66 * 10^{-5} s, \quad \frac{\tau}{\tau_{RC}} = 0.00323. \quad (3.5)$$

Los tiempos característicos que nos muestran las expresiones (3.4) y (3.5), nos indican que ante campos no homogéneos dependientes de la frecuencia, el reacomodo de las cargas ligadas en la interfaz (en dieléctricos) y libres en la doble capa eléctrica (en metálicas), tarda un menor tiempo en el reacomodo por dos órdenes de magnitud, que parece físicamente consistente en la distancia que deben moverse las cargas para tener el dipolo eléctrico inducido.

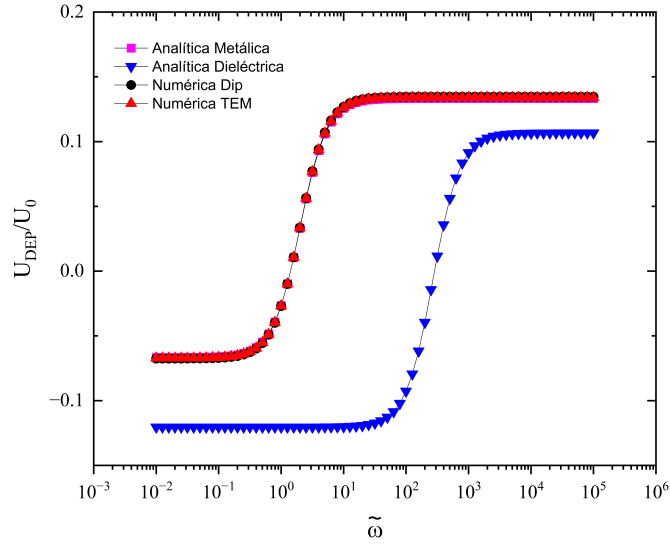


Figura 3.7: Velocidad dielectroforética para partículas dieléctricas esféricas con $\sigma_p < \sigma_m$ y $\epsilon_p > \epsilon_m$ en comparación con la velocidad dielectroforética para esferas metálicas.

Conclusiones

Hemos estudiado la dielectroforesis de partículas metálicas esféricas por medio de nuestro esquema numérico de simulación que se basa en resolver la ecuación de Laplace y Navier-Stokes. Comparando nuestros resultados numéricos de la velocidad dielectroforética, U_{DEP} , con expresiones analíticas de la literatura, encontramos una gran coincidencia numérica. Esta coincidencia da validación a nuestro esquema de trabajo.

Los resultados numéricos de simulación basados en la aproximación dipolo puntual coinciden con aquellos que se basan en el tensor de esfuerzos de Maxwell.

Se encuentra que para partículas metálicas esféricas, la velocidad de electroforesis de carga inducida, U_{ICEP} , también coinciden nuestros resultados numéricos con aquellos de expresiones analíticas de la literatura. Lo cual también muestra que nuestro esquema de trabajo numérico es válido.

Para partículas metálicas, se observa de los resultados numéricos dos relaciones entre la velocidad dielectroforética y electroforética, a saber expresiones (3.2) y (3.3).

Hemos aplicado nuestro esquema numérico de simulación para el estudio de la dipoloforesis de nanovarillas metálicas, con diferente razón de $\beta = b/a$. Se encuentra que para todo β la velocidad electrocinética a frecuencias altas es cero, mientras que a frecuencias bajas aumenta conforme β crece. En cambio, la velocidad dielectroforética a frecuencias grandes crece conforme β crece. Además, a frecuencias bajas la velocidad dielectroforética se vuelve cada vez más negativa conforme β crece. Finalmente, respecto a las nanovarillas metálicas, ya no se cumplen las relaciones (3.2) y (3.3), creemos que se debe a la simetría de las nanovarillas respecto a las esféricas.

En relación con el estudio comparativo de la dielectroforesis de partículas esféricas, dieléctricas y metálicas, vemos que en ambas se presentan la nDEP y pDEP. Las combinaciones entre las conductividades eléctricas y permitividades eléctricas entre el medio y la partícula proporcionan más variantes de posibles aplicaciones.

Mientras que, en lo que se refiere a los tiempos característicos de la carga inducida y libre en la interfase de partículas dieléctricas y metálicas, encontramos que $\tau < \tau_{RC}$, es decir, ante campo no homogéneo dependiente de la frecuencia, la respuesta de la formación del dipolo es más rápida en partículas dieléctricas que en metálicas, por dos órdenes de magnitud.

