



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA
MAESTRIA INGENIERIA QUIMICA (PROCESOS)

**DESARROLLO DE UN MODELO PARA LA DESCRIPCIÓN DEL FLUJO
DE UN FLUIDO NO NEWTONIANO EN MICROCANALES DE PAREDES
ELÁSTICAS**

T E S I S
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
MAESTRO EN INGENIERÍA QUÍMICA (PROCESOS)

PRESENTA:
IIQ. ALEJANDRO RUBIO MARTÍNEZ

TUTOR:
DR. ÁNGEL ENRIQUE CHÁVEZ CASTELLANOS,
FACULTAD DE QUÍMICA DE LA UNAM

MÉXICO, D. F. MAYO 2014



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

JURADO ASIGNADO:

Presidente: Dr. Rafael Herrera Nájera (FQ)

Secretario: Dr. Eligio Pastor Rivero Martínez (FES C)

Vocal: Dr. Juan Pablo Aguayo Vallejo (UATlax)

1^{er.} Suplente: Dr. Máximo Pliego Díaz (ITQro)

2^{d o.} Suplente: Dr. Ángel Enrique Chávez Castellanos (FQ)

Lugar o lugares donde se realizó la tesis: Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Química, Departamento de Ingeniería Química, Conjunto E.

TUTOR DE TESIS:

Dr. Ángel Enrique Chávez Castellanos

FIRMA

DEDICATORIAS Y AGRADECIMIENTOS

Este trabajo se lo dedico a mi padre Fidel y a la memoria de mi madre Margarita; por su apoyo incondicional que me brindaron, por que la base de mis logros siempre ha estado en ustedes, pero sobre todo por que con su gran amor y ejemplo me han dado una vida plena y feliz.

A Angélica, por todos los momentos compartidos, el amor y el apoyo brindados, pero sobre todo por ser mi acompañante y cómplice de toda la vida.

A mi dos grandes tesoros, Leonardo y Daniela (la niña de mis ojos).

Dedico especialmente este trabajo a la memoria de mi tío Gilberto

A Mi Hermano Marco Antonio, mi Cuñada Lucero y a mis sobrinos, por todo su apoyo y comprensión, por lo que hemos compartidos juntos y por que estoy seguro que siempre estaremos unidos para vencer cualquier adversidad.

Al Dr. Ángel Enrique Chávez Castellanos, por haberme enseñado que, el arte de la enseñanza es poder comunicar a los alumnos la necesidad de aprender, y que la motivación es el producto de una buena enseñanza, no su prerrequisito.

Gracias Maestro pero sobre todo gracias amigo.

Agradezco al Dr. Rafael Herrera Nájera por su aportación a este trabajo

A mis amigos

Jesús Celis (paisano), Carlos Tomas y Susana por su amistad y apoyo.

A Max y Martín, por su amistad, motivación y valiosos consejos para concluir con este trabajo.

A la **Facultad de Química** de la **UNAM** por darme la oportunidad y orgullo de pertenecer a ella y de desarrollarme en todos los aspectos de mi vida.

Agradezco al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología **CONACYT** por el apoyo para la obtención del grado de Maestro mediante la Beca otorgada en el periodo de 1989 a 1990.

RESUMEN

En este trabajo se analiza, mediante el modelado matemático basado en técnicas de fenómenos de transporte, ecuaciones diferenciales parciales, órdenes de magnitud y aproximaciones de lubricación, los mecanismos de transporte que están involucrados en el proceso de la transferencia de cantidad de movimiento en un fluido newtoniano, debido a la deformación de la pared elástica del microcanal rectangular y se compara frente al comportamiento de un fluido ley de la potencia. Se encontraron relaciones geométricas, a partir de aproximaciones de lubricación entre los mecanismos de transporte participantes; esto con el fin de establecer casos límite y por último se propone un método de solución aplicando las aproximaciones de lubricación que permitan describir y analizar el proceso, así como, establecer las bases cualitativas que permitan analizar los resultados de modelos más complejos, que generalmente requieren de métodos numéricos debido a su naturaleza no lineal.

ABSTRACT

In this work it is analyzed by mathematical modeling techniques based on transport phenomena, partial differential equations, orders of magnitude and approximations of lubrication, transport mechanisms that are involved in the process of transfer of momentum in a Newtonian fluid due to deformation of the elastic wall of the rectangular microchannel, and results are compared against the behavior of a power law fluid, moreover geometric approximations from lubrication theory were found between the transport mechanisms and wall deformation; that was done to establish boundary cases. Finally, a solution method based on the lubrication approximation is used to describe and analyze the process. It is necessary to establish qualitative foundations to analyze the results of more complex models, which generally require numerical methods due to its nonlinear nature.

"Las cosas no se dicen, se hacen, porque al hacerlas se dicen solas"

Woody Allen

ÍNDICE

RESUMEN	<i>i</i>
ABSTRACT	<i>ii</i>
ÍNDICE	7
ÍNDICE DE FIGURAS	9
NOMENCLATURA	11
I. OBJETIVOS Y ESTRUCTURA DEL TRABAJO	12
II. INTRODUCCIÓN	14
Microfluidos	14
Partículas de Polímero	15
Procesos de Síntesis de Partículas	17
III. SISTEMAS ANALIZADOS	24
Geometría del Canal	25
IV. PLANTAMIENTO DEL PROBLEMA	27
Modelado de la Elasticidad del PDMS	27
Modelado del Flujo de Fluido	28
Ecuación de Continuidad	28
Ecuaciones de Balance de Cantidad de Movimiento	30
V. PROPUETA DE SOLUCIÓN	35
Acoplamiento Entre la Pared Elástica y el Flujo	38
VI. RESULTADOS Y ANÁLISIS	42
VII. CONCLUSIONES	55
VIII. TRABAJO FUTURO	59
IX. REFERENCIAS	60

APÉNDICE A. Deducción de las expresiones para la descripción de un fluido ley de la potencia y del caso particular $n=1$ en un microcanal con pared elástica	63
APÉNDICE B. Solución aproximada para un fluido ley de la potencia n y cuando $n=1$ (fluido newtoniano)	64
APÉNDICE C. Características del fluido ley de la potencia	65

ÍNDICE DE FIGURAS

FIGURA	PÁGINA
Figura 2.1 crecimiento de los trabajos publicados en el área de microfluidos.	16
Figura 2.2 partículas sólidas y esféricas de polímero.	16
Figura 2.3 esquema de un proceso de fotolitografía suave.	18
Figura 2.4 proceso de Litografía de Flujo Continuo (CFL).	19
Figura 2.5 proceso de Litografía de Flujo Intermitente (SFL).	21
Figura 2.6 representación esquemática de la deformación del microcanal rectangular bajo el efecto de un flujo dado.	23
Figura 3.1 representación esquemática del canal deformado baja un flujo dado.	26
Figura 6.1 dependencia del tiempo de respuesta τ al ancho del canal, manteniendo constante la presión a 3psi, el largo del canal a 1 cm y lo alto del canal a 20 μ m.	43
Figura 6.2 dependencia del tiempo de respuesta τ a la altura del canal, manteniendo constante la presión a 3psi, el largo del canal a 1 cm y el ancho a 200 μ m.	44
Figura 6.3 dependencia del tiempo de respuesta τ con la longitud del canal, manteniendo constante la presión a 3psi, lo alto del canal a 10 μ m y el ancho a 200 μ m.	45
Figura 6.4 dependencia del tiempo de respuesta τ con la presión aplicada al fluido $n=1$ a la entrada del canal, manteniendo constante, lo alto, ancho y la longitud del canal a 10 μ m, 200 μ m y 1 cm respectivamente a distintas presiones sin sobrepasar las 15 psi, presión a la cual la deformación del canal es comparable a la altura del canal $P \sim \frac{EH}{W}$.	47
Figura 6.5 dependencia del tiempo de respuesta τ en función la presión aplicada al fluido $n=1.2$ a la entrada del canal predicha por el modelo.	47
Figura 6.6 dependencia del tiempo de respuesta τ en función de la presión aplicada al fluido $n=0.716$ a la entrada del canal predicha por el modelo.	48
Figura 6.7 dependencia del tiempo de respuesta τ en función de la presión aplicada al fluido $n=0.554$ a la entrada del canal predicho por el modelo.	48
Figura 6.8 variación del tiempo de respuesta por cada unidad de presión incrementada.	49

Figura 6.9 dependencia del tiempo de respuesta en función de la relación $\frac{W}{H}$	50
Figura 6.10 relación entre el tiempo de respuesta y el orden potencial del fluido	50
Figura 6.11 relación entre el incremento de la altura adimensional θ del canal debido a la presión aplicada a la entrada del canal en función de la longitud del canal adimensional ε , para un fluido newtoniano a dos tiempos de respuesta $t=0.01$ s y $t=0.1$ s y dos relaciones $\frac{W}{H}$; 2.5, 10.	52
Figura 6.12 relación entre el incremento de la altura adimensional θ del canal debido a la presión aplicada a la entrada del canal en función de la longitud del canal adimensional ε , para un fluido pseudoplástico $n=0.716$ a dos tiempos de respuesta $t=0.01$ s y $t=0.1$ s y dos relaciones $\frac{W}{H}$; 2.5, 10.	52
Figura 6.13 relación entre el incremento de la altura adimensional θ del canal debido a la presión aplicada a la entrada del canal en función de la longitud del canal adimensional ε , para un fluido pseudoplástico $n=0.554$ a dos tiempos de respuesta $t=0.01$ s y $t=0.1$ s y dos relaciones $\frac{W}{H}$; 2.5, 10.	53
Figura 6.14 relación entre el incremento de la altura adimensional θ del canal debido a la presión aplicada a la entrada del canal en función de la longitud del canal adimensional ε , para un fluido dilatante $n=1.2$ a dos tiempos de respuesta $t=0.01$ s y $t=0.1$ s y dos relaciones $\frac{W}{H}$; 2.5, 10.	53
Figura 6.15 altura máxima a la cual el canal se deforma debido a la presión aplicada a la entrada del canal, para un fluido newtoniano, pseudoplástico $n=0.716$, pseudoplástico $n=0.554$ y dilatante $n=1.2$ a dos tiempos de respuesta $t=0.01$ s y $t=0.1$ s y dos relaciones $\frac{W}{H}$; 2.5, 10.	54

NOMENCLATURA

Abreviaturas

CF	Condición a la frontera
CFL	Litografía de Flujo Continuo
SFL	Litografía de Flujo Intermitente
PDMS	Polidimetilsiloxano
UV	Luz ultravioleta

Letras romanas

v	Campo de velocidades (cm s^{-1})
$\underline{\underline{\mathbf{T}}}$	Tensor de esfuerzos (Mpa)
E	Módulo de Young (MPa)
H	Alto del canal (μm)
$h(x)$	Variación de la altura en función de la longitud (μm)
K	Constante del fluido la ley de la potencia ($\frac{\text{Dinas} * \text{s}^n}{\text{cm}^2}$)
L	Longitud del canal (cm)
N	Potencia del fluido ley de la potencia
P	Presión (MPa)
P_0	Presión a la entrada del canal (MPa)
P_{atm}	Presión atmosférica (a la salida del canal) (MPa)
Q	$\frac{n+1}{n}$ (adimensional)
Re	Número de Reynolds
T	Tiempo (s)
W	Ancho del canal (μm)
X	Coordenada de la dirección del flujo
Z	Coordenada de la altura del canal

Letras griegas

Ξ	Deformación
Σ	Esfuerzo
μ	Viscosidad dinámica (MPa)
ρ	Densidad del oligómero (cm^3/g)
ε	Coordenada adimensional ($\frac{x}{L}$)
Θ	Relación adimensional ($\frac{h(x)}{H}$)
∇	Gradiente (cm^{-1})
τ_r	Tiempo de respuesta del dispositivo (s)
τ_{zx}	Esfuerzo de corte (Pa)
Ω	Relación adimensional ($\frac{P}{E}$)

I OBJETIVOS Y ESTRUCTURA DEL TRABAJO

El trabajo, en su estructura, está compuesto por las siguientes secciones: en el capítulo I “Objetivos y Estructura del Trabajo”, que es la presente sección, se subrayan los alcances, objetivos y conformación del trabajo. En el capítulo II, “Introducción”, se hace una descripción de la técnica de litografía en la formación de micropartículas de polímero. En el capítulo III “Sistema Analizado” se analiza la geometría y el efecto de la pared elástica en el proceso de Litografía de Flujo Intermitente. El capítulo IV “Planteamiento del Problema”, se presenta el análisis de las ecuaciones de balance de masa y cantidad de movimiento acoplada a la de la deformación de la pared superior del micro canal. En el capítulo V, “Propuesta de solución” se enumeran las suposiciones fundamentales que sirven para generar el modelo que describe el sistema considerado. Se plantea una alternativa de solución con técnicas de fenómenos de transporte (Aproximaciones de lubricación y análisis de orden de magnitud), que permite la solución analítica del problema. Los resultados y su análisis se exponen en el capítulo VI “Resultados y análisis”, donde se hace énfasis en el rol de la naturaleza del fluido ley de la potencia en el tiempo de respuesta del dispositivo. En el capítulo VII “Conclusiones” se da respuesta a los objetivos del trabajo y se puntualizan los hallazgos obtenidos, por último en el capítulo VIII “Trabajo Futuro” se proponen puntos a atacar en etapas posteriores de la presente investigación.

El objetivo de este trabajo es analizar mediante el modelado matemático basado en técnicas de fenómenos de transporte, ecuaciones diferenciales parciales, órdenes de magnitud y aproximaciones de lubricación, los mecanismos de transporte que están

involucrados en el proceso de la deformación de la pared superior elástica de un micro canal rectangular.

El mecanismo de transporte que se presenta en este proceso es principalmente la transferencia de cantidad de movimiento debido a la deformación de la pared elástica del microcanal rectangular.

