



BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE  
PUEBLA

---

---

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS

ESTUDIO TEÓRICO Y POR SIMULACIÓN DE LA  
ELECTROROTACIÓN DE NANOVARILLAS METÁLICAS,  
USANDO EL TEOREMA DE RECIPROCIDAD

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

FÍSICO

P R E S E N T A :

MARÍA FERNANDA ROJANO CACHO

DIRECTORES DE TESIS

DR. JOSÉ ELADIO FLORES MENA, DRA. EDY FLORES  
FLORES



CIUDAD UNIVERSITARIA, CD. PUEBLA., 2021

**Título:** Estudio teórico y por simulación de la electrorrotación de nanovarillas metálicas, usando el teorema de reciprocidad.

**Estudiante:** María Fernanda Rojano Cacho

## COMITÉ

---

Dra. Honorina Ruíz Estrada.  
Presidente

---

Dr. Juan Nieto Frausto.  
Secretario

---

Dr. Roberto Ramírez Sánchez.  
Vocal

---

Dra. Patricia Mendoza Mendez .  
Vocal

---

Dr. Jose Eladio Flores Mena  
Asesor

---

Dra. Edy Flores Flores  
Asesor

*Dedicatoria ... A mi hermana Jacky, a Foster y a todo aquel que alguna vez se haya  
cruzado en mi camino dejándome alguna valiosa enseñanza y hoy no se encuentre  
aquí.*

# Agradecimientos

Es complicado poder expresar con tan solo palabras la gratitud que siento hacia mis padres, mi nana y mi familia, por su inmenso sacrificio, y cariño, gracias por brindarme todas y cada una de las oportunidades.

Con toda honestidad expreso la gratitud hacia el Dr. José Eladio Flores Mena mi director de tesis. Ha sido un placer trabajar con usted, por soportar mis torpezas con tanta paciencia y enseñarme tanto gracias.

Doy las gracias a colegas de penas y alegrías, mis amigas Miriam, Ivonne y Aletvia, a mi inseparable e incondicional Caracol por tolerar con tanto talante cada uno de mis malos ratos, y Antonio que en tan poco tiempo se gano un gran espacio en mi vida, a Mariana en su afán por darme esos consejos prácticos brevisismos y simples siempre, para con Timmy, Nemo, Tyrion , Michelle y Rexxar de quienes siempre recibo un amor incondicional gracias aunque no sepan leer.

También agradezco el apoyo a través del proyecto, 100017966-VIEP2019, con titulo "Manipulación de micropartículas inmersas en una solución electrolítica por medio de campos eléctricos alternos", del Cuerpo Académico, BUAP-CA-259 - Sistemas No Lineales: Modelado, Simulación e Implementación, siendo responsable el Dr. José Eladio Flores Mena. Estoy a un en deuda con muchos de mis profesores por hacerme menos ignorante.

# Resumen

En este trabajo de tesis se estudia una técnica de manipulación de micropartículas, conocida como electrorrotación, esta técnica se emplea para caracterizar micropartículas por ejemplo células vivas. El sistema estudiado, consiste de micro-varillas metálicas inmersas en una solución electrolítica acuosa, actuada por medio de campos eléctricos de corriente alterna. Cuatro fenómenos relevantes están presentes en este sistema, el torque eléctrico ejercido por el campo eléctrico aplicado sobre el dipolo eléctrico inducido en la micro partícula; la carga eléctrica de la doble capa cerca de la micropartícula al sentir el campo eléctrico aplicado que crea un flujo electro-osmótico alrededor de la misma, dando lugar a un torque sobre la microvarilla; otro de los fenómenos es el movimiento Browniano de la microvarilla y finalmente la influencia de las paredes donde esta confinada la solución coloidal. No se consideran los dos últimos efectos en este estudio, se consideró una dispersión coloidal muy diluida de manera que la interacción micro varillas no es relevante. Debido a lo anterior, la velocidad angular de la micropartícula conductora tiene dos contribuciones una debida al par aplicado sobre el dipolo eléctrico y otra debido al flujo electro osmótico.

La contribución a la velocidad de rotación debido al par eléctrico, se encontró resolviendo la ecuación de Laplace, para un campo eléctrico de corriente alterna que rota y la información de la doble capa es incorporada como condición de frontera sobre la microvarilla. Por otro lado la velocidad angular de rotación debida al flujo electroosmótico inducido (ICEO) por sus siglas en ingles (Induced Charge Electroosmosis) se encontró por medio de una expresión derivada de la aplicación del teorema de reciprocidad para fluidos, la cual requiere resolver la ecuación de Navier-Stokes, usando la condición de no deslizamiento.

La velocidad angular de rotación se calculó para diferentes valores de la razón  $\beta$  entre el radio y la semi longitud de las microvarillas, en particular para  $\beta = 0.04$ , 0.5 y 1.0, estos resultados son concordantes con aquellos reportados en el artículo de (Flores, et. al. (2019)).

Se presenta el cálculo de las polarizabilidades A y B, su parte imaginaria esta relacionada con la electrorotación eléctrica y la parte real con la electro-orientación eléctrica.

Finalmente se realizó un estudio de convergencia de nuestros resultados numéricos, con el fin de conocer aquellos parámetros más sensibles al método numérico usado en la simulación primero variando la tolerancia del resolovedor y estableciendo el número de grados de libertad (numero de nodos). Posteriormente se fijó la tolerancia del resolovedor y se fue variando numero de grados de libertad. Dos cantidades físicas de nuestro modelo resultaron ser muy sensibles: la polarizabilidad A y el coeficiente de viscosidad de rotación  $\gamma$ .

# Introducción

El estudio de coloides y dispersiones ha ganado mucho interés puesto que los fenómenos que subyacen a estos, permiten avances en más de un problema de salud, como el cáncer, investigaciones recientes sobre este, han centrado más su atención en los aspectos biofísicos del desarrollo de tumores, que involucran las modificaciones y mutaciones de las células del cáncer, además es aceptado que las propiedades físicas de las células como la impedancia eléctrica, el índice de refracción y la rigidez pueden ayudar a identificar un fenotipo de cáncer maligno [2]. Entonces si bien es sabido que la industria química coloidal juega un papel muy importante en cerca de 7000 industrias, la relevancia de los coloides no se limita a esta área, puesto que los coloides y los sistemas de estos son esenciales para la vida. Incrementar el entendimiento de los coloides y sus fenómenos, mejoraría la salud humana, puesto que los coloides están presentes en la sangre y en todos los fluidos de cuerpo [3].

De esta forma la caracterización de partículas coloidales juega un rol de vital importancia, y la característica más importante de los sistemas coloidales es la carga en la superficie de las partículas, misma que puede ser encontrada de manera indirecta mediante varios métodos.

Sin embargo debido a los efectos de tamaño, las técnicas de manipulación tradicionales para objetos macroscópicos, no son eficientes a escala micro/nano de forma que se han desarrollado otras técnicas para la separación, transporte y caracterización de micropartículas [4]. Algunas de ellas hacen uso de campos eléctricos, surgiendo así interés en los fenómenos electrocinéticos causados por el uso de dichos campos en partículas de escala micro o nano [5]. Además en comparación con la espectroscopia dieléctrica, estos métodos ofrecen una medida de independencia de los artefactos de

electrodos y la teoría de mezclas [6].

Los antecedentes relacionados al uso campos rotatorios de alta frecuencia para determinar propiedades dieléctricas de objetos macroscópicos se dio con Lertes en 1921 [7]. Su empleo para medir dichas propiedades en objetos microscópicos como células y coloides se realizó en 1982 [8].

Existen dos fenómenos relacionados al comportamiento dieléctrico de suspensiones, que han recibido un creciente interés, la dielectroforesis que es la traslación de una partícula inducida por un campo eléctrico no uniforme y la electro rotación que es la rotación de partículas debido a la imposición de un campo eléctrico rotatorio [9].

Un importante número de trabajos se han enfocado en el estudio de los mecanismos físicos detrás de la electrocinética en la manipulación de partículas metálicas, [10]. Estos trabajos demostraron que el movimiento electro cinético de partículas metálicas proviene de la interacción entre los campos eléctricos y la carga inducida en la doble capa eléctrica, en la interfaz de la partícula-electrolito. Como consecuencia de esta interacción, aparecen varios fenómenos físicos; movimiento browniano, debido a la gravedad, al flujo de fluido electro-osmótico (ICEO) por sus siglas en ingles (Induced charge electro-ósmosis) y al dipolo inducido en la partícula estos mecanismos tienen como efecto hacer rotar la partícula resultando la electrorotación [11]. Este fenómeno resulta en una combinación de la rotación en sentido del campo eléctrico aplicado debida al flujo electro osmótico y en contra debido al dipolo eléctrico [1].

En el presente documento se muestran los resultados obtenidos sobre el estudio de un fenómeno que aparece como consecuencia de la aplicación de un campo eléctrico-rotatorio en una nano varilla metálica, que se encuentra inmersa en una solución electrolítica, denominado electrorotación. Se hace un estudio teórico y de simulación por computadora sobre este, cuyo principal objetivo es conocer la velocidad de rotación debida al dipolo eléctrico y la debida al flujo electroosmótico de la partícula, debido a la utilidad del espectro de velocidades de rotación para caracterizar partículas, que resultan de interés, por ejemplo células, marcadores biológicos o coloides.

El objetivo general del presente trabajo de tesis fue describir la rotación de nano-

varillas metálicas sometidas a campos eléctricos alternos, y su interacción con el flujo electroosmótico, para cuyo cálculo usamos el teorema de reciprocidad, los objetivos y metas específicas fueron:

1. Calcular la velocidad angular con la que rota la nano varilla como función de la frecuencia del campo eléctrico rotatorio.
2. Describir cómo cambian las velocidades anteriores en función del aspecto geométrico y publicar los resultados en un congreso.

El documento de tesis está organizado de la siguiente manera para una mejor comprensión del lector. En el capítulo 1, hacemos una revisión de los elementos necesarios que se utilizaron para el desarrollo del presente manuscrito de tesis, se verá que las causas responsables del movimiento de un partícula metálica son las fuerzas eléctricas aplicadas sobre las cargas que se inducen en la interfase metal- electrolito. Esta tesis se centra en calcular parámetros importantes que aparecen durante la rotación de la partícula, además con el fin de comparar con otras referencias el cálculo se realiza para diferentes dimensiones de varillas. Debido a que la velocidad de rotación procede de la contribución eléctrica  $\Omega_e^{ROT}$  y al flujo de fluido electroosmótico  $\Omega_{ICEO}^{ROT}$ , se hace una revisión de fenómenos electrocinéticos y de otros conceptos importantes como la doble capa eléctrica. Los detalles teóricos de la electrorotación son presentados en el modelo matemático del problema mismo que se aborda en el capítulo 2, es allí donde se introducen las diferentes aproximaciones mediante las cuales se puede llegar a brindar un sentido matemático al valor de la velocidad de rotación. Debido a que el análisis hace uso de métodos numéricos para poder aproximar una velocidad de rotación. Posteriormente en el capítulo 3 se realiza el estudio numérico, empleó COMSOL, un software comercial de simulación que hace uso del método de elemento finito, con el que se realizan las simulaciones correspondientes a diferentes dimensiones de varillas, esto con el fin de comparar los resultados obtenidos con trabajos previos, dichos resultados junto con un análisis de convergencia de las simulaciones y su discusión, el análisis de convergencia es realizado con el fin de poder brindar sustento de los resultados numéricos obtenidos ya que se carece de un soporte experimental del problema

en cuestión con las especificaciones planteadas en este caso. Finalmente, presentamos una sección de conclusiones de nuestro trabajo de tesis con lo cual se muestra que los parámetros de nuestro estudio son los adecuados.

# Índice general

<b>Agradecimientos</b>	<b>III</b>
<b>Resumen</b>	<b>IV</b>
<b>Introducción</b>	<b>VI</b>
<b>Índice de figuras</b>	<b>XII</b>
<b>1. Marco teórico</b>	<b>1</b>
1.1. Fluidos cargados . . . . .	2
1.1.1. Solución electrolítica . . . . .	2
1.1.2. Solución Coloidal . . . . .	4
1.2. Doble capa eléctrica . . . . .	7
1.2.1. Análisis de Gouy-Chapman . . . . .	8
1.3. Fenómenos electrocinéticos . . . . .	12
1.3.1. Electróomosis . . . . .	13
1.3.2. Electroforesis y dielectroforesis . . . . .	14
1.3.3. Electrorrotación . . . . .	17
1.4. Ecuaciones hidrodinámicas . . . . .	18
1.4.1. Ecuación de conservación de masa . . . . .	18
1.4.2. Ecuación de Navier-Stokes . . . . .	19
1.4.3. Condición de no deslizamiento . . . . .	20
1.5. Fasores . . . . .	21
1.6. Método del elemento finito . . . . .	21

<i>ÍNDICE GENERAL</i>	XI
1.6.1. Ejemplo para problema en 1-D . . . . .	22
<b>2. Electrorrotación de una nanovarilla metálica</b>	<b>25</b>
2.1. Montaje experimental de la electrorrotación . . . . .	25
2.2. Planteamiento del problema . . . . .	26
2.2.1. Formulación Matemática de $\Omega_e^{ROT}$ . . . . .	27
2.2.2. Formulación Matemática de $\Omega_{ICEO}^{ROT}$ . . . . .	32
2.3. Teorema de reciprocidad para fluidos. . . . .	33
<b>3. Resultados de la electrorrotación</b>	<b>35</b>
3.1. Implementación de la simulación en COMSOL . . . . .	35
3.2. Análisis de convergencia de los resultados numéricos . . . . .	41
3.3. Electrorrotación de nanovarillas metálicas . . . . .	44
3.3.1. Polarizabilidades A y B . . . . .	45
3.3.2. Velocidad angular debida la dipolo inducido . . . . .	48
3.3.3. Velocidad angular debida al flujo electroosmotico (ICEO). . .	49
3.3.4. Coeficiente de viscosidad . . . . .	52
<b>Conclusión</b>	<b>54</b>
<b>Apéndice A</b>	<b>56</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>59</b>

# Índice de figuras

1.1. Esquema de una solución de cloruro de potasio (KCl) en agua, los iones se hidratan. Las moléculas de agua polar son atraídas por las cargas en los cationes y aniones. No se muestran las moléculas de agua delante y detrás de los iones. . . . .	3
1.2. Típicos rangos de tamaño del dominio coloidal. . . . .	5
1.3. Esquema de una partícula coloidal sumergida en una solución electro-lítica. . . . .	6
1.4. La doble capa eléctrica (a) de acuerdo al modelo de Helmholtz, (b) la doble capa difusa resultante del movimiento térmico. . . . .	8
1.5. Esquema de una doble capa eléctrica formada por una superficie plana cargada . . . . .	10
1.6. Flujo electroosmótico en un tubo capilar. . . . .	14
1.7. Electroforesis de una partícula cargada en un campo eléctrico externo.	15
1.8. Dielectroforesis de un partícula esférica . . . . .	16
1.9. Componentes cartesianas de los esfuerzos en un elemento de fluido . .	20
2.1. Montaje experimental para generar el campo eléctrico rotatorio y ima-gen microscópica de las nanovarillas en la solución electrolítica. . . . .	26
2.2. Diagrama que muestra la nanovarilla y el campo eléctrico aplicado. .	27
3.1. Diagrama del algoritmo en Comsol . . . . .	36
3.2. En esta imagen se muestra la geometría del sistema es decir el cilindro grande y la esfera que encierra la micro varilla . . . . .	37

3.3. Mallado en el cilindro y la esfera . . . . .	38
3.4. Mallado en el cilindro y la esfera . . . . .	38
3.5. Mallado en el la micropartícula . . . . .	39
3.6. Esta imagen muestra los parámetros necesarios para la simulación . .	40
3.7. Gráfica de convergencia del error relativo de(a) del parámetro $\gamma$ y (b) el parámetro A con tolerancia relativa fija de $10^{-3}$ . . . . .	43
3.8. Gráfica de convergencia del error relativo (a) del parámetro $\gamma$ y (b) del parámetro A con grados de libertad fijos . . . . .	44
3.9. Polarizabilidad azimutal al eje del cilindro con $\tilde{\omega} = \omega C_{DL}/\sigma$ . . . . .	46
3.10. Polarizabilidad perpendicular al eje del cilindro . . . . .	47
3.11. Comparación de la velocidades angulares de rotación debidas al dipolo inducido en la micro varilla metálica para diferentes $\beta$ . . . . .	48
3.12. Gráficas para las distintas $\beta$ de la velocidad de rotación ideo usando en teorema de reciprocidad para fluidos . . . . .	51
3.13. Gráficas para las distintas $\beta$ de la velocidad de rotación ideo mediante la expresión de Tirado . . . . .	52

# Capítulo 1

## Marco teórico

Este capítulo hace una revisión de los conceptos y la teoría básicas para el desarrollo del problema planteado; dicho problema consiste en el estudio de la electrorotación de nano varillas inmersas en una solución electrolítica, que son influenciadas por campos eléctricos de corriente alterna. De este modo en la primera sección se describe de manera cualitativa que son los fluidos cargados, en particular, las soluciones electrolíticas y las soluciones coloidales, esto porque el sistema de estudio trata una solución coloidal. En la siguiente sección se describen algunos fenómenos electrocinéticos, dos de ellos son de utilidad práctica para separar partículas, electroforesis y dielectroforesis. También es descrito el fenómeno de la electrorotación de micro partículas, estos estudios son de utilidad práctica para obtener características eléctricas de las micro partículas. En seguida se revisa la teoría de Gouy-Chapman que explica la distribución de iones cerca de una pared cargada y plana, en esta teoría aparece el fenómeno de apantallamiento que brinda una explicación sobre la distribución de los iones cerca de la pared cargada. Posteriormente se trata el concepto matemático de los fasores, debido al uso de campos eléctricos alternos.