Finalmente, como trabajo a futuro está la posibilidad de realizar los experimentos en el laboratorio de microfluídica del Dr. Antonio Ramos Reyes de la Universidad de Sevilla, con el que colabora el Dr. José Eladio Flores Mena.

Bibliografía

- [1] Hansen, J., & McDonald, I. (2006). *Theory of Simple Liquids*. Elsevier.
- [2] Masliyah, J. H., & Bhattacharjee, S. (2006). *Electrokinetic and Colloid Transport Phenomena*. John Wiley & Sons.
- [3] Morgan, H., & Green, N. G. (2003). *AC Electrokinetics: Colloids and nanoparticles*. Research Studies Press Limited.
- [4] Liou, W., & Fang, Y. (2005). *Microfluid Mechanics: Principles and Modeling*. McGraw Hill Professional.
- [5] Qian, S., & Ai, Y. (2012). *Electrokinetic Particle Transport in Micro-/Nanofluidics: Direct Numerical Simulation Analysis*. CRC Press.
- [6] Flores-Mena, J. E., García-Sánchez, P., & Ramos, A. (2020). Dipolophoresis and Travelling-Wave Dipolophoresis of Metal Microparticles. *Micromachines*, 11(3), 259. <https://doi.org/10.3390/mi11030259>
- [7] *INTRODUCTION TO COMSOL Multiphysics* (5.3). (2017). COMSOL.
- [8] Kim, N., Sankar, B. V., & Kumar, A. V. (2018). *Introduction to Finite Element Analysis and Design*. John Wiley & Sons.
- [9] Tabeling, P. (2010). *Introduction to Microfluidics*. Oxford University Press.
- [10] Dixit, C. K., & Kaushik, A. (2016). *Microfluidics for Biologists: Fundamentals and Applications*. Springer.
- [11] Rathore, A., & Guttman, A. (2005). *Electrokinetic Phenomena: Principles and Applications in Analytical Chemistry and Microchip Technology*. Marcel Dekker, Inc.
- [12] Kim, G., Lim, J., & Mo, C. (2016). Applications of Microfluidics in the Agro-Food Sector: A Review. *Baio Si'seu'tem Gonghag/Journal Of Biosystems Engineering*, 41(2), 116-125. <https://doi.org/10.5307/jbe.2016.41.2.116>
- [13] Lapizco Encinas, B. H. (2008). *Aplicaciones de Microfluidica en Bioseparaciones.: Microfluidics Applications in Bioseparations*. Revista Mexicana de Ingeniería Química, 7(3), 205-214.
- [14] Holmes, D., & Gawad, S. (2009). The application of microfluidics in biology. *Methods in molecular biology* (pp. 55-80). https://doi.org/10.1007/978-1-60327-106-6_2
- [15] Griffiths, D. J. (1999). *Introduction to Electrodynamics* (3rd ed). Prentice-Hall, Inc.
- [16] Jackson, J. D. (1975). *Classical Electrodynamics* (2.a ed.). John Wiley & Sons.

- [17] Jackson, J. D. (1998). *Classical Electrodynamics* (3.a ed). John Wiley & Sons.
- [18] Wangsness, R. K. (2001). *Campos electromagnéticos*. Limusa S.A. De C.V.
- [19] Sadiku, M. N. O. (2015). *Elements of electromagnetics* (6.a ed.). Oxford University Press.
- [20] Young, H. D., Freedman, R. A., Ford, A. L., Zemansky, M. W., & Sears, F. W. (2009). *University Physics: With Modern Physics (12.a ed., Vol. 2)*. Addison-Wesley.
- [21] Ramos, A., García-Sánchez, P., & Morgan, H. (2016). AC electrokinetics of conducting microparticles: A review. *Current Opinion In Colloid & Interface Science*, 24, 79-90. <https://doi.org/10.1016/j.cocis.2016.06.018>
- [22] Pething, R. (2017), *Dielectrophoresis* (1st. ed.), John Wiley & Sons.