Este trabajo se enfoca al tratamiento de un proceso isotérmico, de manera que sólo se considera la ecuación de continuidad y de cantidad de movimiento, por lo que se pretende:

- Analizar el comportamiento de un fluido ley de la potencia frente a uno newtoniano en un microcanal rectangular con la pared superior elástica.
- Encontrar relaciones geométricas, a partir de aproximaciones de lubricación, entre los mecanismos de transporte participantes; esto con el fin de establecer casos límite.
- Proponer un método de solución aplicando las aproximaciones de lubricación que permitan describir y analizar el proceso, y establecer las bases cualitativas que permitan analizar los resultados de modelos más complejos, que generalmente requieren de métodos numéricos debido a su naturaleza no lineal.

II INTRODUCCIÓN

MICROFLUIDOS

Las micropartículas poliméricas y coloidales están encontrando cada vez más utilidad en diversas aplicaciones, tanto en aplicaciones tradicionales¹, como; pinturas, revestimientos y columnas de separación, así como, más recientemente en dispositivos ópticos², sistemas de liberación controlada de fármacos³ y sistemas de diagnóstico de enfermedades⁴, por lo que la investigación en microfluidos y tecnologías basadas en microfluidos ha crecido exponencialmente desde la década pasada como lo muestra la figura 2.1.

El estudio de los **microfluidos** es un campo multidisciplinario que comprende partes de la Física, la Química, la Ingeniería y la Biotecnología. Estudia el comportamiento de los fluidos en la microescala y la mesoescala. El comportamiento de los fluidos en la microescala difiere sustancialmente de lo observado en la macroescala. La tensión superficial y la disipación de la energía son completamente diferentes. En microcanales de 10 a 500 nanómetros de diámetro el número de Reynolds es extremadamente bajo; típicamente es de tan solo unas décimas. Por lo tanto, el fluido es siempre laminar y no ocurren turbulencias; sólo la difusión interviene en la mezcla de fluidos.

También comprende el diseño de sistemas en los que diminutas cantidades de fluido serán utilizadas y su importancia se debe a que los dispositivos se pueden fabricar en forma económica, rápida y son muy útiles en los procesos de formación de micropartículas⁵. La historia de los microfluidos se remonta al desarrollo de mecanismos para el entretenimiento, en particular juguetes; sin embargo la necesidad de desarrollar sistemas

automatizados para procesos físicos, químicos y análisis de los biológicos ha provocado un rápido crecimiento de esta área. Mientras que la aplicación de esta técnica se ha enfocado en el control y miniaturización de los procesos, ha surgido una nueva tecnología llamada litografía de flujo intermitente empleada en la producción de geometrías más complejas^{6, 7}.

PARTÍCULAS DE POLÍMERO

Las micropartículas de polímero que son utilizadas en aplicaciones nano y micro, en la mayoría de los casos, son esferas sólidas y varían de 10 nm a 1mm de diámetro⁸ figura 2.2. Sin embargo las partículas con formas no esféricas y con propiedades anisotrópicas determinadas prometen el desarrollo emergente de una de nuevas serie de tecnologías como: la síntesis de cristales fotónicos², y microlaboratorios multidagnóstico para el control de enfermedades^{9, 10}.

Sin embargo, la síntesis de dichas partículas no es fácil, ya que los procesos de polimerización en emulsión y polimerización en suspensión, basados en enfoques tradicionales utilizados para la síntesis de partículas poliméricas, no ofrecen el control de la morfología y anisotropía que es esencial para el diseño de partículas con formas no esféricas. El proceso ideal para la síntesis de tales partículas complejas debería producir grandes cantidades de partículas monodispersas de formas y propiedades anisotrópicas predeterminadas. Además, el proceso debe permitir el uso de materiales funcionalizables y biocompatibles de acuerdo a la necesidad de la aplicación.

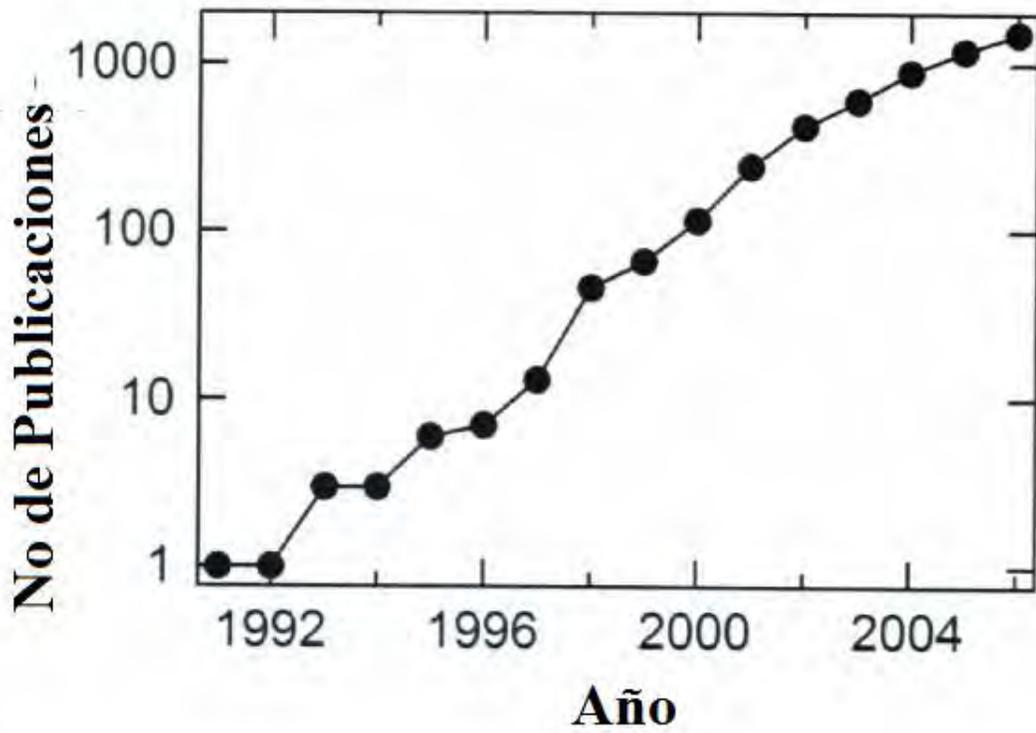


Figura 2.1 crecimiento de los trabajos publicados en el área de microfluidos. Información obtenida al usar la palabra clave “microfluidic” en ISI Web of Science¹¹.

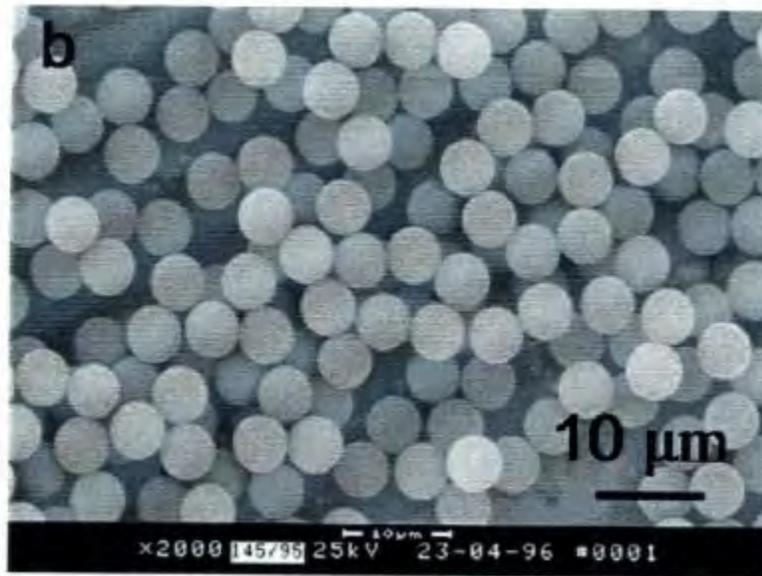


Figura 2.2 partículas sólidas y esféricas de polímero¹²

PROCESOS DE SÍNTESIS DE MICROPARTÍCULAS

En los últimos años, varios procesos de síntesis de partículas enfocados en microfluidos se han reportado en la literatura¹³. Estos métodos consisten en la convergencia del flujo de dos sustancias con distintas fases, en dispositivos de síntesis; por lo general estos dispositivos son tubos cilíndricos en forma de T^{14, 15} u otras geometrías convergentes¹⁶, que permiten la formación de un gran número de gotitas monodispersas^{17, 18}, de un monómero precursor del polímero deseado; después las gotitas se polimerizan utilizando luz o energía térmica, con lo cual se forman las gotitas sólidas de polímero^{19, 20}.

No obstante, estos métodos están muy limitados en cuanto a las morfologías que se pueden obtener; por lo general esferas o deformaciones de éstas: discos^{21, 22}, medias esferas, esferas núcleo coraza⁷ y obloides^{23, 24}.

La fotolitografía suave es una técnica que ofrece una ruta de síntesis muy prometedora para la obtención de partículas no esféricas, debido a la capacidad de utilizar fotoplantillas para definir con precisión la forma; primero se crea una plantilla patrón de silicón utilizando radiación ultra violeta visible UV, después se añade a la plantilla el Polidimetilsiloxano PDMS en forma líquida y se cura a altas temperaturas, una vez curado se desmolda y puede ser usado como dispositivo microfluídicos por varias veces²⁵ figura 2.3.

Una propiedad inherente de la fotolitografía suave, que la diferencia de los procesos clásicos en la fabricación de dispositivos basados en silicón o vidrio, es su gran procesabilidad.

Sin embargo, la litografía suave tiene una limitante importante, debido a que el proceso de síntesis es por lotes y produce un rendimiento bajo de partículas.

Además, la creación de partículas anisotrópicas utilizando fotolitografía requiere varios pasos complicados de alineación del molde y técnicas de protección del polímero con el que se crean las micropartículas, que son difíciles de realizar y controlar para obtener un alto rendimiento.

Recientemente, se ha empleado una técnica que combina las ventajas de los microfluidos y la proyección de la litografía suave para proponer un nuevo método de síntesis de partículas poliméricas llamado litografía de flujo continuo (continuous flow lithography, CFL) ²⁶ figura 2.4. Esta técnica aprovecha la alta resolución de síntesis y control de forma intrínseca en la litografía con el procesamiento continuo que presenta el flujo laminar de los dispositivos de los microfluidos, lo que permite sintetizar con éxito un gran número de partículas monodispersas con formas complejas y propiedades anisotrópicas predeterminadas.

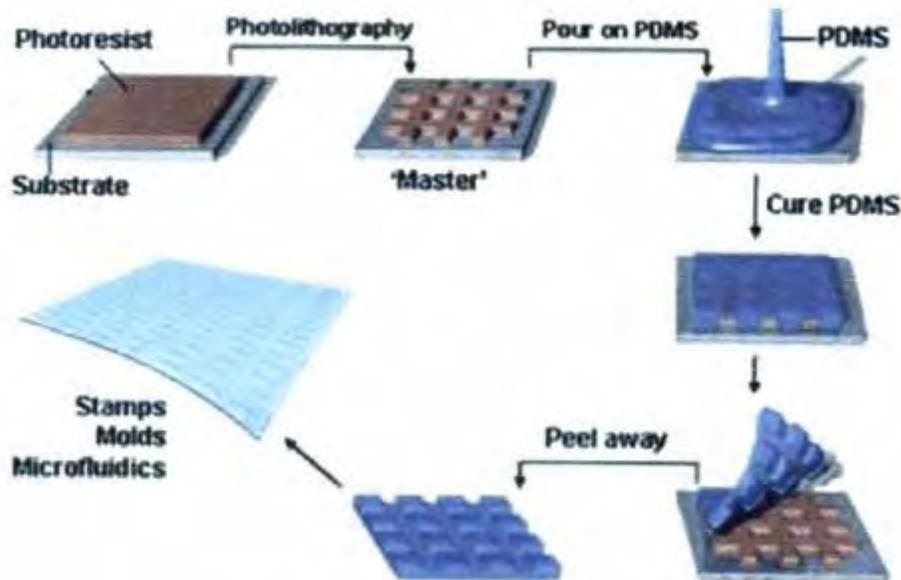


Figura 2.3 esquema de un proceso de fotolitografía suave²⁵.

En el proceso CFL, se emplean pulsos de entre 30 y 100 ms de luz UV para un flujo de oligómero a través de la plantilla, definida por la forma del microcanal hecho de polidimetilsiloxano PDMS. Las porciones expuestas del oligómero a la luz UV son reticuladas, lo que conduce a la formación instantánea de estructuras sólidas de polímero. Las estructuras que se forman son capaces de avanzar a través del flujo de oligómero no polimerizado que las rodea, debido a la inhibición inducida²⁷ por el oxígeno de la superficie del PDMS, como se explica enseguida.

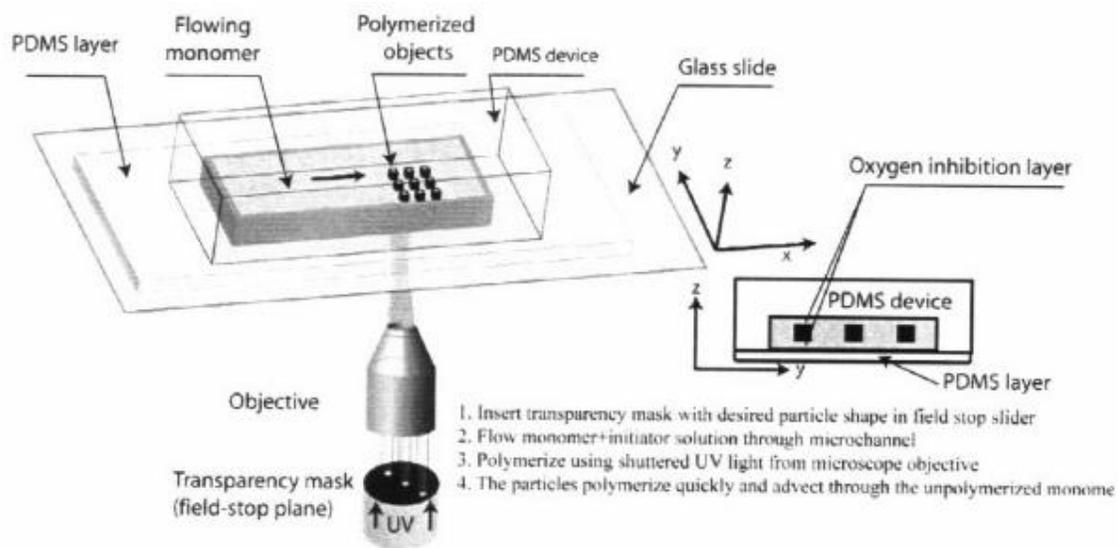


Figura 2.4 proceso de Litografía de Flujo Continuo (CFL) ²⁶.