En la siguiente sección se hace una revisión breve de las ecuaciones de conservación de la hidrodinámica debido a los flujos que aparecen en el sistema. Finalmente, es descrito el método de elemento finito mismo que se usa en la solución numérica por medio de la simulación se realizó con el programa comercial COMSOL que utiliza dicho método para resolver las ecuaciones diferenciales.

## 1.1. Fluidos cargados

Los fenómenos electrocinéticos tratados, en particular el de electrorrotación, consideran a los fluidos cargados estos consisten de partículas cargadas disueltas en un solvente. En el presente se hablará de dos tipos de fluidos cargados, soluciones electrolíticas y soluciones coloidales.

En la subsección 1.1.1 es descrita de manera cualitativa que es una solución electrolítica, esto porque en el problema de la doble capa se encuentra presente este tipo de sistemas. En la siguiente sección 1.1.2 se describe una solución coloidal, que de manera particular se caracteriza por contener partículas mucho más grandes en comparación a los iones, siendo esta una característica de interés ya que se trabaja con una nano varilla.

### 1.1.1. Solución electrolítica

Además de los metales existen otras sustancias que también pueden transportar electricidad sin electrones libres, en lugar de estos lo hacen con iones por lo que reciben el nombre de conductores iónicos. Los primeros fueron electrolitos acuosos, aunque tiempo después se encontraron electrolitos sólidos [12].

Una solución es una mezcla homogénea de especies químicas dispersas a escala molecular. El constituyente en mayor proporción se conoce como disolvente, mientras que aquello en menor cantidad se conocen como solutos [13].

El primer intento por explicar las propiedades y regularidades de los circuitos electroquímicos se vincula a la composición del primer circuito electroquímico, que hizo en 1791 L. Galvani mientras estudiaba las propiedades fisiológicas de una rana disecada, dicho circuito estaba constituido por el músculo de la rana y dos metales distintos [13].

La idea de que en las soluciones de electrolitos existen e interactúan partículas cargadas libres es decir iones no se concretó de forma inmediata, fue hasta inicios del siglo XIX que aparecieron modelos teóricos que explican el fenómeno de la conductividad en los conductores de segunda especie, el primero fue propuesto por T. Grotthuss

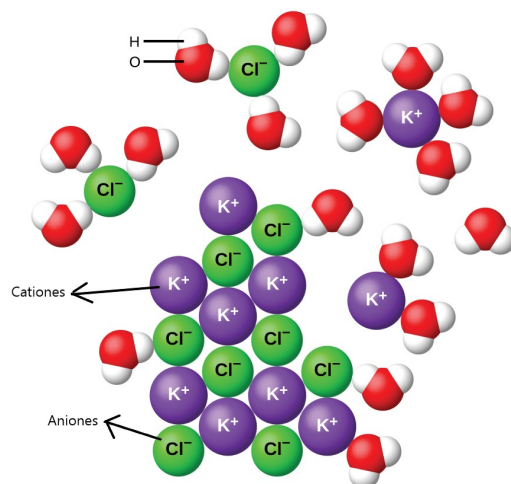


Figura 1.1: Esquema de una solución de cloruro de potasio (KCl) en agua, los iones se hidratan. Las moléculas de agua polar son atraídas por las cargas en los cationes y aniones. No se muestran las moléculas de agua delante y detrás de los iones.

en 1805 para el proceso de descomposición del agua en hidrógeno y oxígeno, presentando las moléculas de agua en forma dipolar. Luego en los años treinta, M. Faraday señaló la posibilidad de disociar los electrolitos en iones, según él, el fenómeno se efectúa solo bajo influencia de un campo eléctrico y es de aquí de donde proviene el término «electrolito» que viene del griego descomponible por electricidad y los iones que surgen como resultado, transmiten la corriente mediante de la solución al dirigirse hacia los electrodos como consecuencia de la interacción electrostática [13].

En la teoría moderna para el caso de las soluciones electrolíticas las propiedades son atribuidas a la naturaleza del soluto, sin embargo no hay que olvidar que es el solvente lo que permite al electrolito mostrar sus peculiaridades, la atención se centra pues en las partículas cargadas que se ven obligadas a moverse [13].

Una solución de electrolito es una solución que generalmente contiene iones, átomos o moléculas que han perdido o ganado electrones, y es eléctricamente conductora. Por esta razón, a menudo se les llama soluciones iónicas, sin embargo, hay algunos casos en que los electrolitos no son iones. Para esta discusión sólo consideraremos soluciones de iones [13].

En general el agua es, por mucho, el más importante de los disolventes ionizantes, además el inmenso cuerpo de conocimiento objetivo sobre electrolitos se refiere a

soluciones acuosas.

### 1.1.2. Solución Coloidal

La ciencia coloidal tuvo su nacimiento en los años 40 con los estudios de agregación de pseudo-soluciones en agua o en yoduro de sodio realizadas por el toxicólogo Francesco Selmi, posteriormente llegó el desarrollo de dispersión de oro por Faraday. El término coloide fue desarrollado por Graham en 1861, quien lo definió en términos de su inhabilidad para pasar a través de una membrana fina [15].

Los aspectos experimentales, teóricos, sus aplicaciones tecnológicas y la apreciación de sus implicaciones biológicas, de la ciencia coloidal han hecho progreso en las últimas décadas, esto debido a que está inmersa en más de un campo del conocimiento, por ejemplo la medicina, pues muchas estructuras biológicas son coloides como la sangre que es una dispersión de glóbulos en suero y el hueso que es esencialmente una dispersión de calcio fosfato en colágeno [16]. Existen un sin número de definiciones y clasificaciones, en general los coloides son vistos como un sistema dispersado, el sistema de este tipo más simple consiste en dos sustancias, la que se encuentra en menor proporción se llama fase dispersada y la de mayor proporción dispersante, y son clasificados de acuerdo al diámetro de las partículas dispersadas, para el caso de los coloides las partículas están en el rango de 1-100 nm, y cada partícula tiene un número de átomos del orden de  $10^3 - 10^9$  son visibles en ultramicroscopios [17].

De forma tradicional el dominio coloidal como se observa en la fig.1.2, es definido en el rango de entre nanómetros hasta micrómetros, en esta región hay un conjunto de leyes físicas que pueden ser aplicadas para describir de forma efectiva el comportamiento de los materiales en cuestión.

Los sistemas coloidales poseen una serie de propiedades que los distinguen de las soluciones:

- La fase dispersada no es soluble en el dispersante.
- No se dializan o difunden.
- La sedimentación se da muy lentamente.

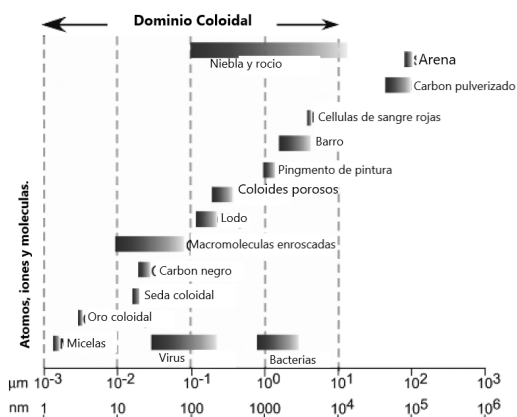


Figura 1.2: Típicos rangos de tamaño del dominio coloidal.

Los materiales coloidales son clasificados de acuerdo a dos criterios principales: la afinidad de la fase dispersa para el dispersante y el estado en que se encuentra el material en las fases que lo componen, algunos ejemplos se muestran en la tabla 1.1, los coloides más simples se componen de solo dos fases y, como en las soluciones, todas las combinaciones de las fases pueden ocurrir.

Fase dispersada	Fase Dispersante	Denominación	Ejemplo
Líquido	Gas	aerosol líquido	Sprays
Gas	Líquido	Foam	Crema batida
Líquido	Líquido	Emulsión líquida	Leche, vinagreta
Sólido	Líquido	Sol	gelatina, lodo
Sólido	Gas	aerosol líquido	Humo

Tabla 1.1: Diferentes combinaciones en soluciones coloidales dependiendo del estado de las fases

Los fenómenos coloidales se refieren a pequeñas partículas o sistemas donde la relación de superficie a volumen es muy grande véase el diagrama en la fig 1.3 . Naturalmente, como la partícula se vuelve más pequeña, aumenta el área de superficie por unidad de volumen de la partícula. Por lo tanto, en sistemas coloidales, además de las fuerzas corporales estándar (fuerzas que actúan sobre el volumen completo de un cuerpo) encontrado en objetos macroscópicos, las fuerzas superficiales se vuelven importante. Las fuerzas superficiales generalmente se engendran por las interacciones que ocurren en las interfaces entre la fase dispersa y el medio dispersante. Las fuerzas

a menudo son dominantes en los sistemas coloidales, lo que lleva a comportamientos únicos de dispersiones coloidales, que colectivamente se denominan fenómenos coloidales. Las fuerzas que entran en interacciones son:

- Eléctrica
- Fuerza de London-Vander Waals
- Fuerza Browniana
- Viscosa
- Inercial
- Gravitacional
- Esterica
- Tensión de superficial

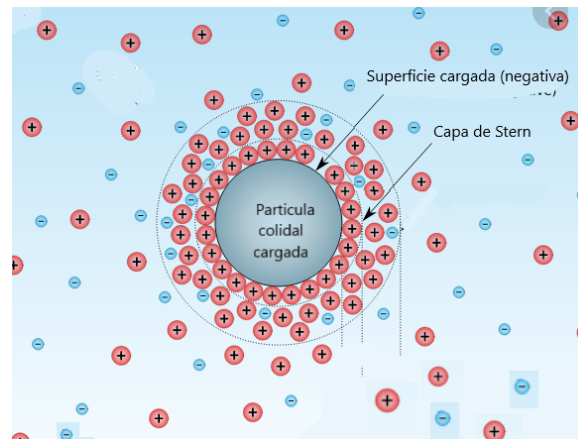


Figura 1.3: Esquema de una partícula coloidal sumergida en una solución electrolítica.

El impacto de estas fuerzas está relacionado con diversos factores entre los cuales se encuentran el tamaño y forma de la partícula, las propiedades de superficie, la fase química y sus propiedades físicas, las interacciones entre partículas y las interacciones entre la fase continua y las partículas, de modo que todos los factores y el impacto de las fuerzas conforman el modelo de un sistema de coloides.

## 1.2. Doble capa eléctrica

Cuando se tratan problemas relacionados a dispersiones se requieren desarrollar métodos para tratar con la redistribución de iones en la solución causado por la presencia de superficies cargadas tales como la partícula cargada. De modo que los iones libres son atraídos o repelidos según el signo de la carga superficie cargada. Tal redistribución de iones junto con los iones en la superficie dados se conocen como dobles capas eléctricas.

Respecto al origen de carga eléctrica interfacial se sabe que existe por la evidencia directa del estudio de la electroforesis donde se acepta la existencia de carga en partículas pero no se le suele prestar atención a su origen. Existen diversos mecanismos para llegar a cargar alguna superficie. Algunos de los más importantes son la ionización de grupos de superficie, la disolución diferencial de iones de superficies de cristales escasamente solubles, sustitución isomorfa, superficies de cristales cargados o absorción específica de iones. (Hunter, 1981; Everett, 1988; Lyklema, 1995).

Es importante conocer las ecuaciones que gobiernan el campo y potencial eléctrico para poder desarrollar las fuerzas de interacción entre ellas.

Cuando los electrolitos están presentes en el agua en condiciones de no flujo, por un volumen representativo y las ubicaciones alejadas de las paredes del contenedor, la condición de electro-neutralidad se obedece en promedio. Como consecuencia de la redistribución de carga, de forma intuitiva se puede afirmar que habrá mayor concentración de contra-iones cerca de la superficie y que a la electro-neutralidad se restablecerá a una distancia suficiente de la superficie. Sin embargo la forma en que los iones se distribuyen necesita una descripción matemática [15].

En términos simples podemos decir que la doble capa surge de la separación de carga en la superficie y la otra, una capa de iones en la vecindad de la superficie. Este concepto fue presentado por Helmholtz quien previo esto en una especie de condensador molecular. Sin embargo debido a que el movimiento térmico causa que los contra-iones se esparzan en el espacio se crea también una doble capa difusa como se muestra en la figura 1.4, dentro de esta capa no hay neutralidad de carga su teoría

se desarrollo de forma independiente por Gouy y Chapman en 1900.

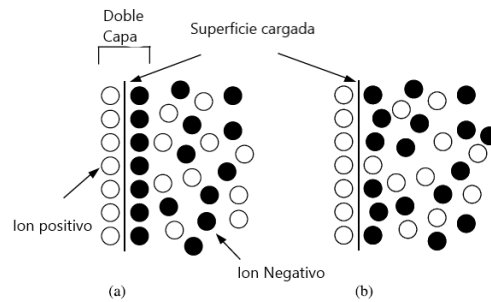


Figura 1.4: La doble capa eléctrica (a) de acuerdo al modelo de Helmholtz, (b) la doble capa difusa resultante del movimiento térmico.

La distribución de concentración de equilibrio de iones en la capa difusa se da debido a las fuerzas atribuidas a la atracción/repulsión electrostática entre las superficies cargadas superficie y los iones, y difusión de iones debido a gradientes de concentración.

Existen diferentes modelos uno de ellos es del de Gouy-Chapman que proporciona predicciones cuantitativas aceptables cuando el potencial de superficie está por debajo de 0.025 V y la concentración de electrolitos no es demasiado alta, pero este modelo descuida el tamaño finito de los iones pues lo supone como cargas puntuales.

El potencial eléctrico en un dieléctrico con carga libre esta regido por la ecuación de Poisson. En una solución electrolítica, la fase continua es el agua, que es un medio dieléctrico y las cargas libres son los iones en la solución electrolítica. En consecuencia, la ecuación de Poisson es también la ecuación apropiada para ser utilizada para analizar las capas dobles eléctricas difusas donde la permitividad dieléctrica del agua se supone constante.

### 1.2.1. Análisis de Gouy-Chapman

El objetivo de este análisis fue obtener una expresión analítica para la distribución del potencial y de la concentración de iones debida a la presencia de la superficie cargada en el medio dieléctrico. La ecuación de Poisson esta dada por

$$\epsilon \nabla^2 \psi = -\rho_f, \quad (1.1)$$

donde  $\psi$  es el potencial,  $\epsilon$  es la permitividad en la solución, y  $\rho_f$  la densidad de los iones libres.

Es claro que si el problema tratado es en una dimensión se puede simplificar a

$$\epsilon \frac{d^2 \psi}{dx^2} = -\rho_f, \quad (1.2)$$

donde  $x$  es la distancia normal a la superficie cargada  $\rho_f$  puede ser escrita en términos del numero de concentración de los iones correspondientes a las valencias como

$$\rho_f = \sum_i^N z_i e n_i, \quad (1.3)$$

donde  $n_i$  es el numero de concentración iónico de la  $i$ -ésima especie y  $z_i$  la valencia,  $e$  es la magnitud de la carga del electrón,  $N$  es el numero iónico de especies en la solución electrolítica. Cuando combinamos las ecuaciones (1.2) y (1.3) obtenemos

$$\epsilon \frac{d^2 \psi}{dx^2} = - \sum_{i=1}^N z_i e n_i. \quad (1.4)$$

Entonces se puede escribir el lado derecho de la ecuación anterior en términos de  $\psi$  relacionando la distribución espacial de los iones a  $\psi$  utilizando la distribución de Boltzman

$$n_i = n_0 \exp\left(-\frac{z_i e \psi}{k_B T}\right) \quad (1.5)$$

donde  $n_0$  representa la densidad de iones en el bulto lejos de la pared.

$$\epsilon \frac{d^2 \psi}{dx^2} = - \sum z_i e n_0 \exp\left(-\frac{z_i e \psi}{k_B T}\right), \quad (1.6)$$

la ecuación numero (1.6) es llamada la ecuación de Poisson-Boltzman, define el potencial eléctrico en la capa difusa y esta sujeta a condiciones de frontera apropiadas. En orden de facilitar los cálculos se hacen diferentes suposiciones;  $N=2$  es decir dos

especies y usar que la solución electrolítica es simétrica por lo que las valencias de los cationes y aniones son iguales.