Apéndice A

- .1. Constancia Congreso Nacional de Física, Morelia, Michoacán, 2023



La Sociedad Mexicana de Física



Agradece la asistencia y participación de:

CARLOS RAÚL HERNÁNDEZ MORENO
BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

en el **LXVI Congreso Nacional de Física**
Centro de Convenciones y Exposiciones del 8 al 13 de octubre de 2023
MORELIA, MICHOACÁN

Dr. Julio G. Mendoza Álvarez
PRESIDENTE

Apéndice B

- .2. Poster presentado Congreso Nacional de Física, Morelia, Michoacán, 2023

En este trabajo estudiamos el fenómeno de dipoloforesis de micropartículas esféricas metálicas mediante campos eléctricos no homogéneos AC y comprender sus interacciones electrocinéticas en una solución electrolítica. La dipoloforesis se refiere al movimiento inducido de partículas polarizables debido a la interacción entre el dipolo inducido en la partícula y el campo eléctrico aplicado. La importancia de este proyecto radica en el potencial de la dipoloforesis para la manipulación y control de micropartículas metálicas en soluciones electrolíticas. Estas partículas pueden tener aplicaciones en diversos campos, como la nanotecnología, la biomedicina y la ciencia de materiales. El esquema teórico utilizado para abordar el problema se basa en el uso de modelos teóricos y aproximaciones numéricas. Se emplea el software COMSOL Multiphysics para calcular la velocidad de las micropartículas esféricas utilizando la aproximación de dipolo puntual y el tensor de esfuerzos de Maxwell, mediante el teorema de reciprocidad de fluidos. La hipótesis principal del proyecto se basa en la existencia de una doble capa eléctrica delgada alrededor de las micropartículas metálicas, que interactúa con el campo eléctrico aplicado y desencadena la dipoloforesis. Se plantea que la manipulación precisa de la fuerza y la dirección de esta doble capa permitirá controlar el movimiento y la posición de las micropartículas metálicas en la solución electrolítica. Los resultados que presentamos incluyen la caracterización cuantitativa de la dipoloforesis de las micropartículas esféricas metálicas, la validación de los cálculos numéricos mediante comparaciones analíticas, el análisis comparativo de las velocidades dielectroforéticas entre micropartículas dieléctricas y metálicas. Se realiza un análisis comparativo entre las velocidades dielectroforéticas de micropartículas esféricas, dieléctricas y metálicas.

INTRODUCCIÓN

El control preciso de pequeñas partículas en suspensión líquida es posible mediante la aplicación de campos eléctricos de AC [1,2,3]. En particular, la manipulación de partículas metálicas y semiconductoras dispersas en electrolitos acuosos ha recibido mucha atención en la última década. Ejemplos de manipulación de partículas por campos de AC incluyen el transporte de esferas metálicas y nano cables [4]. En general, estos trabajos muestran que la respuesta eléctrica de micropartículas metálicas está determinada por la formación de una doble capa eléctrica inducida (EDL) en la superficie de la partícula, es decir, en la interfaz entre la partícula y el electrolito. El campo eléctrico aplicado no solo induce cargas dentro de las EDL, sino que también interactúa con ellas y da lugar a una serie de fenómenos comúnmente denominados electrocinética de carga inducida [5]. En contraste, la electrocinética de las partículas aislantes está determinada principalmente por la carga superficial intrínseca que aparece naturalmente en las interfaces sólido-electrolito [6]. Esta carga solo se ve perturbada ligeramente por los campos eléctricos aplicados. La dielectroforesis de esferas en esta situación ya ha sido estudiada y reproducimos resultados analíticos anteriores [1, 7].

MARCO TEORICO

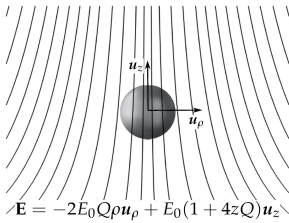


Figura 1. Microesfera Metálica, inmersa en solución electrolítica

$$\phi = \text{Re}[\tilde{\phi} \exp i\omega t]$$

$$U_{ICEP} = -\frac{\int_S (n \cdot T \cdot v_s) dS}{\int_S (n \cdot T \cdot u_x) dS} \quad (2)$$

$$U_{DIP} = U_{DEP} + U_{ICEP}$$

Microesfera metálica

Resolvemos el problema de Laplace donde $\tilde{\phi} = \tilde{\phi}_1 + \tilde{\phi}_2$, ya que, se considera el potencial no homogéneo hasta orden cuadrupolar

$$\tilde{\phi}_1 = -rcos(\theta) + \frac{A_1}{r^2} [\cos(\theta)]$$

$$\tilde{\phi}_2 = -2r^2 P_2[\cos(\theta)] + \frac{A_2}{r^3} P_2[\cos(\theta)]$$

Aplicado la condición de frontera de capacitancia diferencial, es decir, incorporamos la información de la doble capa en las condiciones de frontera

$$\sigma \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial n} \Big|_s = i\omega C_{DL}(\tilde{\phi} - V)$$