Durante el proceso de polimerización el oxígeno se difunde a través de las paredes porosas de PDMS y reacciona con los radicales libres de la reacción, lo que produce especies de peróxido que inhiben la polimerización. Esto da como resultado la formación de una delgada capa lubricante de oligómero no reticulada cerca de las paredes PDMS que permite que el flujo de las partículas de polímero pase por las paredes del dispositivo sin adherirse; sin embargo, el oligómero se adsorbe en las partículas de polímero cuando se emplean grandes flujos volumétricos de oligómero, lo que provoca la producción de

partículas con formas no bien definidas a totalmente amorfas. A fin de lograr una mejor resolución, hay que encontrar el límite máximo del flujo volumétrico que puede ser utilizado.

Esto impone restricciones al rendimiento de la formación de las partículas que se puede alcanzar, y el problema se acentúa cuando el tamaño de partícula se reduce, no obstante existe una gran necesidad para la síntesis de partículas complejas de tamaño reducido necesario para aplicaciones tales como la liberación controlada de fármacos⁸.

Las limitaciones del CFL provienen del flujo de oligómero en el canal y no del tiempo de exposición a la radiación UV. Estas limitaciones se pueden subsanar si se emplean longitudes de onda debajo de los 400 nm, pulsos de entre 30 y 100 ms y un flujo a régimen permanente o intermitente, lo que mejora las condiciones de morfología y cantidad de partículas.

En la actualidad se han explorado nuevas técnicas que permiten obtener una buena resolución de partícula sin menoscabo de la cantidad de las mismas. Una de estas tecnologías es la litografía de flujo intermitente, llamada (stop-flow lithography, SFL). Este procedimiento consiste en la formación de las partículas en medio de dos capas estacionarias de monómero dentro del microcanal de PDMS, antes de ser expulsado de él, repitiéndose este proceso en forma cíclica figura 2.5; una computadora controla el flujo intermitente de oligómero a través de una válvula solenoide de 3 vías, cuando esta se cierra la presión dentro del microcanal se iguala a la presión atmosférica lo que permite que el fluido de oligómero tenga el suficiente tiempo de residencia dentro de la plantilla de PDMS, de tal modo que la exposición a la fuente de UV sea la adecuada para polimerizar el oligómero y así formar las micropartícula. Cuando se abre la válvula, el fluido se expone a un pulso de presión que permite la expulsión de las micropartículas formadas.

La eficiencia del SFL tiene que ver, en gran medida, con la respuesta del sistema del micro flujo a cambios de presión, que permitan tener un control en la frecuencia entre los flujos de cada ciclo. Una de las maneras de lograr esto es empleando equipos a base de pulsos de aire comprimido en lugar de bombas de embolo, ya que esto permite tener menores tiempos de respuesta al pulso, sin embargo el tiempo de respuesta no es instantáneo, debido a la deformación provocada por la presión del pulso de aire en las paredes del microcanal de elastómero de PDMS.

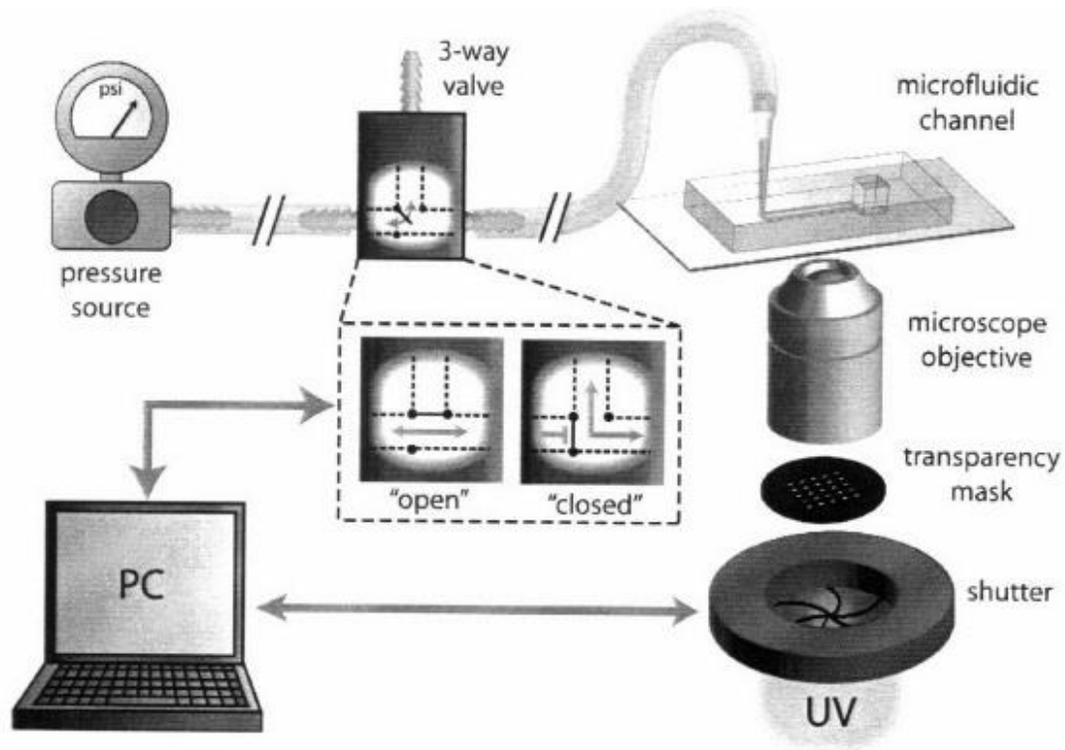


Figura 2.5 proceso de Litografía de Flujo Intermitente (SFL) ²⁸.

Debido a que el PDMS se emplea cada vez se más en la construcción de las paredes de microcanales, se hace necesario estudiar el efecto de la deformación de éstas en el patrón de flujo del monómero figura 2.6. En el inciso A se muestra la sección transversal normal del

canal a la dirección del flujo; se puede observar que al pasar un flujo a través del canal la presión se incrementa lo que provoca un incremento en el área transversal y en el B la sección transversal longitudinal del canal paralelo a la dirección del flujo; la deformación del canal en la dirección longitudinal del canal decrece debido a que la presión también decrece hasta alcanzar la presión a la salida del canal, lo que provoca una aceleración del fluido debido a que el área de la sección transversal del canal también decrece.

El efecto de la deformación de las paredes de un microcanal rectangular que aparece en condiciones de estado estacionario, sobre el perfil de flujo de monómero se ha estudiado ampliamente²⁹, no obstante el comportamiento dinámico de las paredes y la geometría del microcanal de elastómero PDMS ante un pulso de presión externa sobre el perfil de flujo del monómero no ha sido estudiado de manera amplia, siendo de gran importancia conocer en un proceso cíclico su comportamiento, así como el tiempo necesario para alcanzar el estado estacionario en el intervalo del ciclo completo.

Ya que el polidimetilsiloxano (PDMS) es el material más empleado en la fabricación de estos dispositivos, debido a su bajo costo, transparencia y biocompatibilidad³⁰, y que puede ser fácilmente moldeado debido a que tiene una cedencia muy baja lo que permite deformaciones a escala manométrica, permitiendo la construcción de nanocanales³¹, nanodispositivos en los que se requiere de un control de la geometría e impresión de microcontactos estampados³², se hace necesario conocer sus propiedades reológicas.

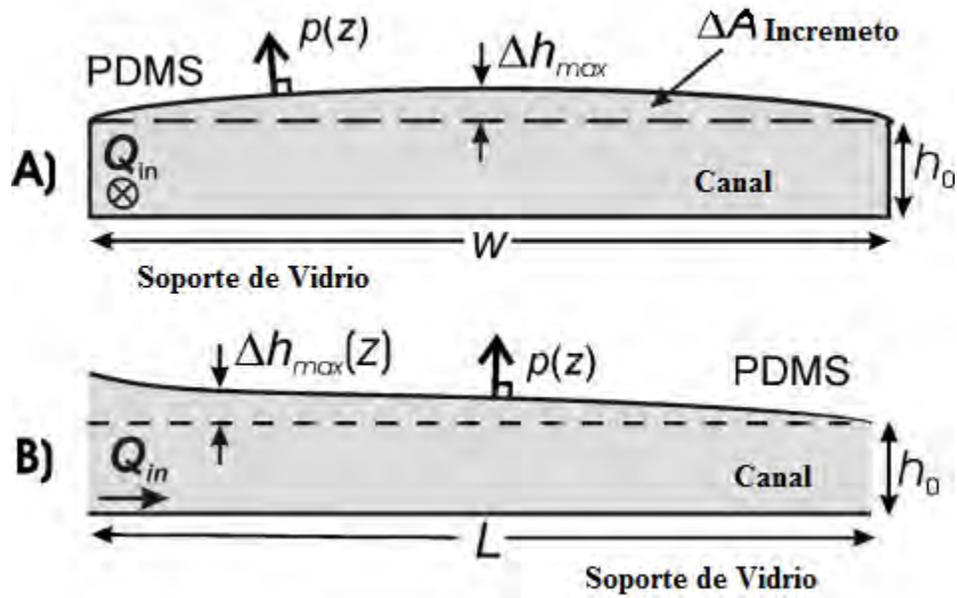


Figura 2.6 representación esquemática de la deformación del microcanal rectangular bajo el efecto de un flujo dado. A) corte transversal y, B) corte longitudinal del microcanal.

Las propiedades de volumen del PDMS se caracterizan por un bajo módulo de Young E (en un intervalo de 0,5 a 4 MPa, dependiendo de las condiciones de reticulado) y un alto coeficiente de Poisson ($\nu = 0,5$, es decir, esencialmente incompresible), características típicas de un material elástico³³.

III SISTEMA ANALIZADO

En los dispositivos microfluídicos, se utilizan principalmente bombas de jeringa que producen flujos debido a la compresión del fluido por parte del embolo de la jeringa y al inyectar el fluido con la aguja al dispositivo se provocan transiciones en el flujo del fluido que pueden ser de varios minutos para el caso de sistemas a escala micrométrica³⁴. Debido a este efecto, en aplicaciones donde una respuesta dinámica rápida es deseada, es preferible usar aire comprimido para inyectar los fluidos en los dispositivos³⁵.

Aunque los dispositivos de generación de flujos por medio de aire comprimido eliminan la transición debida al gradiente de presión pulsátil en el tubo externo de alimentación al dispositivo que se producen en los de jeringa, se siguen presentando transiciones finitas asociadas a la deformación de las paredes del dispositivo de PDMS.

En el proceso de litografía de flujo intermitente SFL, se identifican tres etapas que se repiten de manera cíclica; interrupción del flujo, polimerización y flujo. En la primera etapa, la presión de impulso del flujo de oligómero a través del dispositivo se detiene pasando de una presión de entrada especificada por el pulso del dispositivo de aire comprimido a la presión atmosférica mediante la válvula de solenoide de 3-vías como se indica en la figura 2.5. El flujo tiene un tiempo finito para detenerse y está en función del tiempo en que el canal de PDMS se retrae para pasar de su estado deformado al de sección transversal rectangular sin deformar, apretando el fluido fuera del dispositivo. En el segundo paso, un conjunto de partículas de oligómero se polimeriza en el paro de flujo, usando luz UV mediante la apertura breve del obturador de la lámpara (0,03-0,1 s). En el

tercer paso, la partícula matriz se hace fluir al abrir la válvula 3-vías y pasar de la presión atmosférica a la presión de entrada especificada.

Tres tiempos (o escala de tiempo) característicos del proceso pueden ser especificados: El tiempo requerido para detener el flujo ($t_{\text{alto}} > t_r$ (tiempo de respuesta de la pared)), el tiempo requerido para iniciar la polimerización de las partículas ($t_{\text{obturación}}$) y el tiempo requerido para sacar las partículas (t_{flujo}). Mientras $t_{\text{obturación}}$ y t_{flujo} se determinan fácilmente, t_{alto} sólo se puede determinar después de la primera estimación t_r que sirve como una cota inferior para t_{alto} .

Geometría del canal

La pared del piso del microcanal está hecha de un vidrio recubierto de una película muy delgada de PDMS con un módulo de $E=62$ Gpa, mientras que el techo es de PDMS $E= 1$ Mpa de varios milímetros de espesor, por lo que la deformación que puede sufrir el piso del canal con respecto al techo puede ser despreciable en la figura 3.1 se puede observar un esquema del corte transversal del canal rectangular deformado después de un pulso de presión. El flujo entra de derecha a izquierda y se nota que la máxima deformación del canal se encuentra a la entrada la cual va disminuyendo en forma gradual hasta que a la salida es despreciable.

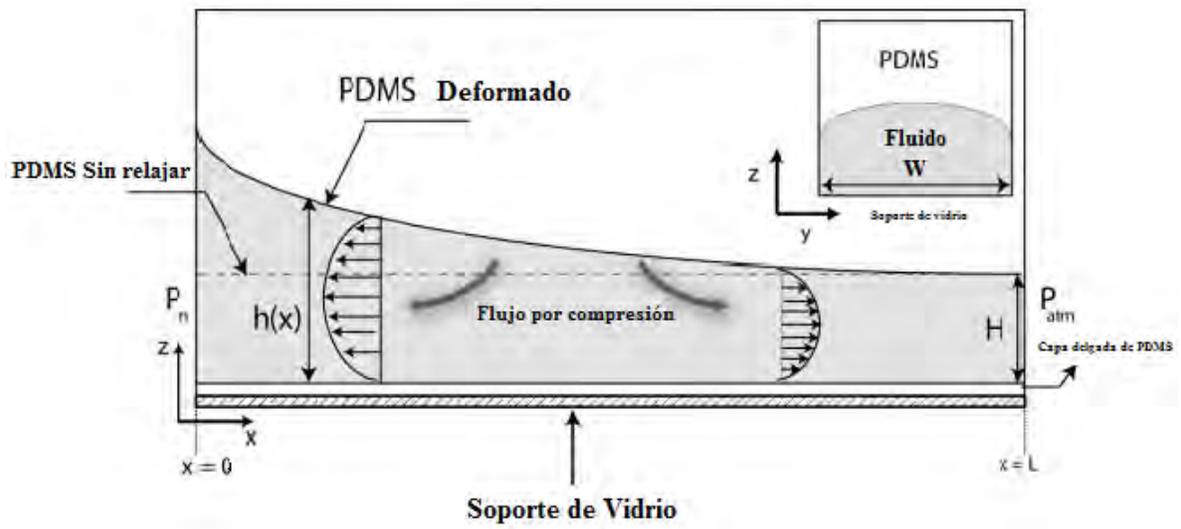


Figura 3.1 Representación esquemática del canal deformado bajo un flujo dado.