Cuando se trabaja con superficies planas es decir dobles capas eléctricas planas es posible obtener una solución analítica para  $\psi$  para electrolitos simétricos y tal solución es conocida como la teoría de Gouy-Chapman, misma que no requiere de linealización de la aproximación del Boltzman.

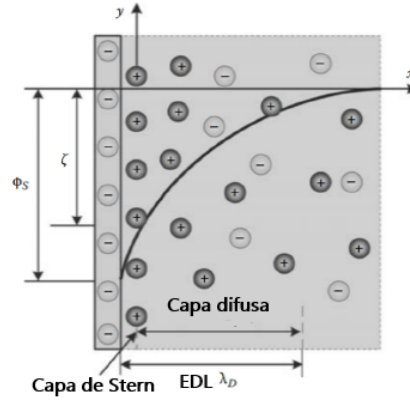


Figura 1.5: Esquema de una doble capa eléctrica formada por una superficie plana cargada

En la figura 1.5, se muestra la doble capa eléctrica que se origina de poner en contacto una solución electrolítica con una pared cargada.

En electrolitos simétricos las valencias son las mismas, de modo que se puede escribir

$$z_+ = z_- = z, \quad (1.7)$$

si se toma esto en cuenta la ecuación (1.6) se puede escribir como

$$\epsilon \frac{d^2\psi}{dx^2} = 2ze n_0 \sinh\left(\frac{ze\psi}{k_B T}\right). \quad (1.8)$$

Las condiciones de frontera apropiadas son

$$x = 0, \quad \psi = \psi_s, \quad (1.9)$$

$$x \rightarrow \infty \quad \psi = 0. \quad (1.10)$$

La solución de la ecuación (1.6) bajo las anteriores condiciones de frontera es

$$\Psi = 2 \ln \left[ \frac{1 + \exp(-\kappa x) \tanh(\Psi_s/4)}{1 - \exp(-\kappa x) \tanh(\Psi_s/4)} \right], \quad (1.11)$$

donde  $\Psi$  es el potencial sin dimensión definido por

$$\Psi = \frac{ze\psi}{k_B T}. \quad (1.12)$$

y

$$\Psi_s = \frac{ze\psi_s}{k_B T}, \quad (1.13)$$

mientras que,  $\kappa^{-1}$  es la longitud de Debye que es una medida del grosor de la doble capa eléctrica y esta definida por

$$\kappa^{-1} = \left( \frac{\epsilon k_B T}{2e^2 z^2 n_0} \right)^{1/2}. \quad (1.14)$$

La longitud de Debye, es una medida del espesor eléctrico de doble capa, y es una propiedad de la solución electrolítica. Cabe señalar que este parámetro contiene información sobre la permitividad dieléctrica del solvente, así como la valencia  $z$  y concentración en masa  $n_0$ , de los iones. Sin embargo, no hay información sobre las propiedades de la superficie cargada están presentes en la longitud de Debye. Aunque normalmente es referido como el grosor de la doble capa eléctrica, en realidad el grosor real de una doble capa se extiende mucho más allá de  $\kappa^{-1}$ . Típicamente, la longitud de Debye representa una distancia característica de la superficie cargada a un punto donde el potencial eléctrico decae aproximadamente el 70% [25] del potencial de superficie.

Cuando la superficie del potencial es pequeño por ejemplo  $\psi_s \ll 0.025V$  el término  $ze\psi/k_B T$  es más pequeño que uno y se puede hacer una aproximación a la

función seno hiperbólico

$$\sinh\left(\frac{ze\psi}{k_B T}\right) \approx \frac{ze\psi}{k_B T}, \quad (1.15)$$

y ahora haciendo uso de la aproximación de arriba y de la definición de  $\kappa$  la ecuación de Poisson-Boltzman queda

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2e^2 z^2 n_0}{\epsilon k_B T} \psi = \kappa^2 \psi, \quad (1.16)$$

la ecuación (1.16) es la versión linealizada de la ecuación de Poisson-Boltzman. Su solución con las condiciones de frontera  $\psi = \psi_s$  en  $x = 0$  y  $\psi = 0$  para  $x \rightarrow \infty$ , es

$$\Psi = \Psi_s \exp(-\kappa x). \quad (1.17)$$

### 1.3. Fenómenos electrocinéticos

Las técnicas utilizadas tradicionalmente para la manipulación de fluidos a micro y nano escala resultan ineficientes debido a los efectos de tamaño en los resultados y durante el análisis de los mismos debido a esto se han creado nuevas técnicas que permiten el tratamiento y estudio de partículas en micro y nano fluidos.

La microfluídica es una actividad reciente cuya esencia es el empleo y control de pequeños volúmenes ya sea gases o líquidos y posee un aprovechamiento en diferentes áreas del conocimiento [19].

En este sentido la microfluídica emerge como interfaz entre la nano-escala y la macro-escala es decir la meso-escala cuyo término refiere a aquella en la cual se puede hablar de propiedades de materiales o fenómenos sin la imperativa necesidad de analizar el comportamiento de átomos individuales pero con características singulares cuando se compara con los fenómenos conocidos tradicionalmente. Los fenómenos en dicha escala controlan las propiedades y comportamiento de diferentes materiales, como puede ser materia suave condensada, fluidos de surfactantes, coloides, polímeros y sistemas biológicos como proteínas, ADN y otros. Es en este sentido se requiere la creación de dispositivos y desarrollo de técnicas que permitan el análisis y le brin-

den un aprovechamiento tecnológico a esta rama que algunas de esas técnicas están basadas en fenómenos electrostáticos [19].

Los fenómenos electrocinéticos hacen referencia al uso de campos eléctricos sobre fluidos polarizados o cargados donde la aparición de fuerzas produce movimiento de estas partículas.

La palabra electrocinética implica la combinación de efectos de movimiento y fenómenos eléctricos, específicamente los procesos en los cuales la velocidad relativa entre dos partes de la doble capa eléctrica, fenómeno que produce la migración de una partícula relativa a una fase continua que lo rodea, o de forma alternativa podría ser la fase de solución la que se mueve relativa a las paredes [20].

Las ecuaciones electrocinéticas básicas para electrolitos, así como varios tipos de fenómenos electrocinéticos están basadas en la ecuación de Poisson pero su desarrollo depende de las diferentes condiciones de frontera del problema de interés. Fundamentado en el tipo de campo eléctrico aplicado los fenómenos electrocinéticos pueden categorizarse en corriente directa o alterna, en el siguiente apartado se dará una breve introducción a los fenómenos debidos a corriente directa que son la electro-ósmosis, electroforesis y dielectroforesis.

### 1.3.1. Electrósmosis

Este fenómeno se refiere al movimiento del líquido (una solución electrolítica) más allá de una superficie cargada bajo la influencia de un campo eléctrico. La presión necesaria para balancear el flujo electroosmótico se conoce como presión electroosmótica [20].

Un típico fluido electroosmótico se observa en la figura 1.6, cuando el tubo capilar está negativamente cargado, el campo eléctrico aplicado ejerce una fuerza en la dirección del cátodo con el exceso de iones de carga positiva cerca de la superficie.

La electroosmosis puede ser empleada para drenar medios porosos y en la evaluación de carga superficial de tubos capilares o medios porosos, en general se usa para bombear soluciones en sistemas microfluidicos [21].

Este fenómeno surge de la influencia de un campo eléctrico en los contra iones de la doble capa adyacente al muro. Resulta que debido a que el radio de el capilar es

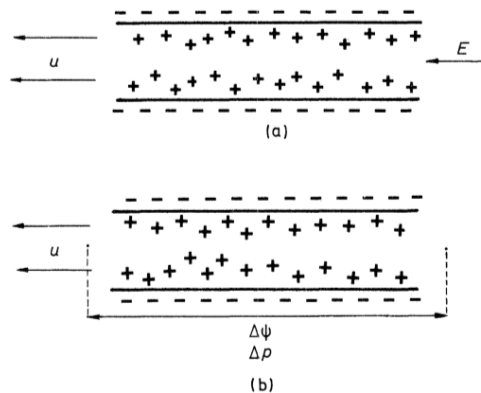


Figura 1.6: Flujo electroosmótico en un tubo capilar.

grande comparado con  $1/\kappa$ , la velocidad relativa de el liquido cargado respecto del contenedor, se denomina velocidad electro osmótica esta dada por la ecuación:

$$u = \frac{2}{3}(\epsilon\zeta\mathbf{E}/\eta)f(\kappa a), \quad (1.18)$$

donde  $\kappa$  es el inverso de la longitud de Debye  $\eta$  es la viscosidad del electrólito, y  $\zeta$  es el potencial en el límite de la frontera de la capa, usualmente llamado plano rasante.

### 1.3.2. Electroforesis y dielectroforesis

#### Electroforesis

La electroforesis es uno de los procesos mayormente utilizados en soluciones biológicas, por ejemplo los bio-coloides pueden ser manipulados en pequeños ambientes aplicando un campo eléctrico [10]. Este principio es usado para separar proteínas de diferentes tamaños o cargas, ADN y células.

El movimiento de una superficie cargada, tal como lo es una partícula coloidal (nano varilla), dicho movimiento originado por un campo eléctrico y relativo a un líquido estacionario se conoce como electroforesis, en este fenómeno las partículas coloidales son la fase móvil y la solución de electrolitos es estacionaria, el uso de la electroforesis es común cuando se requiere conocer la información sobre la carga de la partícula [13].

Las partículas dispersas tienen una carga eléctrica superficial además se suspenden

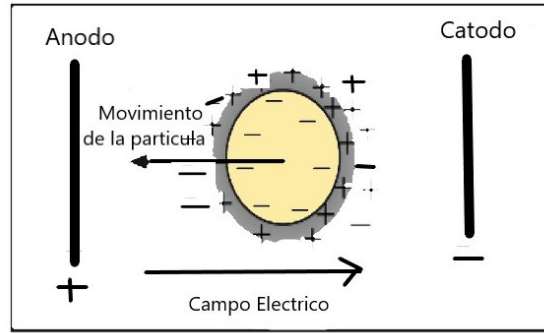


Figura 1.7: Electroforesis de una partícula cargada en un campo eléctrico externo.

libremente en una solución de electrolitos. El campo eléctrico externo ejerce una fuerza electrostática sobre las partículas y sobre los contra-iones en la doble capa difusa. El sistema general de la partícula y los iones en la doble capa son neutros, por lo que no existe una fuerza neta del cuerpo electrostático de modo que la partícula se mueve no por una fuerza eléctrica, sino por el movimiento de deslizamiento de la doble capa que se considera movimiento "libre de fuerza". Lo que resulta es que la partícula se mueve a una velocidad proporcional al campo eléctrico. La partícula "nada" por el flujo electro-osmótico a su alrededor [11].

Una relación importante es la del campo eléctrico con la velocidad de la partícula, para ello deben considerarse todas las fuerzas que están actuando. El movimiento debido al campo eléctrico será opuesto al arrastre viscoso en la partícula. La importancia de esas fuerzas depende de la cantidad adimensional  $\kappa a$  que representa la razón entre el radio de curvatura de la partícula y el grosor de la doble capa eléctrica [21].

$$v_p = \frac{E\epsilon\epsilon_0}{\xi\eta}, \quad (1.19)$$

donde  $\eta$  es la viscosidad del electrolito, y  $v_p$  la velocidad de la partícula llamada velocidad electroforética de la micropartícula en relación a las paredes del contenedor y  $\zeta$  el potencial, y es válida cuando  $\kappa a \ll 1$  y es conocida como la ecuación de Huckel.

## Dielectroforesis

Este fenómeno se refiere al movimiento de partículas cuya carga es neutra en una solución electrolítica y sujetas a un campo no uniforme, causante de la fuerza dieléctrica. Si se asume un fluido dieléctrico lineal con susceptibilidad, y la polarización del campo del fluido es;

$$\mathbf{P} = \epsilon_0 \mathbf{E}. \quad (1.20)$$

Una relación importante en en la descripción matemática de este fenómeno es la fuerza dieléctrica que esta actuando en el momento dipolar del campo eléctrico **no homogéneo**.

La relación entre la polarizabilidad de las partículas y para el positivo refiere un fuerza que apunta hacia la región con un campo eléctrico mas alto, además esta fuerza es proporcional al cuadrado del campo eléctrico y al cubo del tamaño de la partícula, lo que demuestra un fenómenos electro cinético no lineal.

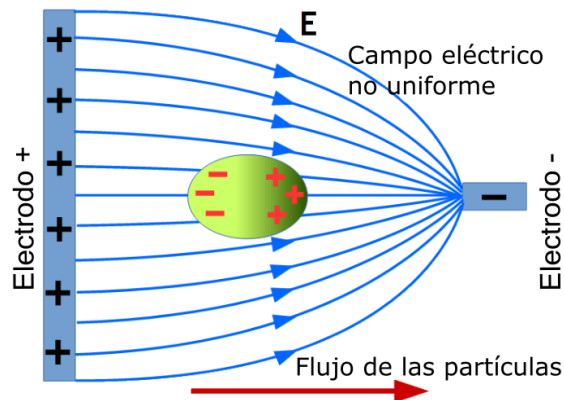


Figura 1.8: Dielectroforesis de un partícula esférica

Las ecuaciones que resulten de la aplicación de este fenómeno bajo un corriente al terna dependen de la forma de la partícula que se este manipulando. Este tipo de fenómenos se utilizan para manipular partículas biológicas y coloidales, además de depositar nano-varillas sintetizadas en electrodos.

### 1.3.3. Electrorrotación

La electrorrotación es la rotación de la partícula debida a un campo eléctrico rotante, entonces la rotación surge de la combinación de rotación en favor de las manecillas del reloj originada por la acción del dipolo inducido y la rotación en contra que surge de el flujo ICEO (Flujo electroosmótico) al rededor del la partícula [23]. La técnica de electrorrotación permite obtener información sobre las propiedades dieléctricas de una partícula, mediante los espectros que se obtienen al medir la velocidad de rotación que esta adquiere a ser sometida a un campo eléctrico rotativo [1].

El hecho de que la información obtenida sea sobre una única partícula de la suspensión y no de todo el conjunto, es una ventaja frente a otras técnicas convencionales.

Las descripciones existentes de las fuerzas eléctricas y los pares de fuerzas ejercidos sobre las partículas coloidales en la dielectroforesis o electrorrotación se basan en soluciones de la ecuación de Laplace. En cada problema de este tipo, los resultados matemáticos se verán influenciados por la forma del coloide pues la partícula se representa como un cuerpo eléctricamente homogéneo sumergido en un medio homogéneo. De modo que, en soluciones iónicas, el modelo está restringido al caso en el que la doble capa difusa es delgada en comparación con el tamaño de partícula. Además, y quizás más importante, el modelo no puede proporcionar una descripción adecuada de la dinámica de las partículas en el límite de baja frecuencia.

Para llevar a cabo la descripción matemática de este fenómeno se parte de leyes que describan los aspectos básicos de dicho fenómenos tales como la distribución de la carga y el movimiento en la solución de electrolitos, se hacen suposiciones referentes al fluido.

El movimiento rotacional originado por el mecanismo ICEO puede ser calculado usando el teorema de reciproco de Lorentz, mientras que el movimiento debido al dipolo inducido es calculado usando la polarización del cilindro, estos dos cálculos son realizados mediante dos suposiciones; la aproximación de la doble capa delgada y usando métodos numéricos en 3D usando el método de los elementos finitos en COMSOL.

## 1.4. Ecuaciones hidrodinámicas

Una sustancia en la fase líquida o en la gaseosa se conoce como fluido, y este se deforma de manera continua bajo la influencia del esfuerzo cortante, sin importar lo pequeño que sea y dicha deformación es proporcional a la razón de deformación [23].