De esta se obtienen los coeficientes

$$A_1 = \frac{-1 + i\Omega}{2 + i\Omega} \quad A_2 = 2 \frac{-2 + i\Omega}{3 + i\Omega}$$

$$U_{DEP} = \frac{8\epsilon\bar{Q}E_0^2\alpha}{6\eta} \left(\frac{-2 + \Omega^2}{4 + \Omega^2} \right) \quad (3)$$

$$U_{ICEP} = \frac{4\epsilon\bar{Q}E_0^2\alpha}{\eta} \left(\frac{6 + \Omega^2}{36 + 13\Omega^2 + \Omega^4} \right) \quad (4)$$

$$\Omega = \omega C_{DL} \frac{a}{\sigma}$$

Dos efectos son relevantes en este sistema: a) La microesfera metálica, debido a la inducción de un dipolo eléctrico, experimenta una fuerza dielectroforética

$$F_{DEP} = \frac{1}{2} \text{Re}[\tilde{p} \cdot \nabla \tilde{E}^*] \quad F_{DEP} = \frac{1}{2} \epsilon \int_S \text{Re} \left[EE^* - \frac{1}{2} \mathbb{I}(E \cdot E^*) \right] \cdot dS$$

$$F_{drag} = -6\pi\eta a v$$

En condiciones estacionarias, la fuerza dielectroforética y de arrastre se compensan, dando origen a la velocidad uniforme que llamamos Velocidad Dielectroforética

$$U_{DEP} = \frac{F_{DEP}}{6\pi\eta a} \quad (1)$$

b) Como se crea alrededor de la microesfera una doble capa, ésta siente la presencia del campo eléctrico no homogéneo y entonces, un flujo electrosmótico aparece alrededor de la microesfera, dando origen a la fuerza, que en condiciones estacionarias genera la Velocidad electrosmótica inducida.

SIMULACION

Resolvemos ecuación de Laplace para obtener $\tilde{\phi}_1$ y $\tilde{\phi}_2$

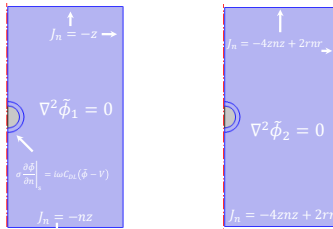


Figura 2. Solución numérica de la ecuación de Laplace, por medio de COMSOL: a) Solución de Laplace para obtener ϕ_1 , b) Solución numérica para ϕ_2

Resolvemos ecuación de Navier-Stokes para obtener el Tensor Hidrodinámico de esfuerzos

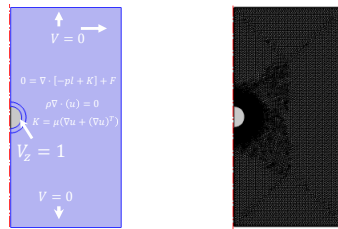


Figura 3. a) Solución numérica de la ecuación de Navier-Stokes, para obtener el Tensor de Esfuerzos Hidrodinámico, b) Mallado de volumen de control.

CONCLUSIONES

Utilizamos métodos numéricos para calcular la dipoloforesis de esferas metálicas y los resultados numéricos concuerdan perfectamente con las expresiones analíticas (3) y (4). Esta concordancia valida nuestra metodología. En base a esta validación, utilizamos el mismo enfoque numérico para el estudio de la dipoloforesis de cilindros metálicos. Para bajas frecuencias, los cálculos predicen DEP negativo de cilindros metálicos. Sin embargo, la contribución del ICEP es positiva y mucho mayor que la del DEP. Por tanto, se espera una dipoloforesis positiva de cilindros metálicos a bajas frecuencias. Por otro lado, el término ICEP se desvanece para altas frecuencias y la dipoloforesis solo está determinada por el DEP, que es positivo para cilindros metálicos. Por tanto, se predice dipoloforesis positiva para todas las frecuencias. Finalmente, la figura 6 muestra que las dos aproximaciones de dipolo puntual y del tensor de esfuerzos de Maxwell dan resultados que coinciden muy bien.