IV PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

Cualquier proceso natural o creado por el hombre respeta los principios de conservación. Los enunciados matemáticos de estos principios son: las ecuaciones de conservación de masa (ecuación de continuidad), de cantidad de movimiento lineal (ecuación de Cauchy) y de energía (primera ley de la termodinámica). Tomando como base la descripción del sistema en el capítulo anterior, en esta parte del trabajo se presenta la descripción del problema primeramente, y luego la estrategia que se siguió para modelarlo a partir de la ecuación constitutiva de la ley de la potencia, la interacción entre el flujo del elastómero y la elasticidad de la pared del microcanal. Primero se inicia con la descripción de la geometría del canal (capítulo III) y se procede a modelar separadamente la deformación del microcanal de PDMS y el flujo lubricado creado por el flujo del oligómero a través del dispositivo.

Una vez que están perfectamente descritos el flujo del oligómero y la elasticidad del microcanal, se acoplan los modelos para describir el flujo por compresión que determina cómo el dispositivo de PDMS responde rápidamente a los cambios en la presión externa.

Modelado de la Elasticidad del PDMS

Se supone que la ley de Hooke se puede emplear para describir la relación esfuerzo-deformación del techo del canal de PDMS dada por: $\xi = \frac{\sigma}{E}$, donde ξ es la deformación, σ es el esfuerzo aplicado para conseguir dicha deformación y E es el módulo de Young del PDMS²⁹. El esfuerzo experimentado por el dispositivo es proporcional a la presión externa aplicada.

Modelado del Flujo de Fluidos

Los balances considerados son:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \underline{v} = 0 \quad 4.1$$

$$\rho \frac{\partial \underline{v}}{\partial t} + \rho \underline{v} \cdot \nabla \underline{v} = \nabla \cdot \mathbf{T} + \rho \underline{g} \quad 4.2$$

Las ecuaciones 4.1 y 4.2 son generales y se aplican a cualquier fluido en flujo laminar e isotérmico. Para particularizar el fluido en cuestión se especifica una ecuación constitutiva; en este caso, se utilizó la ley de la potencia para relacionar los esfuerzos que manifiesta el material con las deformaciones a las que es sometido.

También se debe puntualizar las variables de pendientes y su funcionalidad con respecto a las variables independientes. Las variables dependientes son: la velocidad del fluido \underline{v} y la presión P. Las variables independientes son: el tiempo t, la dirección del espacio en donde se presenta el gradiente de velocidad x, z y y que es la dirección neutra, lo que significa que de acuerdo a el patrón de flujo presente en el canal no existe flujo en la dirección y ver figura 3.1, por lo que el campo de velocidades para el sistema rectangular analizado queda de la siguiente manera:

$$\underline{v} = (v_x, v_y, v_z) = [v_x(t, z), 0, v_z(t, x)]$$

La ecuación de continuidad para coordenadas cartesianas es³⁶:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho v_z)}{\partial z} = 0 \quad 4.3$$

Si se aplica el campo de velocidades dado y se supone que el fluido es incompresible, en estado estacionario, la ecuación de continuidad queda en función de v_x y v_z permitiendo calcular v_z :

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0 \quad 4.4$$

El tensor de esfuerzos totales es:

$$\underline{T} = -P\underline{I} + \underline{\sigma} \quad 4.5$$

Y para coordenadas rectangulares el tensor de esfuerzos de corte:

$$\underline{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{XX} & \sigma_{XY} & \sigma_{XZ} \\ \sigma_{YX} & \sigma_{YY} & \sigma_{YZ} \\ \sigma_{ZX} & \sigma_{ZY} & \sigma_{ZZ} \end{pmatrix} \quad 4.6$$

Al analizar el tensor de esfuerzos de corte de acuerdo a los campos establecidos; la dirección del movimiento se presenta en forma preferencial en la dirección x y el gradiente en z, por lo que el tensor se reduce a:

$$\underline{\sigma} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad 4.7$$

De la ecuación 4.7 se establece que los esfuerzos de corte se presentan en σ_{xz} y por simetría $\sigma_{xz} = \sigma_{zx}$.

Ecuaciones de balance de cantidad de movimiento

Las ecuaciones de Cauchy (expresada en sus componentes) para el sistema abordado según la convención reológica para coordenadas rectangulares son:

Dirección del movimiento:

$$\rho \frac{Dv_x}{Dt} = -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial z} + \rho g_x \quad 4.8$$

Y de acuerdo a la ecuación 4.7, la ecuación 4.8 se simplifica:

$$\frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial z} = -\frac{\partial P}{\partial x} \quad 4.8$$

La ecuación 4.8 muestra que en el lado derecho queda P como una constante en función de x y en el lado izquierdo el esfuerzo de corte σ_{zx} como función de z , por lo que:

$$\frac{d\sigma_{zx}}{dz} = -\frac{dP}{dx} \quad 4.9$$

Pero como el lado derecho de la ecuación 4.9 es una constante o una función de x y el izquierdo es una constante o una función de z , esta igualdad solo se cumple cuando uno de

los términos es una constante. Para el caso de estudio del presente trabajo el gradiente de presión es constante.

Al despejar σ_{zx} de la ecuación 4.9 :

$$d\sigma_{zx} = -\frac{dP}{dx} dz \quad 4.10$$

E integrando

$$\int d\sigma_{zx} = -\frac{dP}{dx} \int dz \quad 4.11$$

$$\tau_{zx} = -\frac{dP}{dx} z + c_1 \quad 4.12$$

La constante se evalúa a la mitad del canal; condición a la frontera (CF): $\tau_{zx} = 0$ a

$$z = \frac{h(x)}{2} . \text{ Por lo que, el valor de la constante igual a: } c_1 = \frac{dp}{dx} \left(\frac{h(x)}{2} \right)$$

Y sustituyendo dicho valor en la ecuación 4.12

$$\tau_{zx} = -\frac{dP}{dx} z + \frac{dP}{dx} \frac{h(x)}{2} \quad 4.13$$

Al sustituir la ecuación constitutiva de un fluido ley de la potencia³⁶ $\tau_{zx} = -k \left(\frac{\partial v_x}{\partial z}\right)^n$ en la ecuación 4.13 la ecuación resultante es:

$$\left(\frac{\partial v_x}{\partial z}\right)^n = \frac{1}{k} \frac{dP}{dx} \left(z - \frac{h(x)}{2}\right) \quad 4.14$$

Y al despejar $\left(\frac{\partial v_x}{\partial z}\right)$ de la ecuación 4.13 e integrar la ecuación 4.14, la ecuación resultante es.

$$\left(\frac{\partial v_x}{\partial z}\right) = \left(\frac{1}{k} \frac{dP}{dx}\right)^{\frac{1}{n}} \left(z - \frac{h(x)}{2}\right)^{\frac{1}{n}} \quad 4.15$$

$$v_x = \left(\frac{1}{k} \frac{dP}{dx}\right)^{\frac{1}{n}} \left[\frac{1+n}{n} z^{\frac{n+1}{n}} - \left(\frac{h(x)}{2}\right)^{\frac{1}{n}} z \right] + c \quad 4.16$$

La CF para evaluar la constante de integración es: cuando $z=0$ la velocidad $v_x=0$, por lo

que, la contante es $c = -\left(\frac{1}{k} \frac{dP}{dx}\right)^{\frac{1}{n}} \frac{n}{1+n} \left(\frac{h(x)}{2}\right)^{\frac{n+1}{n}}$. Se define el parámetro $q = \frac{n+1}{n}$ para

simplificar el manejo de las ecuaciones, quedando:

$$v_x = \left(\frac{1}{k} \frac{dP}{dx}\right)^{\frac{1}{n}} \frac{1}{q} \left[\left(z - \frac{h(x)}{2}\right)^q - \left(\frac{h(x)}{2}\right)^q \right] \quad 4.17$$

La ecuación 4.17 describe el flujo de un fluido ley de la potencia en un microcanal rectangular en la dirección x. En el apéndice A se muestra la expresión para la velocidad

promedio y el flujo volumétrico en la dirección x, así como, se muestra el caso particular cuando $n=1$ (fluido newtoniano).

Para describir la velocidad en la dirección z se sustituye la ecuación 4.16 en la 4.4.

Primero despejamos $\frac{\partial v_z}{\partial z}$ de la ecuación 4.4.

$$\frac{\partial v_z}{\partial z} = -\frac{\partial v_x}{\partial x} \quad 4.18$$

Y después se integra la ecuación resultante.

$$v_z = -\int_0^z \frac{\partial v_x}{\partial x} dz \quad 4.19$$

Como la diferencial de v_x con respecto a x es continua y el integrando no depende de z se puede sacar la diferencial de la integral.

$$v_z = -\frac{\partial}{\partial x} \int_0^z v_x dz \quad 4.20$$

Y se sustituye la ecuación 4.17 en la 4.20 y al integrar queda:

$$v_z = -\frac{h(x)^q}{2^q q} \left(\frac{1}{k} \frac{E}{W} \right)^{\frac{1}{n}} \left[\frac{h(x)}{q+1} \left(\frac{\partial^q h(x)}{\partial x^q} \right) + \left(\frac{\partial h(x)}{\partial x} \right)^q \right] \quad 4.21$$

Si la ecuación 4.21 se evalúa en $z=h(x)$ la ecuación resultante es una ecuación diferencial que determina la deformación instantánea de la pared superior del microcanal ($h = h(x, t)$), y como se observa es altamente no lineal, por lo que para su solución se utilizan criterios de aproximación, tema que se aborda en el siguiente capítulo.

V PROPUESTA DE SOLUCIÓN

En esta sección se plantea una estrategia de solución para el problema de flujo intermitente de un fluido ley de la potencia en un canal rectangular con la pared superior elástica ver figura 3.1. Estos problemas están expresados en la sección anterior para una geometría rectangular, en donde podemos notar que el problema a resolver es muy complejo ya que las ecuaciones resultantes son diferenciales parciales y no lineales, siendo el mayor obstáculo para su solución analítica la no linealidad. Si se quiere resolver el problema completo, se deben implementar métodos numéricos avanzados como: elemento finito, volumen finito y diferencias finitas³⁷ entre otros, que proporcionan soluciones aproximadas a problemas complejos mediante la discretización de los sistemas en estudio. Otras técnicas que dan soluciones aproximadas y que tienen fundamento en soluciones analíticas son las que involucran el análisis dimensional, órdenes de magnitud, aproximaciones de lubricación y el escalamiento^{38,39}. Las técnicas de análisis dimensional hacen uso de las variables características del sistema estudiado y dan valores a los números adimensionales que caracterizan relaciones entre mecanismos involucrados en el proceso. El análisis de aproximación de lubricación requiere estimar el orden de magnitud de cada término en la ecuación de tal manera que términos significativos puedan ser analizados y términos no significativos sean despreciados. Como resultado, se obtienen ecuaciones que contienen parámetros con sentido físico, en particular números adimensionales, cuyo valor permite hacer simplificaciones en las ecuaciones mediante casos asintóticos, la mayoría de los cuales pueden ser resueltos con técnicas matemáticas analíticas.

Este trabajo se propone la solución de las ecuaciones de balance de cantidad de movimiento y de continuidad que describen el flujo intermitente de un fluido ley de la potencia en un

canal rectangular con la pared superior elástica mediante aproximaciones de lubricación y órdenes de magnitud. Para hacerlo es necesario (i) especificar las variables características del sistema, (ii) hacer un análisis de órdenes de magnitud de las ecuaciones de balance, (iii) hacer suposiciones razonables (basadas en la naturaleza del fenómeno y de hechos físicos) que permitan simplificar las ecuaciones de manera que se puedan aplicar técnicas matemáticas analíticas, (iv) obtener una descripción objetiva del proceso y (v) comparar, en la medida de lo posible, los resultados analíticos aproximados con resultados o situaciones experimentales.

Se requiere definir una escala apropiada para calcular la deformación en el canal, debido a que el espesor del PDMS es de varios milímetros y el canal sólo tiene algunos micrómetros de alto, el PDMS puede ser considerado un medio seminfinito, donde las deformaciones desaparecen a lo largo del canal, ver figura 3.1.

En tal caso la escala de longitud apropiada para determinar la deformación en z está dada por el ancho del canal W , y no por el espesor del dispositivo de PDMS o altura del canal. Por lo tanto la deformación del techo del canal es proporcional; al incremento de la altura del canal $\Delta h(x)$, al ancho del canal W , a la presión local aplicada P y al módulo de Young E , a través de la siguiente relación²⁹:

$$\Omega \sim \frac{\Delta h(x)}{W} \sim \frac{P}{E} \quad 5.1$$

La deformación del canal de PDMS en la sección lateral (dirección y) puede ser despreciada por que la altura H es mucho más pequeña que el ancho W .

$$\frac{W}{H} \gg 1 \quad 5.2$$

Para todas las aproximaciones consideradas en el presente trabajo, sólo la deformación en la altura es proporcional a la presión local de acuerdo con 5.1.

Cuando la presión decrece a lo largo de la longitud del canal en la dirección x , hay un decremento importante en la deformación a lo largo de x o longitud del canal. La máxima deformación es observada a la entrada del canal y está dada por:

$$\Delta h_{max} \approx \frac{PW}{E} \quad 5.3$$

El problema de 3 dimensiones del flujo de fluido a través de la sección transversal rectangular puede ser reducida a 2 dimensiones, al promediar la altura del canal deformado $h(x, y)$, a través del ancho del canal. La sección transversal longitudinal del dispositivo está dada por $h(x)$.