### 1.4.1. Ecuación de conservación de masa

El principio de conservación de la masa para un volumen de control se puede expresar como la transferencia neta de masa hacia dentro de un volumen de control, o hacia afuera de este durante un intervalo de tiempo  $\Delta t$ , es igual al cambio neto en la masa total que está dentro de ese volumen en el transcurso de  $\Delta t$  es decir

$$m_{ent} - m_{sal} = \Delta m_{vc}, \quad (1.21)$$

donde los subíndices indican la masa de entrada, salida y volumen de control respectivamente, esto también se puede poner como

$$\dot{m}_{ent} - \dot{m}_{sal} = dm_{VC}/dt, \quad (1.22)$$

donde  $\dot{m}_{ent}$  y  $\dot{m}_{sal}$  son las razones totales de flujo de masa hacia dentro y afuera del volumen de control, y  $dm_{VC}/dt$ , es la razón de cambio de la masa que está dentro de las fronteras de ese volumen. La masa total dentro del volumen de control en cualquier instante  $t$  es:

$$m_{VC} = \int_{VC} \rho dV, \quad (1.23)$$

entonces la razón de cambio de la masa dentro del VC es:

$$\frac{dm_{VC}}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{VC} \rho dV \quad (1.24)$$

Para el caso en que nada de masa cruza la superficie de control el volumen de un sistema es cerrado el principio de conservación de la masa se reduce a  $dm_{VC}/dt = 0$ , esta relación es válida si el volumen de control está en movimiento o formándose.

Ahora considérese el flujo de masa hacia afuera o hacia adentro a través de una área diferencial  $dA$  y sea  $\mathbf{V}$  la velocidad del flujo en relación con un sistema fijo de coordenadas. Si reordenamos la ecuación (1.22) es posible expresar la relación de conservación de la masa para un volumen fijo de control con:

$$\frac{d}{dt} \int_{VC} \rho dV + \int_{SC} \rho(\mathbf{V} \cdot \hat{\mathbf{n}}) dA = 0, \quad (1.25)$$

esta ecuación expresa la razón de cambio respecto al tiempo de la masa que esta dentro del volumen de control mas la razón neta de flujo de masa a través de la superficie de control es igual a cero.

### 1.4.2. Ecuación de Navier-Stokes

En este apartado vamos a mostrar la ecuación Navier-Stokes para fluidos newtonianos y flujos incompresibles es decir  $\rho = \text{constante}$ , y cuyo tensor de esfuerzo es linealmente proporcional al tensor de razón de deformación, también se supone un flujo isotérmico lo que implica una viscosidad dinámica  $\mu$  y cinemática  $\nu$  constantes. Con dichas suposiciones el tensor de esfuerzo viscoso se reduce a:

$$\tau_{ij} = 2\mu\epsilon_{ij}, \quad (1.26)$$

donde  $\epsilon_{ij}$  es el tensor de razón de deformación.

Entonces cuando se tiene un flujo de interés en el campo de velocidad y presión son desconocidos, la ecuación de conservación de momento brindaría tres ecuaciones adicionales. Las cuatro incógnitas son  $u, v, w$  y  $p$ , suponiendo un sistema coordenado rectangular.

La deducción de esta ecuación se basa en hacer uso de la ecuación de Cauchy

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\mathbf{V}) + \nabla \cdot (\rho\mathbf{V}\mathbf{V}) = \rho\mathbf{f} + \nabla \cdot \sigma_{ij} \quad (1.27)$$

donde  $\sigma_{ij}$  es el tensor de esfuerzo y  $\mathbf{f}$  es la fuerza externa.

Para luego reescribir los tensores de esfuerzo en termino del tensores viscosos

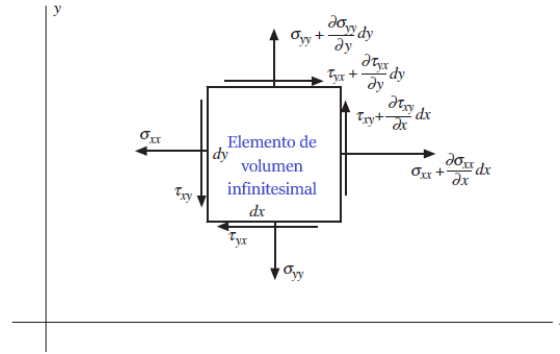


Figura 1.9: Componentes cartesianas de los esfuerzos en un elemento de fluido

para poder obtener ecuaciones de cantidad de movimiento para cada componente en coordenadas cartesianas:

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial P}{\partial x} + \rho f_x + \mu \nabla^2 u \quad (1.28)$$

donde  $u$  es la velocidad del flujo en la dirección  $x$ , y  $P$  la presión, la ecuación anterior se reescribe para cada una de las componentes cambiando la velocidad en dirección  $y$  por  $v$  y en dirección  $z$  por  $w$ . Luego es necesario combinar estas tres ecuaciones en una vectorial obteniendo la ecuación de Navier-Stokes para flujo incompresible con viscosidad constante.

$$\rho \frac{D\mathbf{V}}{Dt} = -\nabla P + \rho \mathbf{f} + \mu \eta \nabla^2 \mathbf{V} \quad (1.29)$$

La ecuación de Navier-Stokes es la base de la mecánica de fluidos. La ecuación de conservación de la masa en forma diferencial contiene las componentes de la velocidad pero como variables dependientes.

### 1.4.3. Condición de no deslizamiento

Cuando existe un fluido en contacto directo con un sólido se adhiere a la superficie debido a los efectos viscosos y no hay deslizamiento. La condición de no deslizamiento es responsable del desarrollo del perfil de velocidad y de el arrastre de superficie, esto es evidenciado en los gradientes de velocidad que se forman debida a que el fluido

se adhiere a la superficie de un cuerpo, y esta capa desacelera a la capa adyacente siguiente y el fenómeno continúa de manera sucesiva. La región del fluido adyacente a la pared en la cual los efectos de viscosidad son significativos se llama capa límite, la ecuación que establece esta condición es:

$$\mathbf{v} = 0. \quad (1.30)$$

## 1.5. Fasores

El uso de fasores sirve para representar una onda, de forma que el vector suma de varios fasores puede ser utilizado para determinar la magnitud y fase de varias ondas después de procesos de interferencia, se utilizan directamente en óptica, ingeniería de telecomunicaciones y acústica. Un fasor es un número complejo que representa una función senoidal cuya amplitud  $A$ , frecuencia angular  $\omega$  y su fase inicial  $\theta$  no varían con el tiempo, de manera formal equivalen al producto de una constante compleja y un factor que encierra la frecuencia y dependencia temporal. La constante compleja que encapsula la amplitud y la dependencia de la fase se conoce como fasor.

En el presente trabajo utilizaremos la representación del campo eléctrico en fasor.

$$\mathbf{E} = \text{Re}[\tilde{E}e^{i\omega t}], \quad (1.31)$$

donde  $\mathbf{E}$  es un vector constante,  $\omega$  la frecuencia del campo aplicado por los electrodos.

## 1.6. Método del elemento finito

Las técnicas numéricas de solución se emplean en los modelos electrocinéticos, y en algunas situaciones son el único recurso, cuando el sistema involucra geometrías complejas o varias especies.

El método del elemento finito (FEM) representa un bien establecido y famoso acercamiento numérico para resolver ecuaciones diferenciales parciales en física e ingeniería. Una mayor ventaja de FEM sobre el método de la diferencia es que las

geometrías irregulares pueden ser mejor aproximadas.

El modelado de fenómenos electro cinéticos requiere la solución simultanea de al menos tres modelos físicos acoplados, en otras palabras emplear las ecuaciones que gobiernan la electrostática (Poisson), el flujo de fluidos (Navier-Stokes y las ecuaciones de continuidad) y el transporte de iones (Nerst-Planck). Pese a que casi cualquier técnica para resolver ecuaciones diferenciales parciales, como la diferencia finita, el volumen finito, el elemento límite, el método de líneas y las técnicas espectrales, por nombrar algunas, pueden usarse para resolver tales problemas numéricamente. La única ventaja de la técnica de elementos finitos parece ser su capacidad de proporcionar una solución para geometrías arbitrarias y dominios computacionales [10].

La aplicación del método depende de en que dimensión se requería trabajar, en general el método esta basado en dos conceptos:

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

### 1.6.1. Ejemplo para problema en 1-D

Para ejemplificar consideremos el siguiente problema de difusión en 1D. La expresión diferencial a resolver es la siguiente (1.32).

$$\begin{cases} \frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \\ c(x, 0) = c_0, \quad c(0, t) = p(t), \quad D \frac{\partial c}{\partial x} = q(t) \end{cases}, \quad (1.32)$$

Donde D es el coeficiente de difusión y C es la concentración en un punto x y en el instante t. La ecuaciones (1.32) se denominan la **forma fuerte**, mientras que la forma débil se expresa de la siguiente manera (1.33).

$$\frac{d}{dt} \int_0^1 c w dx + \int_0^1 D \frac{\partial c}{\partial x} \frac{\partial w}{\partial x} dx = q(t) w(1), \quad (1.33)$$

la ecuación anterior es una ecuación integro-diferencial donde ya están incorporadas las condiciones iniciales y de frontera. Mientras que  $w$  son funciones de prueba que forman un conjunto completo.

$$\omega_i(x) = \begin{cases} \frac{x-x_{i-1}}{x_i-x_{i-1}} & \text{si } x_{i-1} < x < x_i \\ \frac{x-x_{i+1}}{x_i-x_{i+1}} & \text{si } x_i < x < x_{i+1} \\ 0 & \text{si } x < x_{i-1}, x > x_{i+1} \end{cases} \quad (1.34)$$

Se encuentra que la forma débil se expresa como una ecuación matricial (1.35), esta ecuación matricial es en realidad un conjunto de ecuaciones simultaneas para encontrar la concentración  $C$ . En esto consiste el método de elemento finito, que es utilizando en el programa COMSOL.

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

Resumiendo el método de elemento finito, consiste en pasar la física a resolver en su forma fuerte (1.32) a su equivalente llamada forma débil (1.33), donde se incorporan las funciones de peso  $\omega$  y las condiciones de frontera, y posteriormente se discretiza la forma débil de acuerdo al mallado elegido, que da lugar al sistema ecuaciones dadas

por la ecuación (1.35). Justamente este sistema resume el método de elemento finito.

El procedimiento a seguir en COMSOL contiene algunos pasos de manera general, si es que se está usando el asistente de modelo.

1. Se usa el asistente de modelo, seleccionamos la dimensión, y la física que corresponde a interfaces PDE y forma general.
2. Seleccionar un estudio dependiente del tiempo.
3. Es necesario construir una geometría adecuada para el modelo físico, e
4. Para las definiciones globales se define
5. Es necesario ajustar las condiciones de frontera.
6. El mallado es una de las características que está ligada al nivel de precisión de los resultados que se vayan a obtener y se debe poner especial atención en los bordes.
7. El ajuste de la discretización, conste en en la vista de los elementos de las funciones base.
8. Por último se debe calcular el estudio antes seleccionado.
9. En la parte de los resultados, se puede extraer información, según el modelo en cuestión.

# Capítulo 2

## Electrorrotación de una nanovarilla metálica

En este capítulo, se brinda una descripción sobre el problema tratado, se inicia con la descripción del montaje experimental, y posteriormente se explica de manera mas detallada en que consiste el modelo físico, es decir la explicación de los fenómenos presentes así como las suposiciones que fueron tomadas en cuenta en su resolución, en las sección siguiente, se presenta el modelo matemático a implementar en COMSOL, es decir las ecuaciones que se van a resolver de manera numérica y se explica el proceso mediante el cual se obtiene los resultados, para continuar con la sección que explica como se implementaron dichas ecuaciones en COMSOL y los resultados obtenidos, es decir las gráficas de velocidades debidas a el flujo de fluido electro osmótico y las debidas al par eléctrico.

### 2.1. Montaje experimental de la electrorrotación

En el montaje experimental, una de las partes esenciales consiste, en la aplicación de un campo eléctrico rotatorio, esto mediante el uso de 4 electrodos colocados como se muestra en la figura 2.1, la rotación del campo eléctrico estará entonces sujeta a la frecuencia en la que cada electrodo genere el campo eléctrico. Este tipo de estructura se llama cuadrupolar. Con esta estructura solo se puede considerar rotatorio en el

centro de la estructura. Las nano varillas son colocadas en toda la estructura pero las mediciones se deben realizar en el centro de la estructura o bien hacer un promedio del par de fuerzas eléctrico en toda la región de observación. Es posible usar dos sistemas de referencia uno fijado en la varilla, y uno exterior a la varilla. En figura 2.1 parte b se muestra una fotografía obtenida con un microscopio de la suspensión de microvarillas como se puede observar hay algunas pequeñas varillas a mayor profundidad por lo que se ven borrosas, el experimento de electrrotación debe ser realizado de manera inmediata a tener lista la suspensión ya que la las micro varilla luego de tiempo largos comienzan a sedimentarse.

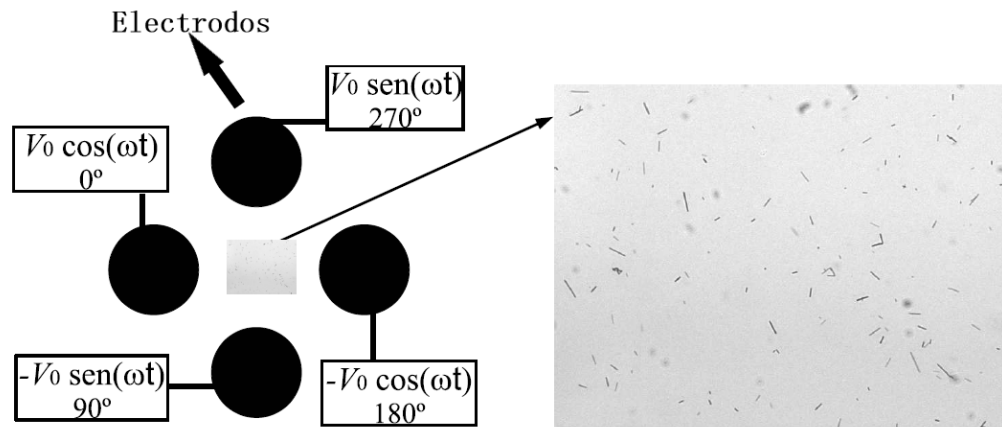


Figura 2.1: Montaje experimental para generar el campo eléctrico rotatorio y imagen microscópica de las nanovarillas en la solución electrolítica.

## 2.2. Planteamiento del problema

El problema a tratar considera una varilla metálica de radio  $b$  y longitud  $2a$  donde  $a$  es la mitad de la longitud del cilindro, como se muestra en la figura 2.1 esta varilla se encuentra inmersa en un electrolito simétrico, y se le aplica un campo eléctrico rotatorio, con velocidad de rotación  $\omega$ , una de las suposiciones es que la frecuencia de rotación del la varilla es mucho menor que la frecuencia del campo eléctrico aplicado es decir que  $\omega \gg \Omega$ .

Como respuesta a la aplicación de este campo eléctrico rotatorio, se induce un

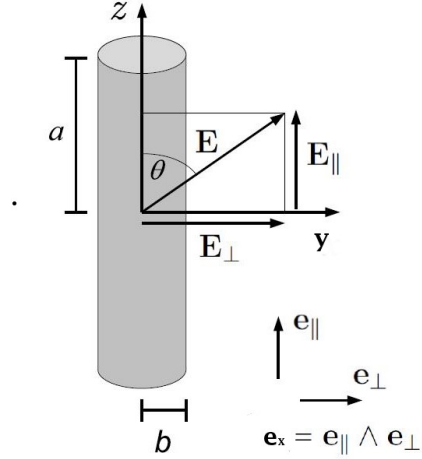


Figura 2.2: Diagrama que muestra la nanovarilla y el campo eléctrico aplicado.

dipolo eléctrico  $\mathbf{P}$  sobre toda la partícula, y el campo aplicado  $\mathbf{E}_0$  ejerce un par de fuerza eléctrico  $\mathbf{T}_e$  sobre la partícula produciendo un movimiento de rotación.

Debido a que dicha partícula esta inmersa en la solución, alrededor de la partícula se forma una doble capa eléctrica y el campo aplicado actúa sobre esta doble capa generando un flujo electroosmotico el cual ejerce un par sobre la micro-varilla metálica, este par se denomina par electroosmotico.

Se planteo calcular la velocidad angular de rotación  $\Omega_T$  de la microvarilla debido a los dos efectos mencionados anteriormente, debemos señalar que dos efectos no fueron considerados en el estudio, el debido al sustrato donde esta la suspensión de microvarillas y el que es consecuencia del movimiento Browniano y dicho calculo fue efectuado para diferentes valores de  $\beta$  que es la proporción entre la altura y radio de las diferentes microvarillas.

### 2.2.1. Formulación Matemática de $\Omega_e^{ROT}$ .

Como consecuencia de la interacción entre la doble capa eléctrica que se induce y la interfaz de la partícula aparecen mas fenómenos como el movimiento Browniano, o los subyacentes a la interacción con las paredes, nosotros consideramos para nuestro estudio únicamente el par eléctrico y el par electroosmotico.

Se realizo la consideración de que la doble capa eléctrica es delgada de forma que

se incorpora esta información como condición de frontera lo que nos permite en lugar de resolver **la ecuación de Poisson, la ecuación de Laplace.**

$$\frac{\sigma}{i\omega C_{DL}}(\nabla\Phi \cdot \mathbf{n})|_s = \Phi|_s \quad (2.1)$$

donde  $\sigma$  es la conductividad de la solución electrolítica,  $C_{DL}$  es la capacitancia diferencial debida a la doble capa y  $\omega$  es la frecuencia del campo eléctrico rotante.