Referencias

[1] Flores-Mena, J.E., García-Sánchez, P.; Ramos, A., Dipoloforesis and Travelling-Wave Dipoloforesis of Metal Microparticles, *Micromachines*, 2020, 11,259. [2] Jones, T.B. *Electromechanics of Particles*; Cambridge University Press: Cambridge, UK, 1995. [3] Morgan, H.; Green, N.G. *AC Electrokinetics: colloids and nanoparticles*; Research Studies Press Ltd., Oxford, UK, 2003. [4] Fan, D.; Cammarata, R.; Chen, C. Precision transport and assembly of nanowires in suspension by electric fields. *Appl. Phys. Lett.* 2008, 92, 093115. [5] Bazant, M.Z.; Squires, T.M. Induced-charge electrokinetic phenomena: theory and microfluidic applications. *Phys. Rev. Lett.* 2004, 92, 066101. [6] Hunter, R. *Introduction to Modern Colloid Science*; Oxford University Press: Oxford, UK, 1993. [7] Ramos, A.; García-Sánchez, P.; Morgan, H. AC electrokinetics of conducting microparticles: A review. *Curr. Opin. Colloid Interface Sci.* 2016, 24, 79–90.

RESULTADOS

$\Omega > 1$	$C_{DL} \approx 0.023 \frac{F}{m^2}$	$E_0^2 = 10^8 \left(\frac{V}{m}\right)^2$
Concentracion $10^{-4} M$	$a = 5 \mu m$	$\bar{Q} = 0.1$
$\sigma = 1.5 \frac{mS}{M}$	$f = \frac{\omega}{2\pi} > 2 \text{ kHz}$	$U_{DEP} \approx 50 \frac{\mu m}{s}$

Tabla 1. Valores usados para el experimento de dielectroforesis de micro esferas metálicas

Microesfera metálica

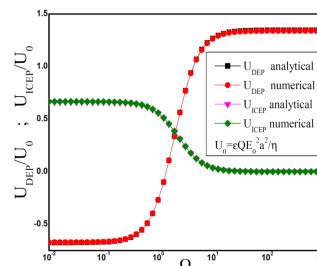


Figura 4. Resultados Teóricos y numéricos: a) Velocidad Dielectroforética y Electrosmótica debido a un campo de AC no homogéneo, b) Velocidad Dielectroforética y Electrosmótica, debido a un campo eléctrico de una onda viajera no homogénea.

Micro varillas metálica

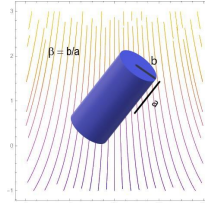


Figura 5. Micro varilla Metálica, inmersa en solución electrolítica e inmersa en una solución electrolítica acuosa, bajo la acción de un campo eléctrico No homogéneo.

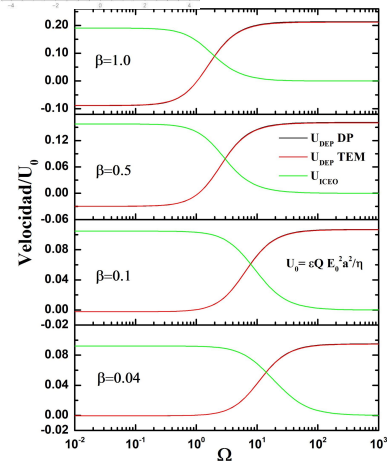


Figura 6. Velocidad de traslación de una micro varilla, velocidad Dielectroforética y Velocidad Electrosmótica para diferentes razones de radio y semialtura, β . Se observa que las velocidades Dielectroforéticas calculadas por la aproximación dipolo puntual y por medio del tensor de esfuerzos de Maxwell coinciden muy bien.

Apéndice C

- .3. Certificado 31th International Materials Research Congress, August 13th to 18th, 2023.



August 2023

TO WHOM IT MAY CONCERN

P r e s e n t

This is to certify that *Jose Eladio Flores Mena, Edy Flores Flores, Carlos Raúl Hernández Moreno, Mirna Patricia Juárez Varela, Eligio Moisés Gutiérrez Arias, Pablo García Sánchez, Antonio Ramos Reyes* presented the contribution: **PHYSICAL AND ELECTRICAL CHARACTERIZATION SEMICONDUCTING SPHERES AND METALIC MICROPARTICLES, IMMERSSED IN ELECTROLYTE SOLUTION BY ELECTOROTATION WITH AC ELECTRIC FIELDS** as **Poster** modality, in the *E3. Structural Chemical Characterization of Metal Alloys* Symposium at the **31st International Materials Research Congress** held in Cancun, Mexico from August 13th to 18th, 2023.

Sincerely,

Jesús González Hernández
President