En un flujo por arrastre ($Re \ll 1$) de un fluido a través de un canal delgado o estrecho ($\frac{H}{L} \ll 1$) el flujo es principalmente en la dirección x y la aproximación de lubricación se utiliza de tal forma que la ecuación de Cauchy se reduce a la ecuación 4.8 (ver capítulo IV). Es importante suponer que la curvatura de la pared superior o techo de PDMS es pequeña en relación con la longitud del dispositivo.

Acoplamiento entre la pared elástica y el flujo.

Cuando se aplica una presión externa a la sección transversal rectangular del dispositivo éste se deforma, produciéndose un abultamiento en la pared superior; y recupera su forma original cuando la presión cesa. Esto propicia un flujo de compresión el cual regula la cantidad de fluido en el dispositivo.

Este tipo de flujos es asimétrico, por lo que la cantidad de fluido que se desplaza hacia la entrada del canal es más que hacia afuera de él y el flujo se mantiene hasta que el exceso de fluido es expulsado del dispositivo, por lo que este proceso está asociado a un tiempo característico τ_r .

τ_r es función de las propiedades del material de que está hecha la pared elástica, en este caso PDMS, el oligómero, la geometría del canal y la presión impuesta.

En este problema de elastohidrodinámica la pared deformada de PDMS, al recuperar su forma, ejerce una presión sobre el fluido confinado dentro del canal⁴⁰.

Para deformaciones pequeñas, la presión ejercida sobre el fluido en algún punto a lo largo del canal puede ser considerada como proporcional a la de la pared elástica de PDMS de acuerdo con la aproximación 5.3.

La escala de longitud para el esfuerzo es el ancho W . La presión en algún punto x está dada por:

$$p(x) = \frac{E\Delta h(x)}{W} = E \left(\frac{h(x) - H}{W} \right) \quad 5.4$$

Donde H es la altura no deformada del canal. Diferenciando la ecuación 5.4 con respecto a x queda:

$$\frac{\partial P}{\partial x} = \frac{E}{W} \frac{\partial h}{\partial x} \quad 5.5$$

Una solución completa sólo se puede obtener usando técnicas numéricas, pero un análisis de escala puede revelar algunos rasgos relevantes del problema:

En el análisis sobresale lo siguiente a partir de la siguiente suposición de escala. Se supone que la deformación del canal es pequeña en comparación con la altura del canal H.

Lo cual se traduce en que

$$H \gg \frac{PW}{E} \quad 5.6$$

Las suposiciones adicionales para las otras variables son:

$h \sim H$, para la altura del canal, la deformación se puede aproximar como $\Delta h \sim PW/E$, la longitud como $x \sim L$ y $t \sim \tau_r$, donde τ_r es el tiempo de respuesta de la pared elástica del dispositivo y deberá ser determinado para cada una de las derivadas parciales de la ecuación que describen la velocidad de deformación de la pared elástica del microcanal.

Para la velocidad en la dirección z:

$$v_z = \frac{\partial h}{\partial t} \sim \frac{PW}{E\tau_r} \quad 5.7$$

Y las otras dos derivadas:

$$\left(\frac{\partial h(x)}{\partial x}\right)^q \sim \left(\frac{PW}{EL}\right)^q \quad 5.8$$

$$h\left(\frac{\partial^q h}{\partial x^q}\right) \sim \left(\frac{HPW}{EL^q}\right) \quad 5.9$$

Al hacer la sustitución de 5.7, 5.8 y 5.9 en la ecuación 4.20 la ecuación resultante es:

$$\frac{PW}{E\tau_r} \sim -\frac{H^q}{2^q q} \left(\frac{E}{KW}\right)^{\frac{1}{n}} \left[\frac{1}{q+1} \left(\frac{HPW}{EL^q}\right) + \left(\frac{PW}{EL}\right)^q \right] \quad 5.10$$

La parte derecha dentro de los corchetes de la ecuación 5.10 puede ser despreciada debido a que $H \gg \frac{PW}{E}$, consideración hecha al inicio del análisis.

Bajo estas condiciones la ecuación 5.10 se simplifica:

$$\frac{1}{\tau_r} \sim \frac{H^q}{2^q(q+1)L^q} \left(\frac{E}{KW}\right)^{\frac{1}{n}} \quad 5.11$$

$$\tau_r \sim \frac{2^q(q+1)L^q}{H^q} \left(\frac{KW}{E}\right)^{\frac{1}{n}} \quad 5.12$$

De esta ecuación se pueden concluir dos cosas importantes; el tiempo de respuesta τ_r es independiente de la presión aplicada y sólo depende del inverso del módulo de Young, siempre y cuando la presión aplicada no provoque una deformación de la altura del canal.

Para calcular la deformación de la altura a lo largo del canal se definen dos variables adimensionales:

$\theta = \frac{h(x)}{H}$, $\varepsilon = \frac{x}{L}$, donde $h(x)$ es la altura que alcanza a deformarse el canal debido al pulso de presión a lo largo del canal, H es la altura del canal sin deformarse, x es cualquier posición a lo largo del canal y L es lo largo del canal.

La ecuación 5.12 queda:

$$\left(\frac{h(x)}{\theta}\right)^{q+1} \sim 2^q(q+1) \left(\frac{\left(\frac{x}{\varepsilon}\right)^q \left(\frac{KW}{E}\right)^{\frac{1}{n}}}{\tau_r}\right) \quad 5.13$$

VI RESULTADOS Y ANÁLISIS

En esta sección se presentan los resultados obtenidos de la solución del problema del flujo de un fluido ley de la potencia en un canal rectangular con la pared superior elástica. Para el caso de un fluido $n=1$ (newtoniano) se compara la solución con los datos experimentales obtenidos por (Dhananjay, 2007) para el oligómero de Poli (Etilen Glicol) di Acrilato PEG-DA, con una viscosidad de $\mu= 5.6 \times 10^{-8}$ Mpa s. Se resolvió también el caso de $n=0.554$ y $n=0.716$ (fluido pseudoplástico), datos obtenido de (Bird and col.,2006) para la carboximetil celulosa al 1.5% y 0.67% peso/volumen en agua a 25°C con $k= 31.3 \frac{\text{Dinas} * s^n}{\text{cm}^2}$ y $k= 3.04 \frac{\text{Dinas} * s^n}{\text{cm}^2}$ respectivamente, y por último se emplearon datos obtenidos en el Laboratorio de Farmacia Molecular y Liberación Controlada (reporte técnico interno) de la Universidad Autónoma Metropolitana, campus Xochimilco de una solución de glucosa al 6% a 25 ° C (fluido dilatante), $n= 1.2$ y $k= 0.0064 \frac{\text{Dinas} * s^n}{\text{cm}^2}$.

La solución aproximada del modelo para los diferentes fluidos ley de la potencia a las diferentes condiciones del proceso se encuentran en la tabla contenida en el apéndice B. donde se puede observar el efecto de la altura, ancho y largo del canal, así como la presión de entrada del fluido sobre el tiempo de respuesta de la pared elástica del canal.

En las páginas siguientes se muestran los resultados de manera gráfica. Cabe señalar que esta representación y los resultados dejan ver de forma aislada los efectos de cada variable y factor dentro del proceso, situación que se pudo obtener gracias a la técnica de aproximación de lubricación usada en la solución del problema que proporciona un modelo simple que describe todos los factores involucrados de forma, al menos, cualitativa.

En la figura 6.1 se muestran los datos experimentales obtenidos por (Dhananjay, 2007) y los predichos por el modelo para $n=1$ a distintos anchos de canal: 50, 200, 500 y 1000 μm . Como se puede observar el modelo se ajusta a los datos experimentales que muestran cualitativamente una tendencia aparentemente lineal y predice que el tiempo de respuesta, así como el contemplado experimentalmente se incrementa linealmente. Un incremento en el ancho del canal provoca que la presión ejercida debido a la deformación de la pared elástica del canal sea menor, lo que resulta en un incremento del tiempo de respuesta.

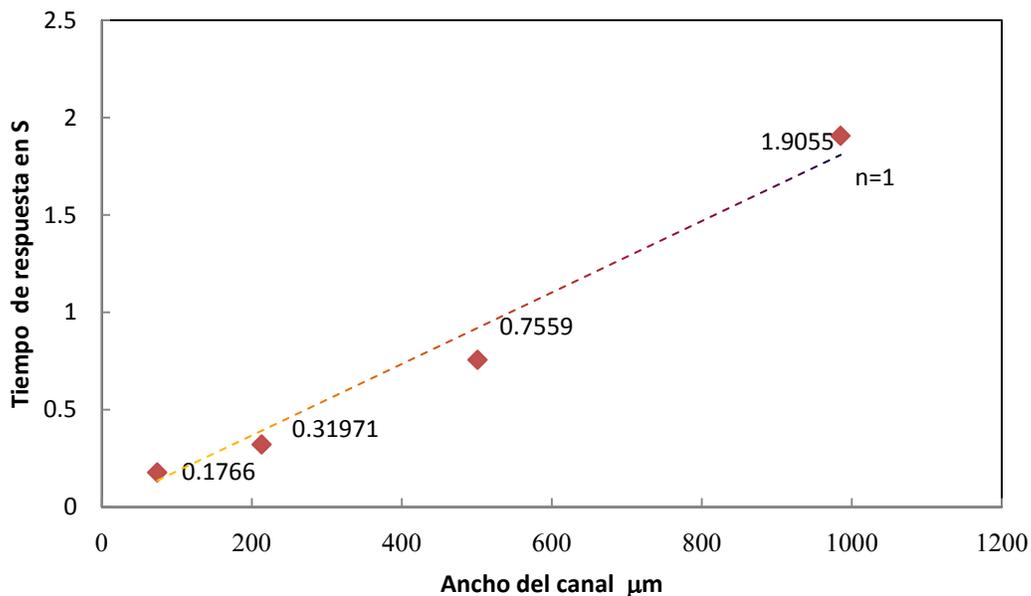


Figura 6.1 dependencia del tiempo de respuesta τ al ancho del canal, manteniendo constante la presión a 3psi, el largo del canal a 1 cm y lo alto del canal a 20 μm .

En la figura 6.2 Se muestran los datos experimentales obtenidos por (Dhananjay, 2007) y los predichos por el modelo para $n=1$ a distintas alturas de canal: 2, 10, 20 y 40 μm . Como se puede observar el modelo se ajusta a los datos experimentales de un fluido newtoniano y predice que el tiempo de respuesta, así como el contemplado

experimentalmente decrece potencialmente con una pendiente de -3 s/ μm . Un incremento en el ancho del canal provoca que el esfuerzo de recuperación de la pared elástica del canal sea menor, lo que resulta en un incremento del tiempo de respuesta

El tiempo de respuesta para los fluidos pseudoplásticos y el dilatante también decrecen potencialmente, el dilatante con una pendiente de -3 , mientras que los pseudoplásticos muestran una pendiente de -2.82 . El modelo predice que el tiempo de respuesta para el fluido pseudoplásticos $n=0.554$ se reduce en un orden de magnitud de 4 con respecto al newtoniano mientras que para el fluido $n=0.716$ la disminución es del orden de una magnitud; para el dilatante el tiempo de respuesta se incrementa con respecto al newtoniano pero el orden de magnitud se mantiene. Una disminución en la altura del canal provoca que el tiempo de respuesta del sistema aumente, debido a que aumenta la resistencia al flujo que debe superar el fluido al ser comprimido fuera del canal.

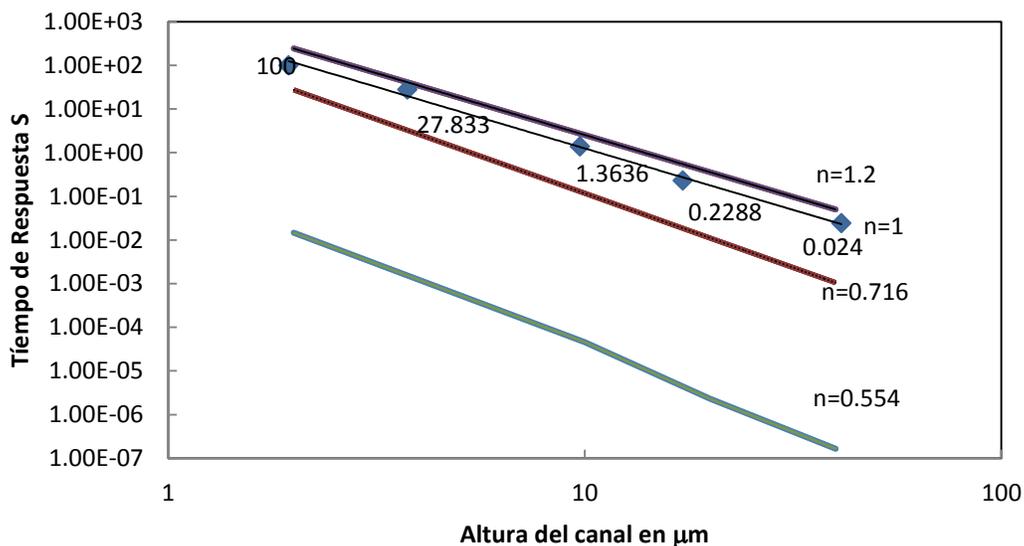


Figura 6.2 dependencia del tiempo de respuesta τ a la altura del canal, manteniendo constante la presión a 3psi, el largo del canal a 1 cm y el ancho a 200 μm .

El efecto de la longitud del canal sobre el tiempo de respuesta se muestra en la figura 6.3 y, como se puede observar, el modelo se ajusta perfectamente a los datos experimentales obtenidos para cuatro canales de longitud igual a 0.25, 0.5, 1 y 1.2 cm, con un ancho y alto de canal constante de 200 μm y 10 μm respectivamente a una presión de 3 psi. El tiempo de respuesta para el fluido newtoniano al igual que el del dilatante se incrementa potencialmente con una pendiente de 2, sin observar diferencia entre uno y otro. Para los fluidos pseudoplásticos el tiempo de respuesta se incrementan potencialmente con una pendiente de 3.25 para el fluido $n=0.716$ y 3 para el de $n=0.554$, así como que el orden de magnitud que predice el modelo para los pseudoplásticos es menor en una orden de magnitud con respecto al del newtoniano y pseudoplástico. El tiempo de respuesta se incrementa debido a que al aumentar la longitud del canal se incrementa el recorrido del fluido para salir del canal.