Al fenómeno de rotación de la partícula, contribuyen dos efectos el par de fuerzas eléctrico y el par de fuerzas hidrodinámico, de forma específica debido a un flujo electro osmótico. El cálculo del par eléctrico y posteriormente de la velocidad angular que este produce en la micro partícula puede llevarse a cabo mediante la aproximación de dipolo puntual o mediante el tensor de esfuerzos de Maxwell. Mientras que la contribución ala velocidad angular a la micropartícula debido al flujo electroosmotico lo vamos a calcular haciendo uso del teorema de reciprocidad para fluidos, de este teorema obtenemos una expresión para la velocidad angular debido al flujo electro osmótico, adicionalmente se obtiene una expresión para el coeficiente de fricción viscoso del fluido.

$$\mathbf{v}_s = -\frac{\epsilon}{2\eta} Re[\Phi_s \nabla_s \Phi_s^*], \quad (2.2)$$

donde la  $\mathbf{v}_s$  representa la velocidad de slip y  $\Phi_s$  es el potencial de la doble capa en la superficie de la microvarilla metálica y  $\nabla_s$  es el operador gradiente,  $\epsilon_0$  y  $\eta$  es la viscosidad de la solución electrolítica.

En la subsección 2.2.1 describimos la formulación para obtener la velocidad angular debido al par eléctrico, mientras que en la sección 2.2.2 se presenta la formulación para el calculo del flujo electroosmotico.

El campo rotatorio aplicado en notación de fasores tiene la forma :

$$\mathbf{E}(t) = Re[E_0(\hat{\mathbf{e}}_{||} - i\hat{\mathbf{e}}_{\perp})e^{i\omega t}], \quad (2.3)$$

donde  $E_0$  es la intensidad del campo eléctrico aplicado el cual rota en sentido contrario a las manecillas del reloj y como resultado de este campo, se produce una polarización

de la forma:

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}_{\parallel} + \mathbf{P}_{\perp} = \alpha \mathbf{E}, \quad (2.4)$$

donde  $\alpha$  representa el coeficiente de polarización, luego de descomponer está en sus componentes paralela y perpendicular de la siguiente manera.

$$\alpha_{\parallel} = 4\pi\epsilon a^3 A(\omega) \quad (2.5)$$

$$\alpha_{\perp} = 4\pi\epsilon a^3 B(\omega). \quad (2.6)$$

donde A y B se les conoce como a los coeficientes de polarizabilidad Conforme los iones del electrolito neutralizan la carga de la superficie metálica, la intensidad del campo eléctrico disminuye. Cuando nos alejamos lo suficiente del metal, es apantallado por completo por lo tanto la densidad de carga es cero. Ahora si sustituimos la polarizabilidades en la ecuación (2.4) obtenemos :

$$\mathbf{P} = 4\pi\epsilon a^3 \text{Re}[(A(\omega)\tilde{\mathbf{E}}_{\parallel} + iB(\omega)\tilde{\mathbf{E}}_{\perp})e^{i\omega t}] \quad (2.7)$$

donde hemos usado la forma siguiente para el campo eléctrico:

$$\tilde{\mathbf{E}}_{\parallel} = E_0 \hat{\mathbf{e}}_{\parallel} \quad (2.8)$$

$$\tilde{\mathbf{E}}_{\perp} = -iE_0 \hat{\mathbf{e}}_{\perp} \quad (2.9)$$

El campo eléctrico, que actúa sobre la partícula inmersa en la solución, da como resultado que dicha partícula se polarice induciendo en ella un dipolo. De esta manera el potencial total es la suma del potencial eléctrico generado por el dipolo más el impuesto por el campo eléctrico aplicado. Cuando el campo eléctrico actúa sobre el dipolo, ejerce un par de fuerzas, que esta dado por

$$\mathbf{T}_e = \mathbf{P} \times \mathbf{E}. \quad (2.10)$$

Debido a que tenemos un campo eléctrico alterno, se debe considerar el promedio temporal del par eléctrico, si suponemos que ambas funciones tienen la misma frecuencia

$$\mathbf{T}_e = \frac{1}{2} \text{Re}[\tilde{\mathbf{P}} \times \tilde{\mathbf{E}}^*] \quad (2.11)$$

donde \* significa complejo conjugado. Ahora sustituyendo la expresión (2.11) y (2.8) en la ecuación (2.10) llegamos a que

$$\mathbf{T}_e = \frac{1}{2} \text{Re}(4\pi\epsilon a^3 E_0^2 i(A + B)). \quad (2.12)$$

Ahora bien usando las condiciones de equilibrio de ambos pares de fuerza que son las siguientes:

$$\mathbf{T}_e + \mathbf{T}_v = 0 \quad (2.13)$$

$$\mathbf{T}_v = -\gamma \Omega \mathbf{e}_x. \quad (2.14)$$

donde  $\mathbf{T}_v$  es el par viscoso que ejerce el fluido como respuesta al par eléctrico y  $\gamma$  es el coeficiente viscoso. Entonces de la expresión de equilibrio obtenemos(2.11),

$$\Omega_e^{ROT} = -\frac{2\pi}{\gamma} a^3 \epsilon E_0^2 \text{Im}(A + B) \quad (2.15)$$

Una expresión analítica de  $\gamma$  para varillas delgadas ha sido propuesta por Tirado et.al [24] y está dada por :

$$\gamma = \frac{8\pi\eta a^3}{3(\ln(1/\beta)) + \delta_\perp} \quad (2.16)$$

De modo que sustituyendo esta expresión, se obtiene la siguiente

$$\Omega_e^{ROT} = \frac{-3\epsilon E_0^2}{4\eta} [\ln(1/\beta) + \delta_\perp] \text{Im}(A + B) \quad (2.17)$$

dicha expresión es para varillas delgadas, con  $\delta_\perp = 0.662 + 0.917\beta - 0.05\beta^2$ ,  $\eta$  la viscosidad del liquido y  $\beta$  la razón entre el radio y el largo de la varilla.

Recuerde que esta velocidad de rotación se obtiene usando la expresión para par viscoso que se obtiene de considerar un varilla infinitamente delgada y de aproximar el dipolo a un dipolo puntual. Ahora bien es necesario obtener los valores para los coeficientes sin dimensión A y B, esto mediante la simulación en Comsol.

**Estrategia para obtener A y B.** De la figura 2.2 se observa que nuestro problema es axisimétrico además dado que es una varilla metálica podemos elegir el potencial dentro de la misma como cero lo que nos permite encontrar el potencial al exterior, de manera que la solución a la ecuación de Laplace esta dada por

$$\Phi = \Phi_{ext} + \Phi' = \Phi_{ext} + \sum_{l=1}^{\infty} \frac{A_l}{r^{l+1}} P_l(\cos \theta) \quad (2.18)$$

donde  $\Phi_{ext}$  debido al campo aplicado en la dirección del eje del cilindro es decir el paralelo y el primado debido al dipolo eléctrico inducido. En la ecuación (2.15) se multiplica por un polinomio de Legendre  $P_l$  y se entrega sobre una superficie cerrada, ahora usando la condición de ortogonalidad obtenemos

$$A = \frac{3}{4\pi} \oint \Phi'_{\parallel} P_1(\cos \theta) ds \quad (2.19)$$

donde  $\Phi_{\parallel} = \Phi'_{\parallel} - \Phi_{ext}^z$ , de manera similar para el caso de la polarizabilidad perpendicular B.

$$B = \frac{3}{4\pi} \oint \Phi'_{\perp} P_1(\cos \theta) ds \quad (2.20)$$

aquí  $\Phi_{\perp} = \Phi'_{\perp} - \Phi_{ext}^y$

Las expresiones (2.19) y (2.20) nos va a permitir calcular numéricamente los coeficientes de polarizabilidad A y B si conocemos  $\Phi_{\perp}$  y  $\Phi_{\parallel}$  para resolver la ecuación de Laplace sujeta a la condición de frontera (2.1) sobre la superficie de la micropartícula

Haciendo uso de argumentos semejantes ala ecuación (2.13) para el campo en la dirección perpendicular es obtenida una expresión para B. Esta integral se calcula sobre una superficie esférica que encierra a la partícula metálica, momento dipolar efectivo será  $p = 4\pi\epsilon A_1$ . Dado que la capa doble forma parte del mecanismo de polarización de la partícula es necesario recuperar la información de la capa doble y emplear un modelo matemático que nos permita introducirla en las ecuaciones anteriores.

### 2.2.2. Formulación Matemática de $\Omega_{ICEO}^{ROT}$

El par de fuerzas hidrodinámico, se debe a que el campo eléctrico actúa sobre el seno del electrolito de manera concreta actúa sobre los iones que están en la doble capa eléctrica, generando un flujo alrededor de la microvarilla este flujo es conocido como flujo electroosmotico (Flujo ICEO). Este flujo a su vez ejerce un par sobre la microvarilla el cual se le conoce como Par de Rotación ICEO,  $T_{ICEO}$  un movimiento a la partícula esto gracias a la fuerza viscosa. Para la capa delgada el campo de velocidades se halla resolviendo la ecuación de Stokes con una condición de contorno con velocidad de slip sobre la superficie de la partícula.

Una aproximación para varillas delgadas esta dada por Tirado:

$$\Omega_{iceo} = \frac{-3}{2a^3} \int_{-a}^a z \hat{e}_z \times \mathbf{v}_s \quad (2.21)$$

donde  $\mathbf{v}_s$  es la velocidad de deslizamiento dada por la ecuación (2.2)

En nuestro trabajo se analizan varillas que no necesariamente están incluidas en la aproximación de varillas delgadas es decir betas no tan pequeños.

### 2.3. Teorema de reciprocidad para fluidos.

Para emplear el teorema de reciprocidad consideramos una micro partícula moviéndose en un fluido, los puntos de su superficie se mueven con un velocidad de slip mas una velocidad de traslación y una de rotación

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_s + \mathbf{u} + \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r} \quad (2.22)$$

Para resolver nuestro problema, dividimos el problema en dos partes, uno donde el tensor de esfuerzos hidrodinámicos es  $\overleftrightarrow{T}_1$  y la velocidad de la micropartícula es  $\mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_s$  y el otro problema donde el tensor de esfuerzos es  $\overleftrightarrow{T}_2$  para el cual la velocidad de la micropartícula es  $\mathbf{v}_2 = \mathbf{u} + \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}$ . el teorema de reciprocidad para fluidos establece que

$$\int \hat{\mathbf{n}} \cdot \overleftrightarrow{T}_1 \cdot \mathbf{v}_2 ds = \int \hat{\mathbf{n}} \cdot \overleftrightarrow{T}_2 \cdot \mathbf{v}_1 ds \quad (2.23)$$

Sustituyendo la  $\mathbf{v}_1$  y  $\mathbf{v}_2$  en la ecuación (2.23) y utilizando las expresiones de la ecuación (2.24) Luego del equilibrio de fuerzas y pares se tiene:

$$\int \hat{\mathbf{n}} \cdot \overleftrightarrow{T}_1 ds = - \int \hat{\mathbf{n}} \cdot \overleftrightarrow{T}_2 ds; \quad \int \mathbf{r} \times (\hat{\mathbf{n}} \cdot \overleftrightarrow{T}_1) ds = - \int \mathbf{r} \times (\hat{\mathbf{n}} \cdot \overleftrightarrow{T}_2) ds \quad (2.24)$$

sustituyendo las ecuaciones en el teorema de reciprocidad se obtiene la ecuación siguiente

$$- \int (\hat{\mathbf{n}} \cdot \overleftrightarrow{T}_2) ds \cdot \mathbf{u} - \int \mathbf{r} \times (\hat{\mathbf{n}} \cdot \overleftrightarrow{T}_2) ds \cdot \boldsymbol{\Omega} = \int \hat{\mathbf{n}} \cdot \overleftrightarrow{T}_2 \cdot \mathbf{v}_s ds \quad (2.25)$$

Debido a que solo consideramos el movimiento de rotación de la micropartícula entonces  $\mathbf{u} = 0$  se llega a que :

$$- \int \mathbf{r} \times (\hat{\mathbf{n}} \cdot \overleftrightarrow{T}_2) ds \cdot \boldsymbol{\Omega} = \int \hat{\mathbf{n}} \cdot \overleftrightarrow{T}_2 \cdot \mathbf{v}_s ds \quad (2.26)$$

Dado que los campos eléctricos tiene componentes en z y y, la partícula rota alrededor del eje x es decir  $\Omega_y = \Omega_z = 0$  y  $\Omega_x = \Omega = 0$

$$\Omega_x = \Omega_{ICEO}^{ROT} = -\frac{\int \hat{\mathbf{n}} \cdot \overleftrightarrow{\mathbf{T}}_2 \cdot \mathbf{v}_s ds}{\int \mathbf{r} \times (\hat{\mathbf{n}} \cdot \overleftrightarrow{\mathbf{T}}_2) ds} \quad (2.27)$$

donde el coeficiente de fricción  $\gamma$  es igual a

$$\gamma = \int \mathbf{r} \times (\hat{\mathbf{n}} \cdot \overleftrightarrow{\mathbf{T}}_2) ds \quad (2.28)$$

Así que la velocidad de la micropartícula se debe al efecto del par eléctrico y al efecto del par ideo de tal manera que la velocidad angular de rotación de la partícula esta dada por:

$$\Omega_T = \Omega_e^{ROT} + \Omega_{ICEO}^{ROT} \quad (2.29)$$

# Capítulo 3

## Resultados de la electrorotación

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos algunos de manera analítica lo cuales se explicaran con detalle, para proseguir con los obtenidos mediante la simulación con COMSOL. En la primera sección se mostrará la descripción esquemática de como fue empleado COMSOL, presentamos el diagrama de flujo de como se implementa COMSOL, la geometría y el mallado y algunas características de la simulación, En la segunda sección se presento el análisis de convergencia del mallado con el fin de mostrar la fiabilidad de nuestros resultado numéricos. En la tercera sección presentamos los resultados numéricos de nuestra simulación, por medio de COMSOL, para la electro-rotación de una nanovarilla metálica inmersa en una solución electrolítica acuosa.

### 3.1. Implementación de la simulación en COMSOL

El software comercial COMSOL nos permite realizar simulaciones de diversos sistemas cuenta con un ambiente que lo vuelve muy versátil. en esta tesis se utilizo este software que esta ampliamente utilizado en diversas áreas de la investigación y que es aceptado por la comunidad científica, como mencionamos en el capítulo 1 en la ultima sección utiliza el mencionado método del elemento finito. En la figura 3.1 se muestra el diagrama de flujo de una simulación general, mismo que a continuación describimos brevemente. En primer lugar se inicia escogiendo la dimensión espacial del sistema

a tratar en nuestro caso es el 3D contiene la física de nuestro sistema finalmente se escoge si es estudio es estacionario o variable con el tiempo. Posteriormente se eligen los parámetros y variables del estudio, y el tipo de materiales que aparecen en nuestro sistema, como tercer paso se construye la geometría del sistema, se especifica las condiciones de frontera para resolver las física involucrada y finalmente se realiza el mallado, el cual es un proceso muy delicado. Como cuarto paso se ejecuta el estudio y se elige el método de solución para el resolvidor de las ecuaciones diferenciales involucradas en la física, se selecciona también la tolerancia relativa. En el quinto paso una vez que se han obtenido los valores numéricos de las variables independientes y dependientes involucradas en las ecuaciones resueltas, este paso se realiza el análisis de los resultados, puede ser calculando nuevas cantidades o exportando los datos de las gráficas y en general el llamado post tratamiento de resultados.