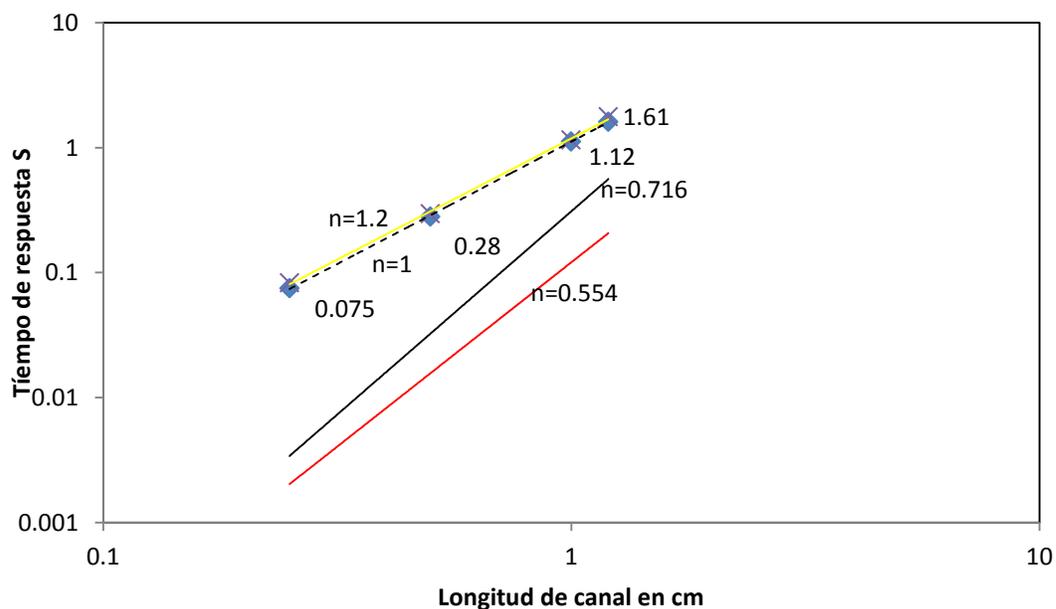


Figura 6.3 dependencia del tiempo de respuesta τ con la longitud del canal, manteniendo constante la presión a 3psi, lo alto del canal a 10 μm y el ancho a 200 μm .

En la figura 6.4 se muestra que los datos predichos por el modelo para el tiempo de respuesta de un fluido newtoniano, ante la presión aplicada al fluido a la entrada del canal, se ajustan a los datos experimentalmente obtenidos por (Dhananjay 2007). Como se puede observar el tiempo de respuesta es invariante ante los cambios de la presión aplicada al fluido a la entrada del canal. Esta invariancia es esperada, siempre y cuando la deformación de la altura sea mucho más pequeña que la altura original del canal.

Un incremento arriba de 15 psi en la presión provoca deformaciones considerables en las paredes del canal, que a su vez incrementa el esfuerzo elástico de recuperación de las paredes del canal. Este incremento en el esfuerzo elástico se compensa por el hecho de que un gran volumen de líquido deberá ser ahora expulsado. Este balance entre las fuerzas elásticas y las viscosas aseguran que el tiempo de respuesta sea independiente de la presión para pequeñas deformaciones. Finalmente, se puede observar que el tiempo de respuesta varía en función del cociente $\frac{\mu}{E}$ asociado a las características viscoelásticas del sistema.

Esto implica que si se usan oligómero de menor viscosidad, o se fabrica el dispositivo de PDMS más rígido el tiempo de respuesta será menor.

La figura 6.5, 6.6 y 6.7 muestran el comportamiento del tiempo de respuesta de un fluido dilatante $n=1.2$ y los pseudoplásticos $n=0.716$ y 0.554 respectivamente ante la presión aplicada al fluido a la entrada del canal. Como se puede observar para el fluido dilatante el tiempo de respuesta se incrementa en un orden de magnitud con respecto al fluido newtoniano como lo predice el modelo, sin embargo la invariancia del tiempo de respuesta no se mantiene ante la variación de la presión debido al incremento de la viscosidad. Para los fluidos pseudoplásticos $n=0.716$ y $n=0.554$ el orden de magnitud decrece en dos y cinco

ordenes de magnitud respectivamente con respecto al fluido newtoniano, observándose que la invariencia se mantiene.

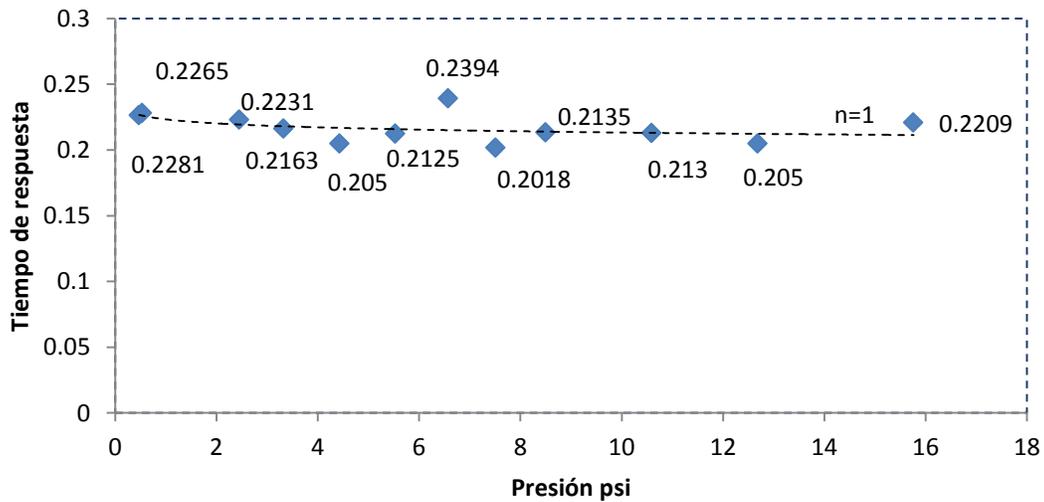


Figura 6.4 dependencia del tiempo de respuesta τ con la presión aplicada al fluido $n=1$ a la entrada del canal, manteniendo constante, lo alto, ancho y la longitud del canal a $10 \mu\text{m}$, $200 \mu\text{m}$ y 1 cm respectivamente a distintas presiones sin sobrepasar las 15 psi , presión a la cual la deformación del canal es comparable a la altura del canal $P \sim \frac{EH}{w}$.

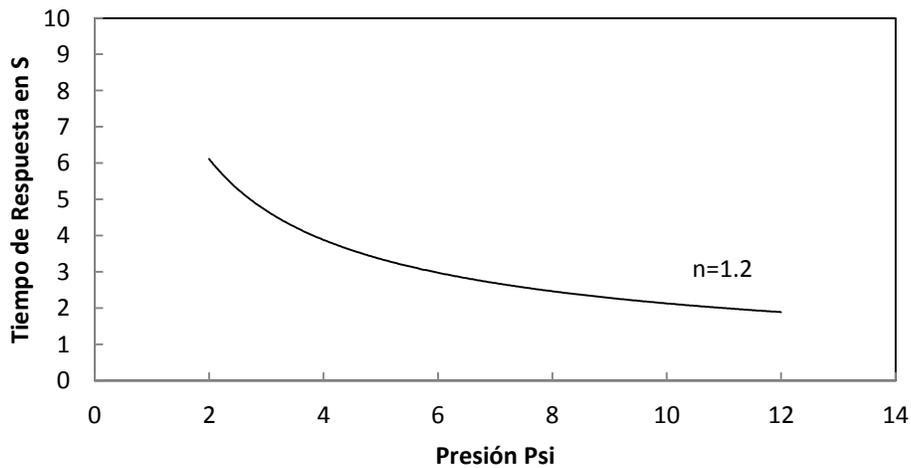


Figura 6.5 dependencia del tiempo de respuesta τ en función la presión aplicada al fluido $n=1.2$ a la entrada del canal predicha por el modelo.

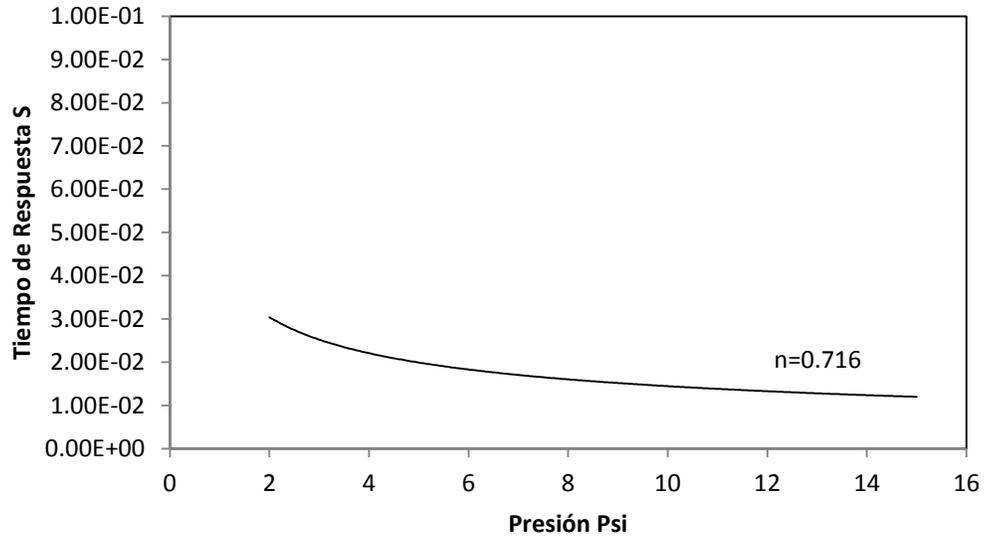


Figura 6.6 dependencia del tiempo de respuesta τ en función de la presión aplicada al fluido $n=0.716$ a la entrada del canal predicha por el modelo.

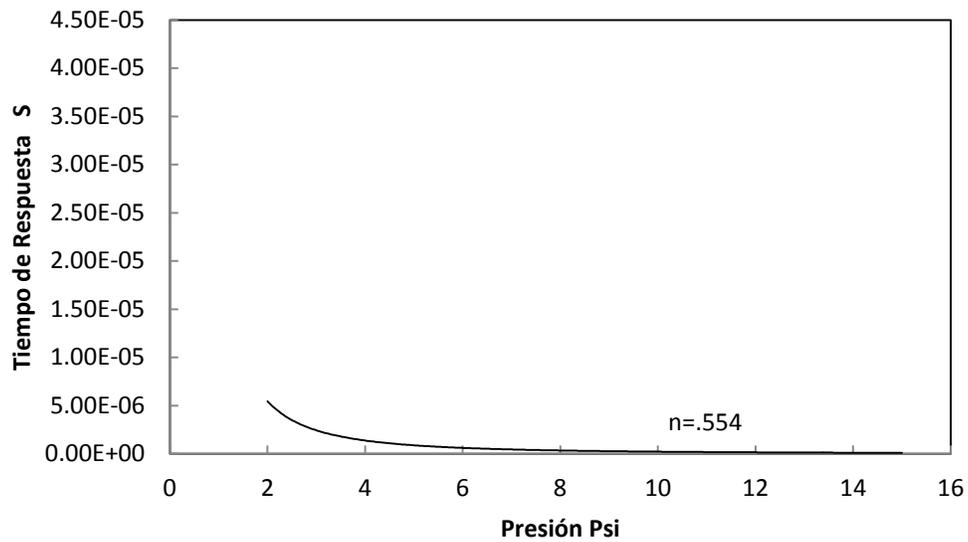


Figura 6.7 dependencia del tiempo de respuesta τ en función de la presión aplicada al fluido $n=0.554$ a la entrada del canal predicho por el modelo.

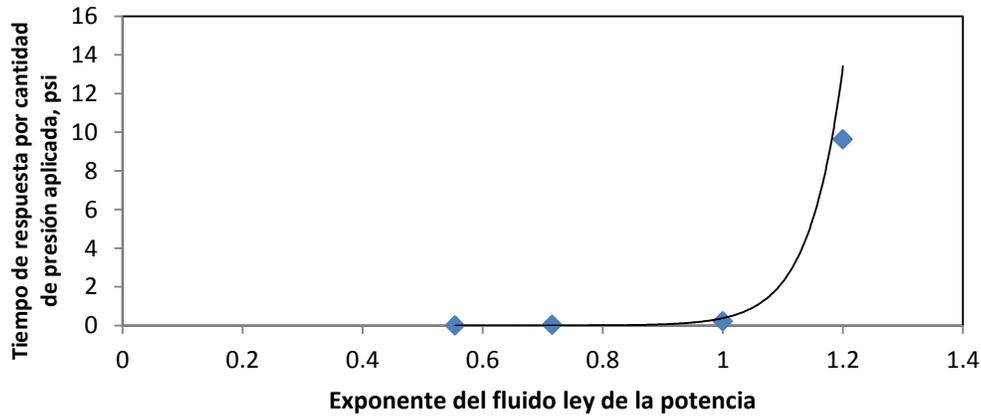


Figura 6.8 variación del tiempo de respuesta por cada unidad de presión incrementado.

En la figura 6.8 se presenta el cambio en el tiempo de respuesta por unidad de presión aplicada en función del orden potencial del fluido predicho por el modelo, observándose que se incrementa en forma exponencial en razón del incremento del orden del potencial del fluido. Esto es debido a que el tiempo de respuesta es muy sensible a un cambio en la viscosidad.

La figura 6.9 muestra la relación que existe entre el tiempo de respuesta y el cociente entre el ancho del canal (W) y la altura (H). Siendo la relación W/H una de las aproximaciones utilizadas para la solución del modelo, es importante analizar su efecto en el tiempo de respuesta. En la figura se puede observar que para valores altos del cociente el tiempo de respuesta se incrementa en forma potencial con una pendiente de 2.5, debido a una disminución de la curvatura de la deformación del área rectangular del canal. Para el caso del fluido dilatante se observa que el orden de magnitud se mantiene con respecto a la del fluido newtoniano y para los pseudoplásticos el tiempo disminuye en cuatro órdenes de magnitud para el fluido $n=0.716$ y de seis para el fluido $n=0.554$.

En la figura 6.10 se observa que el tiempo de respuesta calculado por el modelo, se incrementa potencialmente en función del orden potencial del fluido.

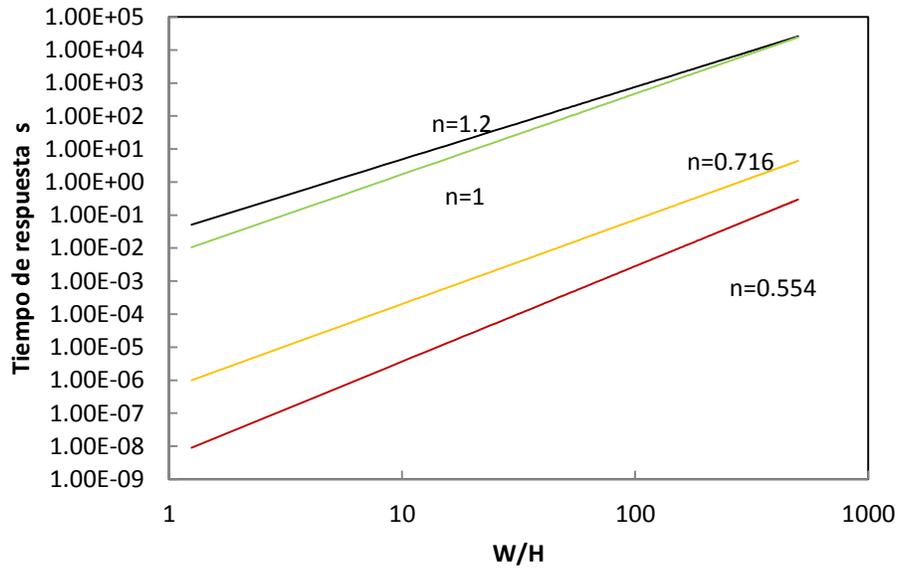


Figura 6.9 dependencia del tiempo de respuesta en función de la relación $\frac{W}{H}$

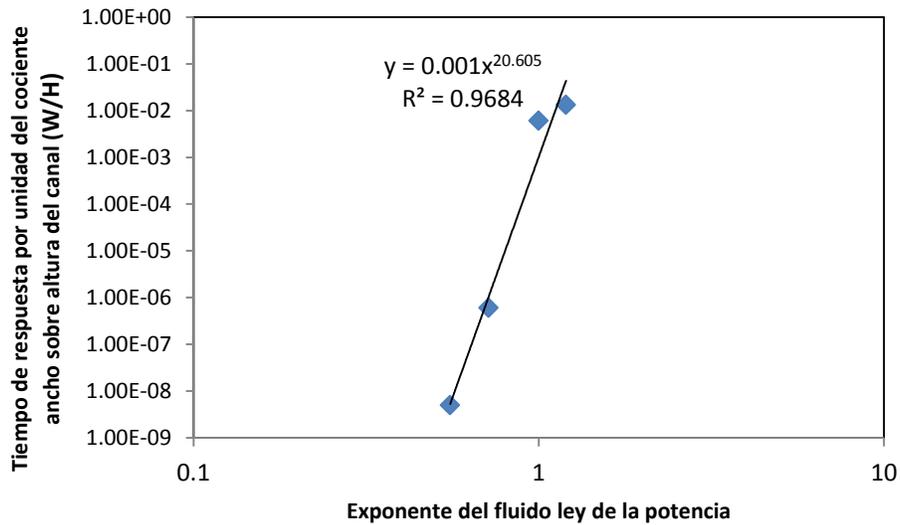


Figura 6.10 relación entre el tiempo de respuesta y el orden potencial del fluido

En las figuras 6.11, 6.12, 6.13 y 6.14 se muestra el grado de deformación de la altura adimensional del canal en función de la longitud adimensional del mismo para los distintos fluidos ley de la potencia analizados. Para tal efecto se definieron dos variables adimensionales; una para la altura $\theta = \frac{h}{H}$ y otra para la longitud $\varepsilon = \frac{x}{L}$, donde h es el incremento de la altura del canal debido a la deformación de la pared elástica y H es la altura del canal sin deformar. Para el caso de la longitud, x es cualquier posición a lo largo del canal, mientras que L es la longitud total del canal.

En la figura 6.11 se puede observar la variación de la altura del canal para el caso de un fluido newtoniano a tiempos de respuesta de 0.01 y 0.1 segundos y relación W/H de 2.5 y 10 de acuerdo con la posición a lo largo del canal. El modelo predice una deformación máxima del 20% para un tiempo de 0.01 segundos y una relación W/H de 10, que están de acuerdo con los predichos experimentalmente por (Dhananjay, 2007) y (Thomas Gervais, 2006).

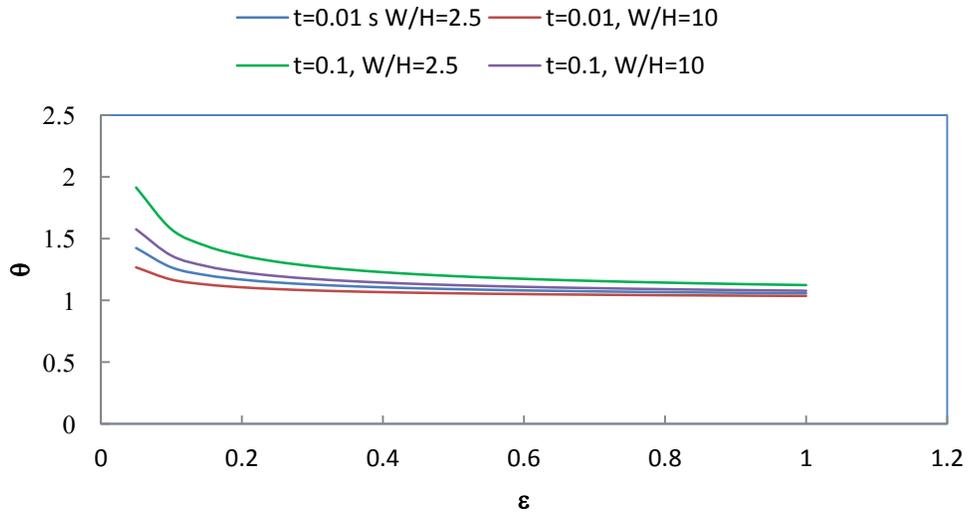


Figura 6.11 relación entre el incremento de la altura adimensional θ del canal debido a la presión aplicada a la entrada del canal en función de la longitud del canal adimensional ε , para un fluido newtoniano a dos tiempos de respuesta $t=0.01$ s y $t=0.1$ s y dos relaciones $\frac{W}{H}$; 2.5, 10.

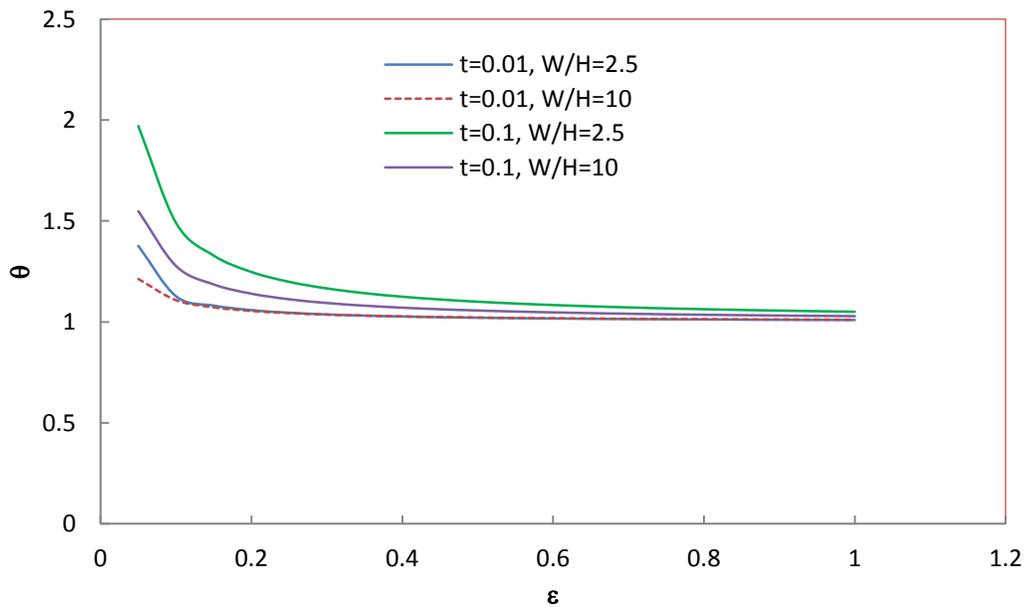


Figura 6.12 relación entre el incremento de la altura adimensional θ del canal debido a la presión aplicada a la entrada del canal en función de la longitud del canal adimensional ε , para un fluido pseudoplástico $n=0.716$ a dos tiempos de respuesta $t=0.01$ s y $t=0.1$ s y dos relaciones $\frac{W}{H}$; 2.5, 10.

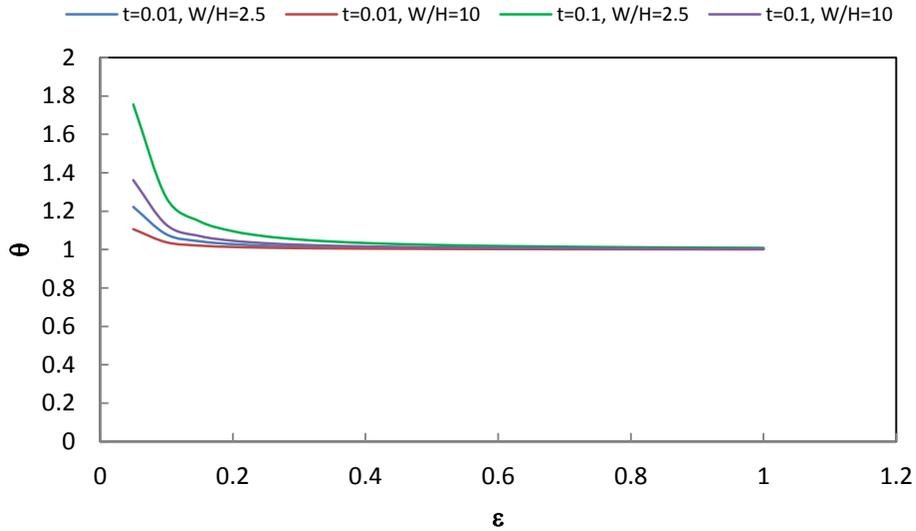


Figura 6.13 relación entre el incremento de la altura adimensional θ del canal debido a la presión aplicada a la entrada del canal en función de la longitud del canal adimensional ε , para un fluido pseudoplástico $n=0.554$ a dos tiempos de respuesta $t=0.01$ s y $t=0.1$ s y dos relaciones $\frac{W}{H}$; 2.5, 10.

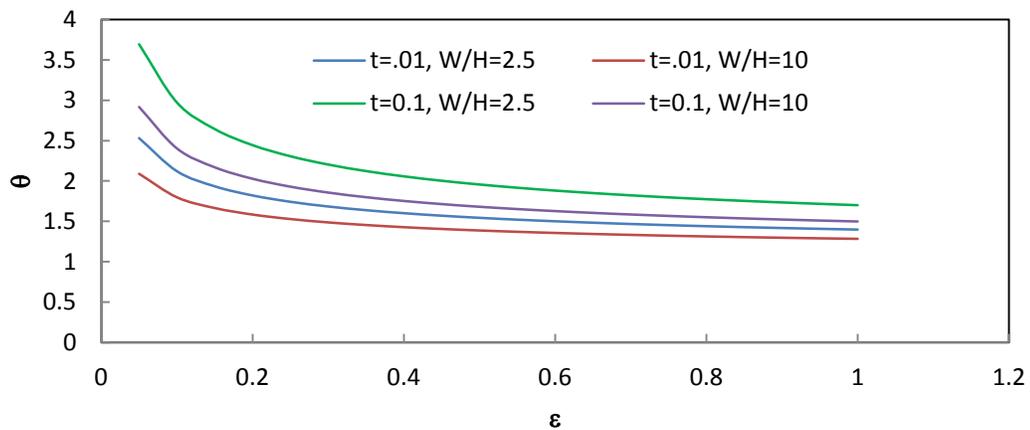


Figura 6.14 relación entre el incremento de la altura adimensional θ del canal debido a la presión aplicada a la entrada del canal en función de la longitud del canal adimensional ε , para un fluido dilatante $n=1.2$ a dos tiempos de respuesta $t=0.01$ s y $t=0.1$ s y dos relaciones $\frac{W}{H}$; 2.5, 10.

En la figura 6.15 se observa la variación de la deformación de la altura del canal en función de la variación de la relación W/H a dos tiempos de respuesta distintos en un orden de magnitud. Como se puede observar el modelo predice que la deformación de la altura disminuye conforme la relación W/H se incrementa, esto debido a que al aumentar la

relación W/H se aumenta el área de deformación y disminuye la deformación máxima del canal. Para el caso de la variación del tiempo de respuesta, predice que a menor tiempo de respuesta del sistema la deformación es menor y si se incrementa el tiempo en un orden de magnitud la deformación se incrementa pero mantiene el orden de magnitud, esto debido a que el tiempo de respuesta del fluido está en relación directa con el área de la deformación del canal, ya que el fluido también se deforma, provocando un cambio en la resistencia a su movimiento dentro del canal. Con respecto al comportamiento de la deformación máxima en función del orden potencial del fluido, el modelo predice que el fluido dilatante provoca una mayor deformación del orden entre 2.5 y 3 veces más que la altura original del canal, mientras que para el fluido newtoniano y el fluido pseudoplástico ($n=0.716$) está del orden de entre 0.20 y 0.80, y por último para el fluido pseudoplástico ($n=0.554$) la deformación está del orden del 0.12 al 0.60 respectivamente.