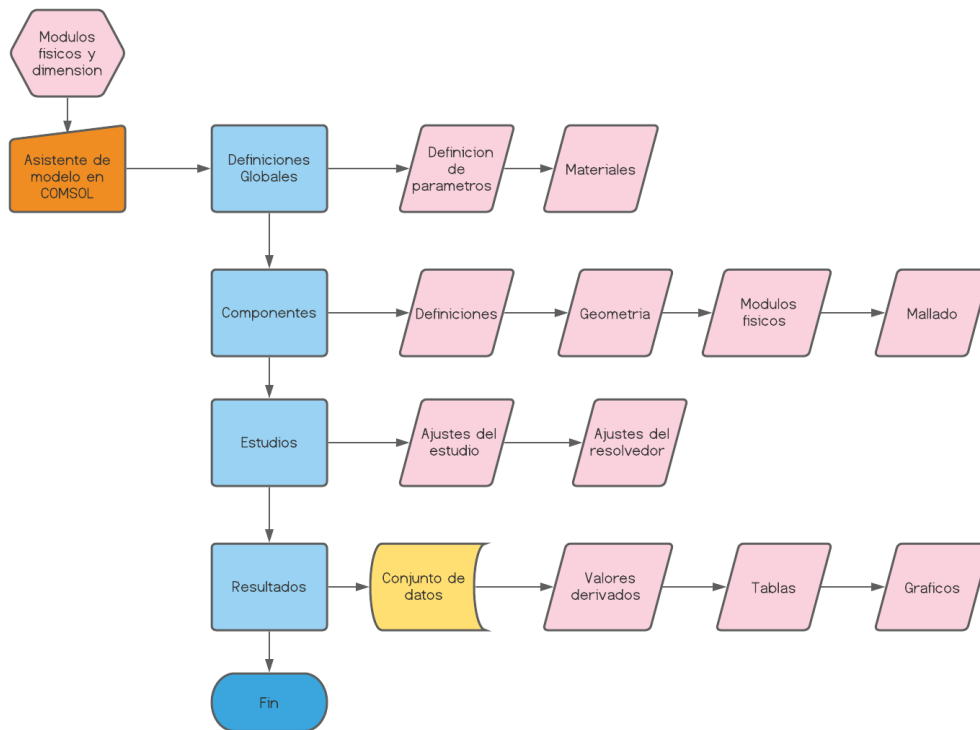


Figura 3.1: Diagrama del algoritmo en Comsol

Ahora se presentan algunos detalles importantes de nuestra simulación.

En la figura 3.2 se muestra la geometría de nuestros sistemas se muestra el volumen

de control de nuestro sistema que esta limitado por un cilindro recto de radio 10 y de altura 20, todo el estudio es adimensional también tenemos una esfera de radio la cual es empleada para medir las polarizabilidades  $A$  y  $B$  además esta encierra a la varilla metálica con dimensiones  $2a$  de altura y radio  $b$ .

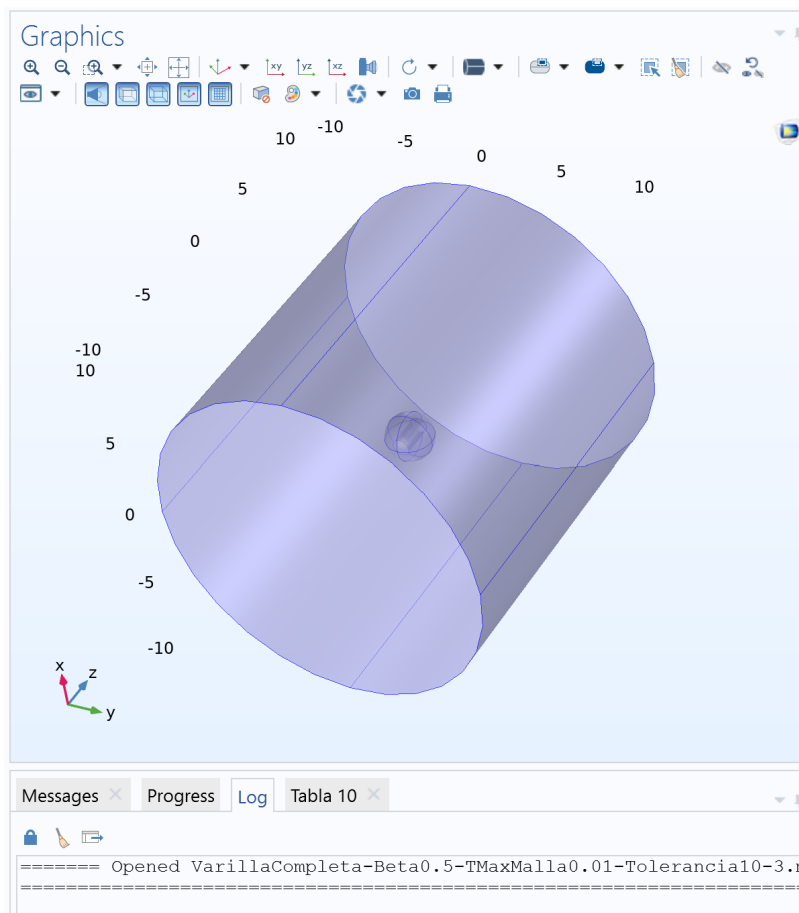


Figura 3.2: En esta imagen se muestra la geometría del sistema es decir el cilindro grande y la esfera que encierra la micro varilla

Como ya mencionamos en toda la simulación un punto muy delicado es el mallado de la geometría. En la figura 3.3 mostramos el mallado para nuestro estudio, es mas denso en el interior de la esfera que rodea a la nanovarilla, en la tabla 3.1 se puede ver el numero de grados de libertad que están en proporción con el numero de nodos y que para la diferentes se ha construido.

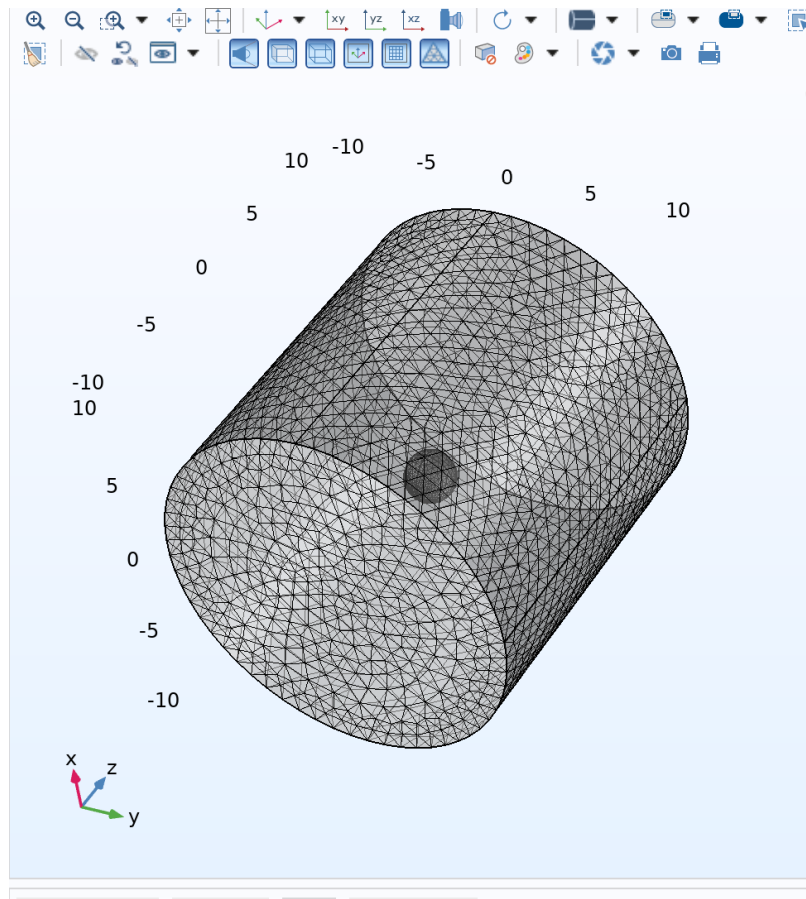


Figura 3.3: Mallado en el cilindro y la esfera

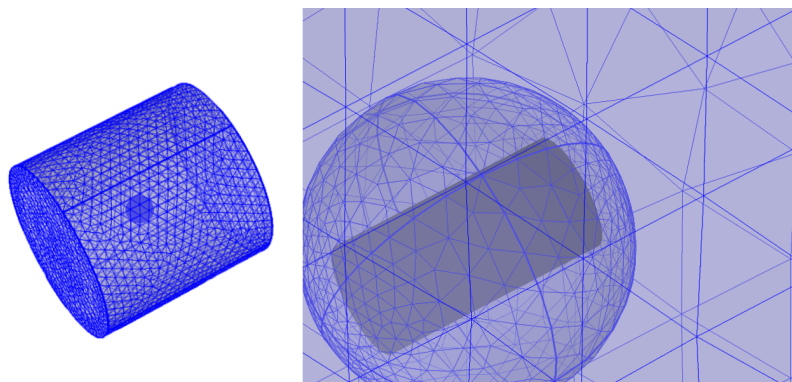


Figura 3.4: Mallado en el cilindro y la esfera

En la figura 3.4 se observa que el mallado no es uniforme en todo el volumen de control obsérvese que fuera de la esfera el mallado es mas grueso que entre la esfera y la nanovarilla metálica es aun mas fino pero en la superficie de la nanovarilla es

extremadamente más fino. Esto se debe a que las polarizabilidades que se calculan sobre la esfera no son tan sensibles al mallado, en cambio el coeficiente de viscosidad que se evalúa en la superficie de la nanovarilla requiere que el mallado sea extremadamente mas fino. La figura 3.5 muestra un acercamiento mas detallado del mallado sobre la superficie de la nano varilla

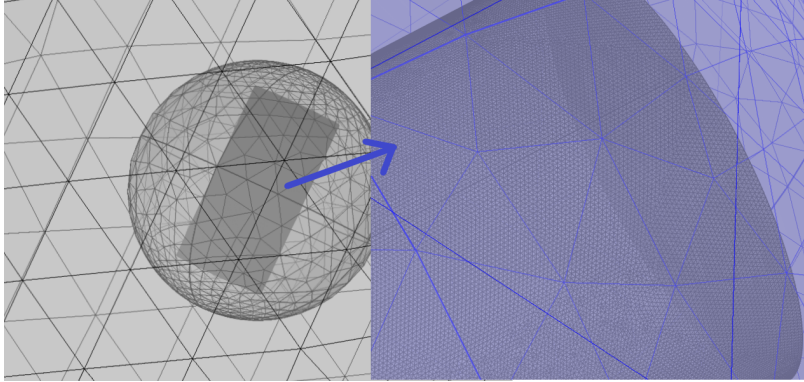


Figura 3.5: Mallado en el la micropartícula

En nuestra simulación mostrada en la figura 3.6 el calculo del potencial eléctrico en la doble capa nos permitió obtener los coeficientes A y B, por evaluación de la integral de superficie sobre la esfera por medio de las ecuaciones (2.19) y (2.20), así como también conocer las componentes del vector esfuerzo cortante, el cual se obtiene de resolver la ecuación de Navier-Stokes para ser posible calcular el coeficiente de viscosidad  $\gamma$  por medio de la ecuación (2.28).

Es importante destacar que para simular el problema en COMSOL se ha dividido en dos estudios uno que refiere a la electrostática primero tomando un en cuenta la aplicación de un campo eléctrico que esta dirigido a lo largo del eje de la partícula para obtener el  $\phi_{||}$ . En esta situación se resuelve la ecuación de Laplace con las siguientes condiciones de frontera en la cara lateral del cilindro mayor se impone la condición de no existencia de carga superficial mientras que sobre la superficie de la nanovarilla se debe satisfacer la condición de la ecuación (3.1) luego en el plano de simetría del potencial debe ser cero, en la interfase se debe validar la ecuación de la doble capa delgada.

$$\frac{\sigma}{i\omega C_{DL}}(\nabla\phi \cdot \hat{\mathbf{n}})|_{S=\phi}|_s - V \quad (3.1)$$

siendo  $\sigma$  la conductividad del electrolito,  $C_{DL}$  la capacidad de la capa doble y  $\hat{\mathbf{n}}$  el vector unitario normal a la superficie S del cilindro y  $V$  el potencial en el interior del cilindro, que se tomo como cero. Siguiendo un procedimiento similar se obtiene  $\Phi_{\perp}$ , donde ahora se considera un campo eléctrico homogéneo dirigido a lo largo del eje y que esta perpendicular al eje del cilindro, considerando condiciones de frontera similares a la del caso anterior.

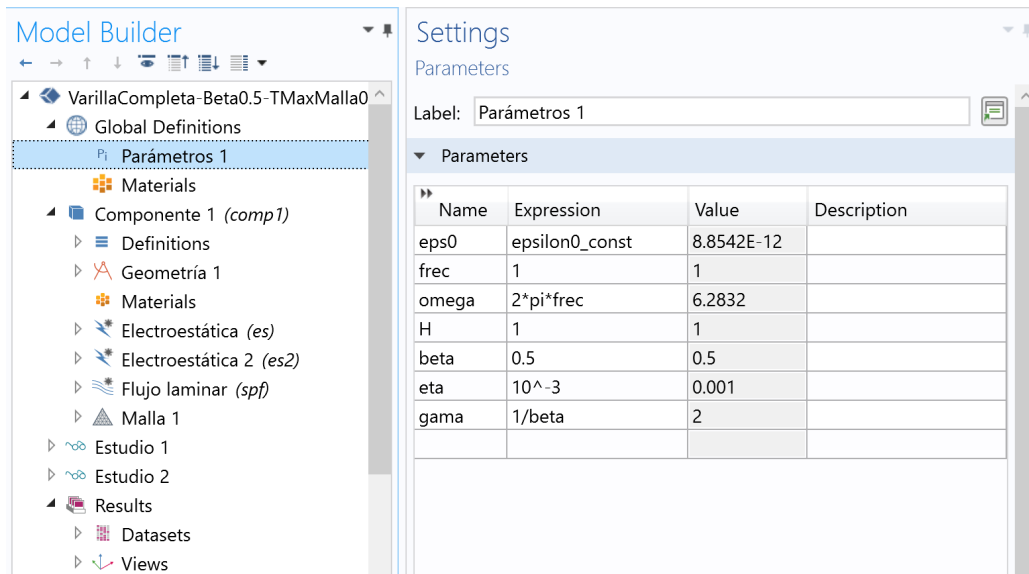


Figura 3.6: Esta imagen muestra los parámetros necesarios para la simulación

En la tabla 3.1 se muestran algunas características que se consideran relevantes en las corridas de los estudios 1 y 2, para  $\beta = 0.5$ , obsérvese en el estudio 1 el tiempo de maquina casi es el doble que para el estudio dos, esto debido a que el estudio uno se resuelve dos veces la ecuación de Laplace mientras que en el estudio uno solo se resuelve la ecuación de Navier-Stokes.

Tabla 3.1: Características de la simulación de la electrorotación en COMSOL Multiphysics.

Estudio	Física	Propiedad Física	Tiempo Maquina	Memoria Física	Tolerancia Relativa
Estudio 1	Ecuación Laplace	$\Phi_{\parallel}, \Phi_{\perp}$	23 hrs, 29 min, 46 seg	24.47 GB	0.0001
Estudio 2	Ecuación Navier-Stokes	$\mathbf{v}, \mathbf{T}$	12 hrs, 36 min, 4seg.	25.13GB	0.001

Para el calculo numérico de las velocidades de rotación debidas a la parte eléctrica y electro-osmótica  $\Omega_e^{\text{ROT}}$  y  $\Omega_{\text{iceo}}^{\text{ROT}}$  respectivamente, se realizo una simulación en COMSOL, dicha simulación fue hecha para tres valores de betas diferentes,  $\beta = 0.04, 0.5, 1.0$ . Para poder simular este problema en particular, la física empleada fue electrostática y flujo laminar, la geometría incluye por supuesto la partícula en cuestión, una esfera cuyo fin es el de poder hacer las evaluaciones correspondientes con respecto a modelo matemático seguido.

En el método del elemento finito el mallado es una parte esencial en lo que a las aproximaciones concierne por lo tanto en cada una de las simulaciones se ha especificado un mallado diferentes para cada parte geométrica esto con el fin de reducir el tiempo de computo sin aumentar el error respecto de los resultados deseados, de modo que el mallado se ha ajustado, según sea conveniente.

### 3.2. Análisis de convergencia de los resultados numéricos

Con el propósito de dar un sustento a nuestros resultados numéricos de la simulación, de la electro-rotación de una nanovarilla metálica inmersa en una solución acuosa, realizamos un análisis de convergencia variando el numero de grados de libertad en el mallado y la tolerancia relativa, para el caso de una nano varilla de beta = 0.5.

La formula para determinar los errores relativos es la siguiente:

$$E_A = \frac{(A_f - A)}{A_f} * 100, \quad (3.2)$$

de manera similar se obtiene el error relativo para gamma.

Tabla 3.2: Error relativo porcentual de A y  $\gamma$  con la tolerancia fija

Tamaño de elemento max.	Tolerancia	A máxi- ma	Gamma	Error de A	Error de gamma
0.01	$10^1$	0.5116	19.102	0.217481	6.6019309
0.01	$10^0$	0.5116	NS	0.217481	NS
0.01	$10^{-1}$	0.51049	17.902	0	0
0.01	$10^{-2}$	0.51049	17.902	0	0
0.01	$10^{-3}$	0.51049	17.902	0	0
0.01	$10^{-4}$	0.51049	17.902	0	0
0.01	$10^{-5}$	0.51049	17.902	0	0
0.01	$10^{-6}$	0.51049	17.902	0	0

En la siguiente figura 3.7 se muestra los resultados de la convergencia en el calculo del coeficiente de la Polarizabilidad  $P$  y el coeficiente de viscosidad, que son dos parámetros relevantes en la electro rotación estos fueron calculados en base a la tabla 3.2, es importante notar que en la tabla hay un valor de gamma para el cual no se obtuvo solución (NS) por lo que tampoco se calculo su error, de manera que en la gráfica se coloco como cero, para este análisis se fue variando el numero de grados de libertad, manteniendo fija la tolerancia relativa, se observa que se adquiere una convergencia cuando el mallado es de 2 millones.

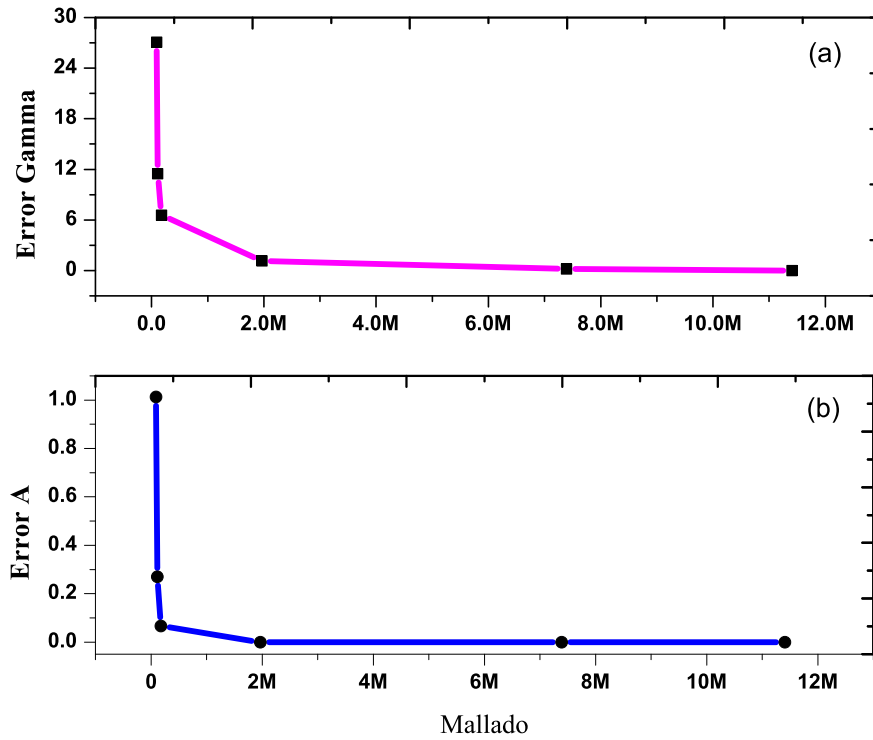


Figura 3.7: Gráfica de convergencia del error relativo de(a) del parámetro  $\gamma$  y (b) el parámetro A con tolerancia relativa fija de  $10^{-3}$

En seguida se muestra en la figura 3.8 el análisis de convergencia para a el calculo de los parámetros A y  $\gamma$ , pero ahora manteniendo fijo el numero de grados de libertad del mallado y variando la tolerancia relativa, se observa que cuando la tolerancia es de 0.001 los valores numéricos de A y  $\gamma$  ya no cambian.

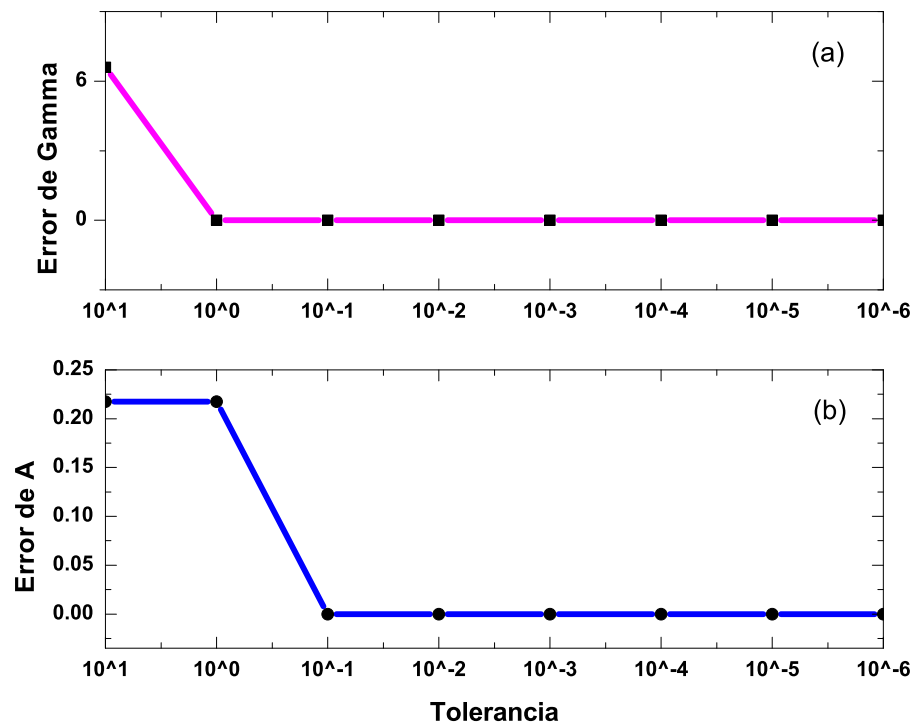


Figura 3.8: Gráfica de convergencia del error relativo (a) del parámetro  $\gamma$  y (b) del parámetro A con grados de libertad fijos

De acuerdo a las figuras 3.7 y 3.8, una mallado y tolerancia relativa adecuadas donde ya se obtiene convergencia y buenos resultados es para 1965722 grados de libertad y  $10^{-3}$ . Justo estos valores nos sirvieron de referencia para hacer las corridas o simulaciones para los diferentes betas.

### 3.3. Electrrotación de nanovarillas metálicas

En primer lugar presentamos las polarizabilidades, que son un parámetro que caracteriza al dipolo inducido en la nanovarilla debido al campo eléctrico externo aplicado. Posteriormente, mostramos la velocidad angular de rotación debido al efecto eléctrico sobre el dipolo. En seguida, se presentan los resultados para la velocidad de ración de la nanovarilla debido al efecto electroosmotico. Y finalmente, mostramos los resultados del coeficiente de viscosidad para diferentes  $\beta$  y comparando estos con los

obtenidos por la expresión Tirado, y con aquellos de la referencia (1) donde se simulo un octavo de la varilla.

### 3.3.1. Polarizabilidades A y B

El modelo en COMSOL se realizo para simular la varilla completa en 3-D, cuyos resultados se comparan en secciones mas adelante, se describe el proceso para obtener los valores de las polarizabilidades paralela y perpendicular respectivamente  $A$  y  $B$ .

Las polarizabilidades fueron calculadas usando el potencial eléctrico calculado de manera numérica mediante la simulación es decir una vez que se resolvió la ecuación de Laplace sobre la esfera, mediante las ecuación (2.19) para la polarizabilidad perpendicular y la ecuación (2.20).

La figura 3.9 presenta la parte imaginaria de la polarizabilidad A para tres valores de beta  $\beta$ . Nuestros resultados coinciden con los reportados en la referencia 1, donde se hizo el estudio considerando solo una octava parte de la nanovarilla, por lo cual nuestros resultados están validados por esta comparación. Notemos que para el valor máximo de la parte imaginaria de A conforme beta va aumentando el máximo se recorre a frecuencias mayores pero además para betas mas pequeñas también el máximo en a polarizabilidad de A es pequeño. Cabe recordar que la parte imaginaria de A esta relacionada con la velocidad angular de rotación eléctrica por medio de la ecuación (2.17).

En la figura 3.10 mostramos la parte imaginaria de la polarizabilidad de B la cual nuevamente muestra que el máximo se corre a frecuencias mayores conforme beta va disminuyendo además que para el caso de  $\beta = 0.5$  el coeficiente B es mucho menos que el A lo que significaría una mayor polarización en la dirección perpendicular ala micro varilla y comparado con la referencia, ahora para el caso de  $\beta = 0.04$  también el coeficiente B es mucho menor que el A, de hecho es casi despreciable en comparación con el coeficiente A.

Comprando las polarizaciones  $A$  y  $B$  en la figura 3.10 se observa que los puntos máximos están en posiciones similares.

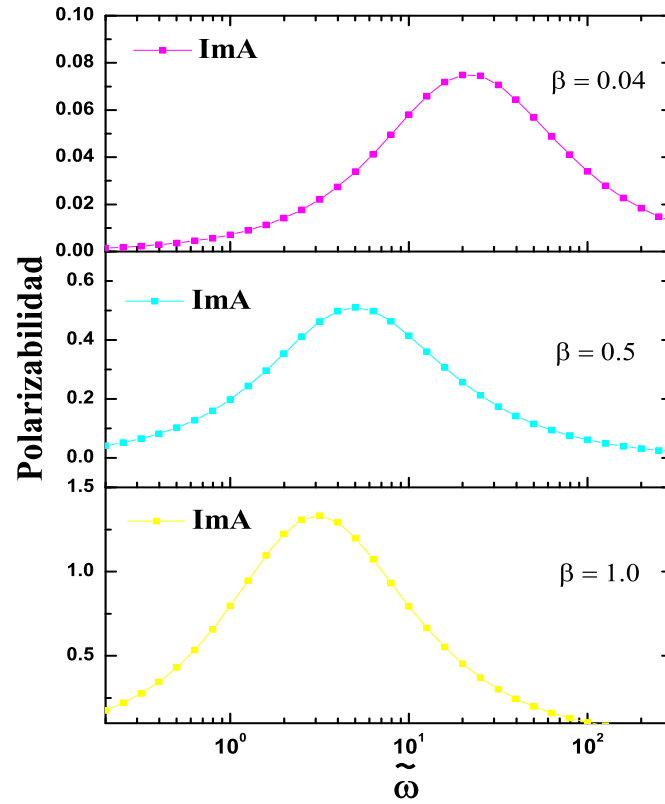


Figura 3.9: Polarizabilidad azimuthal al eje del cilindro con  $\tilde{\omega} = \omega C_{DL}/\sigma$

En la referencia [1] no se realizó el cálculo para  $\beta = 1.0$  debido a que ese estudio únicamente se desarrolló para varillas delgadas, para este caso se observa como ambos coeficientes tienen las mismas gráficas lo cual significaría que no habría electrorotación debido a que ambas componentes son iguales.

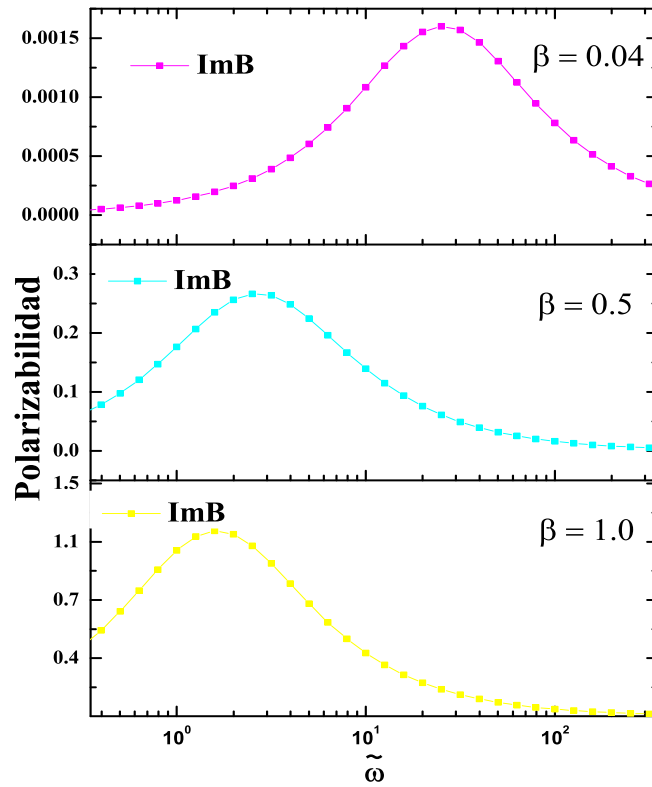


Figura 3.10: Polarizabilidad perpendicular al eje del cilindro

Es importante hacer evidente la diferencia de proporciones entre los máximos de las polarizabilidades  $\frac{Im[B]_{MAX}}{Im[A]_{MAX}}$ , como se observa de las figuras 3.9 y 3.10 dichas proporciones fueron reportadas en la tabla 3.3.

$\beta$	Proporción
0.04	0.0213532
0.5	0.52223
1.0	0.885611

Tabla 3.3: Relación entre los máximos valores para las polarizabilidades entre B y A

### 3.3.2. Velocidad angular debida la dipolo inducido

En la sección 2.3, se establece que es necesario el calculo numérico del dipolo también llamado polarizabilidad  $\mathbf{P}$  que depende de las polarizabilidades azimutal y longitudinal  $A$  y  $B$  respectivamente, mismas que dependen de el potencial eléctrico sobre la esfera por lo que las expresiones (2.19) y (2.20) respectivamente, por medio de la expresión (2.15) obtenemos la parte de la velocidad angular de la partícula debido a la interacción del dipolo inducido con el campo aplicado en la figura 3.11 se muestra esta contribución para diferentes  $\beta$  se puede ver aquí que conforme  $\beta$  rece el mínimo se mueve hacia frecuencias menores también el mínimo para  $\beta = 0.04$  el mínimo esta en .14 sin en cambio para  $\beta = 0.5$  disminuye en contraste cuando vuelve aumentar beta también lo hace el mínimo.

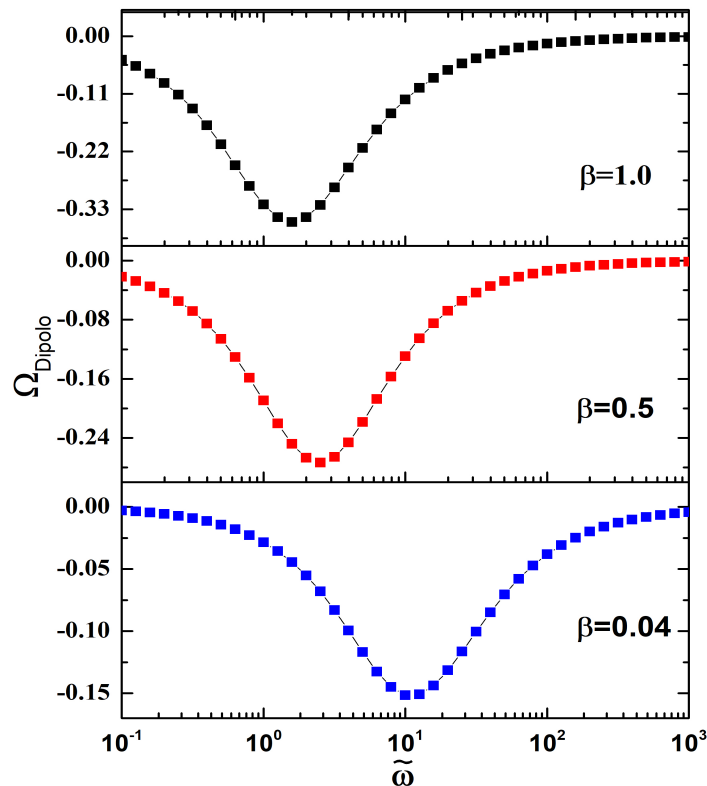


Figura 3.11: Comparación de la velocidades angulares de rotación debidas al dipolo inducido en la micro varilla metálica para diferentes  $\beta$

La figura 3.11 presenta las velocidades angulares debidas al dipolo eléctrico como función de la frecuencia adimensional, es posible notar que la velocidad de rotación, para  $\beta = 1.0$  es mucho mayor que para las otras, además que existe un corrimiento del mínimo en la velocidad conforme beta disminuye. Es importante mencionar que el campo eléctrico aplicado rota en contra de las manecillas de reloj, ahora bien la acción del dipolo inducido hace que las nanovarillas roten a favor de las manecillas del reloj (counterfield) debido a esto las velocidades son negativas como se ve en la figura 3.11.

### 3.3.3. Velocidad angular debida al flujo electroosmotico (ICEO).

En esta sub sección presentamos los cálculos numéricos de nuestra simulación, del efecto debido al flujo electro-osmótico sobre la micro varilla que en base resultado obtenido del teorema de reciprocidad (2.27), la cual requiere el conocimiento de el potencial eléctrico y tensor de esfuerzos castrantes  $\overleftrightarrow{T}$ .

En la figura (3.12) se muestran los resultados obtenidos por medio de la expresión (2.27), para la contribución a la velocidad angular de rotación debido al efecto que ejerce el flujo electroosmotico sobre la microvarilla metálica, para diferentes  $\beta = 0.04, 0.5y1.0$ . Las cantidades mostradas son adimensionales. Un primer aspecto a notar es que el máximo de los espectros de electro rotación se mueve a frecuencias mayores conforme  $\beta$  crece, sin embargo, para  $\beta = 1.0$  hay un cambio de signo y su máximo se corre a frecuencias menores.

Para  $\beta = 0.4$  y  $\beta = 0.5$  se muestra que el flujo electro osmótico hace rotar a las nano varillas a favor del movimiento de las manecillas del reloj (cofield), mientras que para  $\beta = 1.0$  el flujo electro osmótico hace que rote contra las manecillas del reloj (counterfield).

La inversión de signo no es un fenómeno nuevo, donde aparece la doble capa. Este fenómeno también se observa en el calculo de fuerza entre dos placas cargadas del mismo signo, para un concentración muy pequeña se observa que las placas se ejercen fuerza de repulsión, mientras que, al ir aumentando la concentración de la solución electrolítica, llega a un valor de la concentración de iones en la cual ahora

la fuerza entre las placas es de atracción ver referencia [5]. Aunque aquí no estamos variando la concentración de la solución electrolítica, si hay un variación en los tiempos de respuesta, lo que creemos al parecer contribuye a que ocurra la inversión en la velocidad angular debido al flujo electroosmotico.

También se puede notar de las gráficas es que debido a que la velocidad de rotación total es la suma de ambas contribuciones eléctrica y ICEO, esto es que dependiendo de las frecuencias que cuando la contribución de la velocidad de rotación ICEO es mayor las microparticulas rotaran en sentido del campo eléctrico rotante que se aplica, mientras que cuando la contribución del dipolo sea mayor las partículas rotaran en contra de dicho campo, también puede ocurrir que ambos efectos se anulen es decir que las microvarillas no roten.

En general la gente que fabrica micro varillas, es importante para ellos el conocimiento que se expone aquí ya que por medio de estos espectros de rotación, generalmente las micro varillas son fabricadas con betas menores a .5 no obstante nuestra metodología es útil para cualquier beta a diferencia de los resultados analíticos de tirado útiles únicamente para microvarillas del orden de  $\beta$  igual 0.4.

Con los resultados obtenidos por la simulación es posible calcular el valor de la velocidad ideo  $\Omega_{iceo}$  para las diferentes valores de  $\beta$  mediante el calculo de la integral.

En la figura 3.13 se observa que el resultado de la velocidad angular ICEO para  $\beta = 0.04$  son los únicos que coinciden con los realizados por medio del teorema de reciprocidad, ya que la expresión de Tirado, es validad únicamente para varillas delgadas.

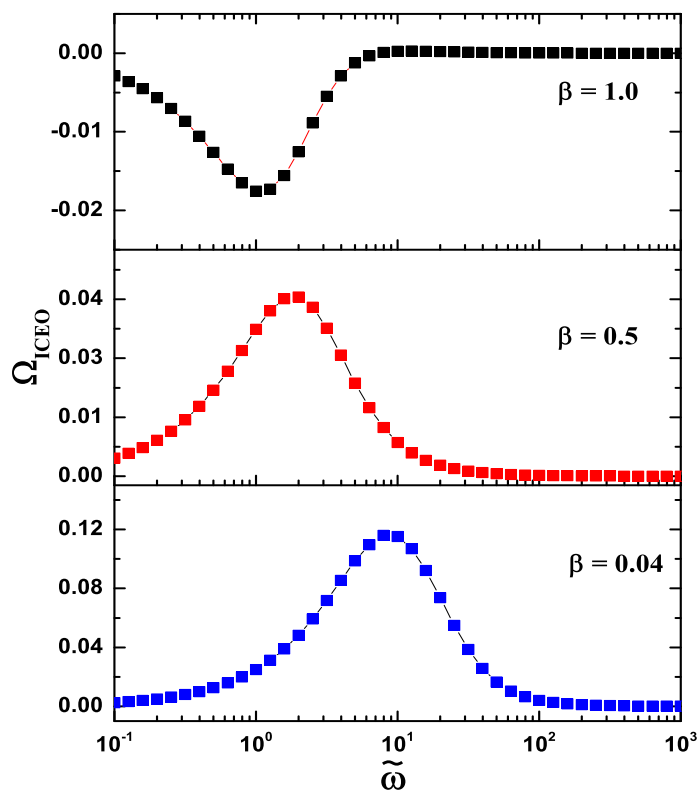


Figura 3.12: Gráficas para las distintas  $\beta$  de la velocidad de rotación iceo usando en teorema de reciprocidad para fluidos

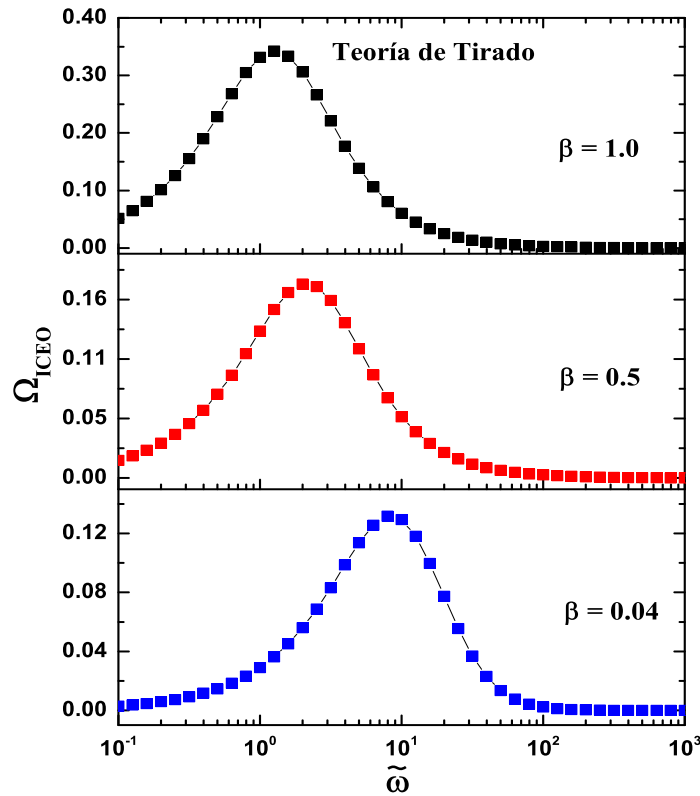


Figura 3.13: Gráficas para las distintas  $\beta$  de la velocidad de rotación iceo mediante la expresión de Tirado

### 3.3.4. Coeficiente de viscosidad

También es importante conocer el valor de el coeficiente de viscosidad  $\gamma$ , para cada uno de los betas,

$\beta$	$\gamma_{Recip.}$	$\gamma_{Tirado}$	$\gamma[1]$
0.04	3.184	3.23025	3.2295
0.5	17.919	17.5576	18.013
1.0	46.617	40.8662	48.064

Tabla 3.4: Coeficientes de viscosidad para las tres  $\beta$  obtenidos por medio del teorema de reciprocidad para toda la varilla, por medio de la expresión de Tirado y para un octavo de varilla.

En la tabla 3.4, se muestra la comparación del calculo del coeficiente de viscosi-

dad  $\gamma$  por medio de tres aproximaciones la primera corresponde a nuestros cálculos considerando toda la microvarilla y usando el teorema de reciprocidad la segunda corresponden al la expresión analítica obtenida por Tirado que es valida con varillas delgadas con  $\beta$  pequeña del orden de .04 mientras que  $\gamma$ , se refiere a los resultados obtenidos en la referencia [1] donde solo se toma en cuenta una octava parte de la microvarilla y también se usa el teorema de reciprocidad para fluidos, nuestros resultados concuerdan muy bien con aquellos obtenidos en la [1] mientras que los resultados de Tirado discrepan conforme  $\beta$  aumenta.

# Conclusión

En esta tesis se estudió la electrorotación de micro varillas metálicas inmersas en una solución electrolítica, bajo la acción de un campo eléctrico rotante producido por corriente alterna.

El estudio de la electrorotación presentado en este manuscrito fue basado en las expresiones (2.15) y (2.27) la primera se basó en la hipótesis de considerar al dipolo inducido sobre la microvarilla como un dipolo puntual, mientras que la segunda expresión es producto de aplicar el teorema de reciprocidad para fluidos.

Otra aportación relevante es la expresión para el coeficiente de viscosidad expresión (2.28), que es también producto del teorema de reciprocidad de fluidos y que es válida para cualquier valor de  $\beta$ .

Se encontró que la parte eléctrica provoca rotación en dirección opuesta al campo eléctrico aplicado y la contribución ICEO provoca rotación a favor del campo eléctrico, sin embargo, para el caso de  $\beta = 1.0$  ambas contribuciones hacen rotar a la micro partícula en dirección opuesta al campo eléctrico, este fenómeno es concordante con los resultados obtenidos en la referencia de (Flores, et. al. (2019)), siendo este aporte uno de los más importantes de esta tesis en el estudio de la electrorotación de nano varillas metálicas. Gracias al análisis de convergencia de los resultados derivados del estudio numérico donde se tienen dos parámetros relevantes la tolerancia relativa del resolvidor y el número de grados de libertad (mallado), se determinó que tanto las polarizabilidades A y B como el coeficiente de viscosidad  $\gamma$ , son sensibles a estos parámetros.

El estudio numérico que se presenta se realizó para tres valores de  $\beta$  que fueron 0.04, 0.5 y 1.0. Esto para contrastar los resultados de varillas delgadas y varillas no

delgadas (para estas ultimas no existen mediciones experimentales).

Debido a la simetría de las nanovarillas la polarizabilidad tiene dos componentes A y B, el máximo de la parte imaginaria de estos valores de polarizabilidad se corre hacia la izquierda conforme  $\beta$  crece. Además para varillas delgadas la razón entre la parte imaginaria de los valores máximos de B y A, es más cercana a cero conforme  $\beta$  es mas pequeña (ver tabla 3.3).

Finalmente un resultado importante es el calculo del coeficiente de viscosidad por medio de el teorema de reciprocidad para fluidos (2.11), mismo que es aplicable para todo tipo de varillas.

También señalamos que nuestros resultados numéricos considerando toda la geometría de la nanovarilla coinciden con los reportados por el artículo de (Flores, et. al. (2019)), donde se realizó el estudio numérico tomando en cuenta únicamente un octavo de la micro varilla y considerando argumentos de simetría. Desde luego que el analizar la varilla completa requirió contar con una máquina mas robusta que se realizó con el apoyo del proyecto VIEP 2019 aumentando la memoria de la computadora de escritorio a 32 Gb.



# Apéndice A



*División de Dinámica de Fluidos*

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

Agradece la asistencia y participación de:

**María F. Rojano Cacho**

Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas, BUAP

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

Del 5 al 8 de noviembre de 2019

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

**Dra. Rosanna Bonasia**

DDF – SMF

Presidente



## *División de Dinámica de Fluidos*

Ciudad de México. 9 de octubre de 2019

**María Fernanda Rojano Cacho**

**Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas, de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla**

**Presente**

Me es grato comunicarle que su trabajo cuyo título es:

**Estudio teórico y por simulación de la electro-rotación de nanovarillas metálicas inmersas en una Solución Electrolítica, usando el teorema de reciprocidad**

cuyos autores son:

M.F. Rojano Cacho (Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla)

J.E. Flores Mena (Facultad de Ciencias en Electrónica, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla)

E. Flores Flores (Preparatoria Emiliano Zapata Salazar, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla)

A.I. Nuñez Rojas (Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla)

M.M. Morín Castillo (Facultad de Ciencias en Electrónica, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla)

J.E.M. Gutiérrez Arias (Facultad de Ciencias en Electrónica, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla)

ha sido aceptado para su presentación oral en el XXV Congreso de la División de Dinámica de Fluidos de la Sociedad Mexicana de Física.

El congreso tendrá lugar en el Centro Cultural UNAM, Querétaro, del 5 al 8 de noviembre de 2019.

**Atentamente**

**Dra. Rosanna Bonasia**

**DDF – SMF**

**Presidente**

# Bibliografía

- [1] Flores-Mena, J., García-Sánchez, P., Ramos, A. (2019). Electrokinetics of metal cylinders. *Physical Review E*, 99(3). doi: 10.1103/physreve.99.032603 Robinson, R., Stokes, R. (2002). *Electrolyte solutions* (2nd ed.). Dover.
- [2] Shukla, V. C., Kuang, T., Senthilvelan, A., Higueta-Castro, N., Duarte-Sanmiguel, S., Ghadiali, S. N., Gallego-Perez, D. (2018). Lab-on-a-Chip Platforms for Biophysical Studies of Cancer with Single-Cell Resolution. *Trends in Biotechnology*, 36(5), 549–561. <https://doi.org/10.1016/j.tibtech.2018.02.007>
- [3] Young RO (2016) Colloids and Colloidal Systems in Human Health and Nutrition. *Int J Complement Alt Med* 3(6): 00095. DOI: 10.15406/ijcam.2016.03.00095
- [4] Quian S. and Ye Ai , *Surfactant Science Series Volume, Electrokinetic*
- [5] J. H. Masliyah and S. Bhattacharjee, *Electrokinetic and colloid Transport Phenomena* , 76 (2006) 603-613.
- [6] Foster, K. R., Sauer, F. A., Schwan, H. P. (1992). Electrorotation and levitation of cells and colloidal particles. *Biophysical Journal*, 63(1), 180–190. [https://doi.org/10.1016/s0006-3495\(92\)81588-6](https://doi.org/10.1016/s0006-3495(92)81588-6)
- [7] W.M Arnold and U. Zimmermann, *Journal Of Electrostatics*, Electro-rotation : Development of a technique for dielectric measurements on individual cells and particles(1988) 1-6.

- [8] Maier, H. (1997). Electrorotation of colloidal particles and cells depends on surface charge. *Biophysical Journal*, 73(3), 1617–1626. [https://doi.org/10.1016/s0006-3495\(97\)78193-1](https://doi.org/10.1016/s0006-3495(97)78193-1)
- [9] J. Baygents Electrokinetic effect on the dielectric response of colloidal particles: dielectrophoresis and electrorotation, 27 (1994) 777-794.
- Fernandez R. D.(2011). *Microfluidos: Nuevas Fronteras*. Departamento de Ingeniería Nuclear, Facultad de Ciencias y Tecnología Nuclear, Instituto Superior de Tecnología y Ciencias Aplicadas InSTEC. Cuba.
- [10] A. Ramos, P. Garcia Sanchez and H. Morgan, *Curr. Opin Colloid Interface Sci.*, 24 (2016) 307-318.
- [11] P. Garcia Sanchez, J.E. Flores Mena and A. Ramos, *Micromachines (MDPI)* , Modeling the AC Electrokinetic Behavior of Semiconducting Spheres, (2019) 1-6. doi:10.1109/EEEIC.2015.7165318
- [12] Plieth, W. (2008). Electrolytes. *Electrochemistry for Materials Science*, 1–26. <https://doi.org/10.1016/b978-044452792-9.50003-8>
- [13] Robinson, R., Stokes, R. (2002). *Electrolyte solutions* (2nd ed.). Dover.
- [14] Gilbert W.(1987). *Fisicoquímica* (2nd ed.). Pearson Addison Wesley
- [15] Masliyah, J. H., Bhattacharjee, S. (2006). *Electrokinetic and Colloid Transport Phenomena*. Hoboken, NJ, United States: Wiley.
- [16] Everett, D., Sankey, O. (2007). *Basic principles of colloid science*. Cambridge: Royal Society of Chemistry.
- [17] The Colloidal State. (2012). *Enological Chemistry*, 303–321. <https://doi.org/10.1016/b978-0-12-388438-1.00018-2>
- [18] Elaissari, A. (2008). *Colloidal Nanoparticles in Biotechnology*. Hoboken, NJ, United States: Wiley.

- [19] | MICROFLUIDOS: NUEVAS FRONTERAS
- [20] | Hiemenz, P. C., Rajagopalan, R. (1997). Principles of Colloid and Surface Chemistry, Revised and Expanded (UNDERGRADUATE CHEMISTRY SERIES) (3rd ed.). new york, new york : CRC Press.
- [21] Cosgrove, T. (2010). Colloid Science. Hoboken, NJ, United States: Wiley.
- [22] Katz, J. (2010). Introductory Fluid Mechanics (1st ed.). new york, united states: Cambridge University Press.
- [23] Yunus, C. (2012). MECANICA DE FLUIDOS FUNDAMENTOS Y APLICACIONES (Spanish Edition) (1st ed.). Mexico, Mexico: McGraw-Hill Interamericana de España S.L.
- [24] M. M. Tirado, C. L. Martínez, and J. G. de la Torre, J. Chem. Phys. 81, 2047 (1984).
- [24] Dokos, S. (2017). Modelling Organs, Tissues, Cells and Devices: Using MATLAB and COMSOL Multiphysics (Lecture Notes in Bioengineering) (1st ed. 2017 ed.). berlin, Alemania: Springer.
- [25] McQuarrie, D. A. (2000). Statistical Mechanics (2nd ed.). University Science Books.