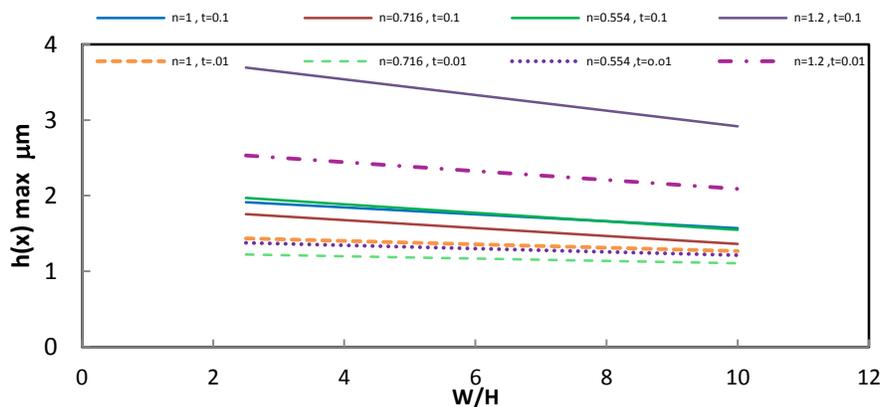


Figura 6.15 altura máxima a la cual el canal se deforma debido a la presión aplicada a la entrada del canal, para un fluido newtoniano, pseudoplástico $n=0.716$, pseudoplástico $n=0.554$ y dilatante $n=1.2$ a dos tiempos de respuesta $t=0.01$ s y $t=0.1$ s y dos relaciones $\frac{W}{H}$; 2.5, 10.

VII CONCLUSIONES

En este trabajo se ha logrado plantear un modelo sencillo para el flujo de un fluido ley de la potencia en un canal rectangular con la pared superior elástica (sin considerar efectos de frontera, ni de entrada y salida).

La sencillez del modelo estriba en que las expresiones obtenidas que establece el balance de cantidad de movimiento, tienen solución analítica.

La solución se obtuvo empleando las aproximaciones de lubricación y de orden de magnitud para los balances de cantidad de movimiento con el fin de simplificar las ecuaciones que son altamente no lineales. Además, este estudio permitió el aislamiento, y por lo tanto la evaluación de la influencia de cada uno de los factores considerados en el proceso: tipo de fluido, altura, ancho y largo del canal, además de la presión de entrada del fluido al canal sobre el tiempo de respuesta de la pared superior elástica del canal rectangular.

Mediante los resultados se confirma que las técnicas aproximadas basadas en las aproximaciones de lubricación y de orden de magnitud son una herramienta muy útil para la solución de los problemas de fenómenos de transporte y en general para los problemas encontrados en los procesos de microfluidos, ya que proporcionan procedimientos sistemáticos simplificados que permiten obtener mayor conocimiento físico cualitativo y cuantitativo de los procesos estudiados, incluso en la fase del planteamiento del problema en la que los modelos todavía no se han resuelto, para obtener expresiones analíticas o resultados numéricos³⁸.

En particular se trabajó con una geometría de un canal rectangular con una pared superior elástica^{28,29}, encontrándose que la deformación máxima del canal y el tiempo de residencia del fluido dentro del canal están determinados por la relación W/H y del orden potencial del fluido.

En este trabajo se obtuvo la solución analítica para un flujo isotérmico, ley de la potencia y el caso en que la relación W/H es mucho mayor que 1. Se debe hacer notar que el modelo es muy complejo, ya que es altamente no lineal.

Aun así, la metodología de solución permitió delimitar la situación de no linealidad del problema a resolver y deja ver que, además de los casos límites que proporcionan las técnicas de aproximación de lubricación, se requerirían técnicas numéricas, sobre todo para los fluidos ley de la potencia $n \neq 1$.

Se analizaron por separado los efectos de las dimensiones del canal sobre el tiempo de respuesta para los distintos fluidos ley de la potencia, encontrándose que para el caso de un aumento de la altura del canal, manteniendo todas las demás variables geométricas constantes, el tiempo de respuesta disminuye en forma potencial para todos los casos planteados, sin embargo el orden de magnitud del tiempo de respuesta en función del tipo de fluido varía hasta en cuatro órdenes de magnitud, debido a que cambia la resistencia al flujo que debe superar el fluido al ser comprimido fuera del canal.

Este efecto queda mejor evidenciado en el comportamiento del tiempo de respuesta en función de la relación W/H , donde se observa que al aumentarla el área también se incrementa, pero la altura de la deformación máxima disminuye, lo que provoca que el tiempo de respuesta se incremente potencialmente de acuerdo al fluido.

El modelo también predice, después de definir dos variables adimensionales; una para la altura y otra para la longitud, la deformación máxima del canal.

Se encontró que para los fluidos ley de la potencia $n = 1$ y $n < 1$ las deformaciones máximas del canal están entre el 16% y 80% con respecto a la altura inicial, mientras que para los fluidos $n > 1$ la deformación que predice el modelo varía entre 2 y más de 3.5 veces la altura inicial del canal. Esto se debe a la influencia de la característica del fluido sobre el comportamiento del fluido. Para $n > 1$, el fluido manifiesta algún efecto de estructura y esta impide en cierto grado el flujo del material, por lo que un incremento en el exponente del fluido ley de la potencia provoca un aumento del tiempo de respuesta, así como el incremento de la deformación máxima en la altura del canal con respecto al comportamiento de un fluido newtoniano $n = 1$.

Esto se debe a que, al moverse más lento el fluido en el canal, el tiempo de respuesta y la presión del fluido sobre la pared elástica del canal se incrementan.

Por último es importante considerar que el balance entre las fuerzas elásticas de la pared y las viscosas del fluido asegura que el tiempo de respuesta sea independiente de la presión aplicada al fluido a la entrada del canal para el caso de deformaciones pequeñas, por lo que el tiempo de respuesta varía en función del cociente $\frac{\mu}{E}$, esto implica que si variamos la viscosidad del oligómero o fabricamos dispositivos de PDMS más rígidos, podremos modificar el tiempo de respuesta con el fin de que sea el menor posible. Esto se ve favorecido con canales; altos, de longitudes cortas, poco anchos y altas presiones del flujo a la entrada del canal (dentro de los límites de la estabilidad mecánica). Estas consideraciones

son las óptimas para obtener una respuesta dinámica rápida en la operación y diseño de un dispositivo de litografía de flujo intermitente.

VIII TRABAJO FUTURO

Como trabajo a realizarse en etapas futuras de esta investigación se planea:

- Acoplar el efecto de la inhibición del oxígeno que se difunde a través del PDMS sobre la reacción de polimerización a partir de mecanismos de reacción sencillos.
- Realizar el modelado del proceso considerando otras ecuaciones constitutivas de fluidos complejos.
- Resolver el problema numéricamente considerando las propiedades físicas variables.

La gran mayoría de los puntos anteriores requieren de técnicas numéricas, pues las ecuaciones que describen al problema son no lineales y estarán acopladas, generando sistemas de ecuaciones muy complejos.

IX REFERENCIAS

1. D. Urban and K. Takamura ed, *Polymer Dispersions and Their Industrial Applications*, Wiley-VCH, Weinheim, Germany, 2002, pp. 15–39.
2. Y. Lu, Y. Yin and Y. Xia, *Adv. Mater.*, 2001, 13, 415–420.
3. R. Langer and D. A. Tirrell, *Nature*, 2004, 428, 487–492.
4. D. C. Pregibon, M. Toner and P. S. Doyle, *Science*, 2007, 315, 1393–1396.
5. Howard A. Stone, Abraham D. Stroock, and Armand Ajdari. *Microfluidics. Annu. Rev. Fluid Mech.*, 36:381-411, 2004
6. Gunther and K.F. Jensen. *Multiphase microfluidics: from flow characteristics to chemical and material synthesis. Lab On A Chip*, 6(12):1487-1503, 2006.
7. R. F. Shepherd, J. C. Conrad, S. K. Rhodes, D. R. Link, M. Marquez, D. A. Weitz and J. A. Lewis, *Langmuir*, 2006, 22, 8618–8622
8. N. H. Finkel, X. Lou, C. Wang and L. He, *Anal. Chem.*, 2004, 76, 352A–359A.
9. J. L. Steinbacher and D. T. McQuade, *J. Polym. Sci., Part A: Polym. Chem.*, 2006, 44, 6505–6657.
10. T. Kawakatsu, Y. Kikuchi and M. Nakajima, *J. Am. Oil Chem. Soc.*, 1997, 74, 317–321.
11. Todd M. Squires and Stephen R. Quake. *Microfluidics: Fluid Physics at nanoliter scale. Reviews of Modern Physics*. 77(3); 997, 2005.
12. <http://www.microparticles.de>
13. T. Thorsen, R. W. Roberts, F. H. Arnold and S. R. Quake, *Phys. Rev. Lett.*, 2001, 86, 4163–4166.
14. S. L. Anna, N. Bontoux and H. A. Stone, *Appl. Phys. Lett.*, 2003, 82, 364–366.
15. S. Okushima, T. Nisisako, T. Torii and T. Higuchi, *Langmuir*, 2004, 20, 9905–9908.
16. S. Utada, E. Lorenceau, D. R. Link, P. D. Kaplan, H. A. Stone and D. A. Weitz, *Science*, 308, 537–541.

17. S. Sugiura, M. Nakajima, J. Tong, H. Nabetani and M. Seki, *J. Colloid Interface Sci.*, 2000, 227, 95–103.
18. T. Nisisako, T. Torii and T. Higuchi, *Chem. Eng. J.*, 2004, 101, 23–29.
19. D. Dendukuri, K. Tsoi, T. A. Hatton and P. S. Doyle, *Langmuir*, 2005, 21, 2113–2116.
20. S. Xu, Z. Nie, M. Seo, P. Lewis, E. Kumacheva, H. A. Stone, P. Garstecki, D. B. Weibel, I. Gitlin and G. M. Whitesides, *Angew. Chem., Int. Ed.*, 2005, 44, 724–728.
21. Nie, S. Xu, M. Seo, P. C. Lewis and E. Kumacheva, *J. Am. Chem. Soc.*, 2005, 127, 8058–8063.
22. T. Nisisako, T. Torii, T. Takahashi and Y. Takizawa, *Adv. Mater.*, 2006, 18, 1152–1156.
23. D. Dendukuri, T. A. Hatton and P. S. Doyle, *Langmuir*, 2007, 23, 4669–4674.
24. C. Decker and A. D. Jenkins, *Macromolecules*, 1985, 18, 1241–1244.
25. J.C McDonald, D. C. Duffy, J. R. Anderson, D. T. Chiu, H. K. Wu, O. J. A and G. M. Whitesides. Fabrication of microfluidic systems in poly(dimethylsilox) *Electrophoresis*. **21** (1):27-40, 2000
26. S. C. Glotzer, *Science*, 2004, **306**, 419–420.
27. D. Dendukuri, D. C. Pregibon, J. Collins, T. A. Hatton and P. S. Doyle, *Nat. Mater.*, 2006, 5, 365–369.
28. Dhananjay Dendukuri, Shelley S. Gu, Daniel C. Pregibon, T. Alan Hatton and Patrick S. Doyle, *Lab Chip*, 2007, 7, 818-828
29. T. Gervais, J. El-Ali, A. Gunther and K. F. Jensen, *Lab Chip*, 2006, 6, 500–507.
30. G.M. Whitesides and D.E. Ingeber, *Annu. Rev. Biomed. Eng.*, 2001, **3**, 335
31. S. R. Quake and A. Scherer, *Science* , 2000, **290**, 1536
32. R. Kane, D.E. Ingber and G.M. Whitesides, *Biomaterials*, 1999, **20**, 2363
33. J. C. Lotters, W. Olthuis, P. H. Veltink and P. Bergveld, *J. Micromech. Microeng.*, 1997, 7, 145

34. H. A. Stone , A. D. Stroock and A. Ajdari, *Annu. Rev. Fluid Mech*, 2004, 36, 381-411
35. C. Fütterer, N. Mine, V. Bormuth, J.H. Codarbox, P. Laval, J. Rossier and J.L. Viovy, *Lab Chip*, 2004, 4,351
36. R. B. Bird, W.E. Steward, E.N. Lightfoot, Ed. Reverte, *Fenómenos de Transporte*, 2006
37. Hayes R. E., Dannelongue H. H., Tanguy P. A. “Numerical simulation of mold filling in reaction injection molding” *Polymer Engineering and Science*, 1991, 31(11),842-848
38. José Esteban López Aguilar, Tesis Para Obtener el Grado de Maestro en Ingeniería “ANÁLISIS DE LOS MECANISMOS DE TRANSPORTE EN EL MOLDEADO POR INYECCIÓN CON REACCIÓN QUÍMICA” Facultad de Química UNAM, 2010.
39. Denn M.M.,”Process fluid mechanics” , 1ª edición, Prentice Hall inc.: Estados Unidos,(1980).
40. J. Skotheim and L. Mahadevan, *Phys. Rev. Lett.*, 2004, 92,245509

APENDICE A

Ecuaciones para un fluido ley de la potencia

$$\left(\frac{\partial v_x}{\partial z}\right) = \left(\frac{1}{k} \frac{\partial p}{\partial x}\right)^{\frac{1}{n}} \left(z - \frac{h(x)}{2}\right)^{\frac{1}{n}}$$

$$v_x = \left(\frac{1}{k} \frac{\partial p}{\partial x}\right)^{\frac{1}{n}} \frac{1}{q} \left[\left(z - \frac{h(x)}{2}\right)^q - \left(\frac{h(x)}{2}\right)^q \right]$$

$$v_z = -\frac{h(x)^q}{2^q q} \left(\frac{1}{k} \frac{E}{W}\right)^{\frac{1}{n}} \left[\frac{h(x)}{q+1} \left(\frac{\partial^q h(x)}{\partial x^q}\right) + \left(\frac{\partial h(x)}{\partial x}\right)^q \right]$$

$$\langle v_x \rangle = \frac{H^q}{2^q (q+1) K} \frac{\partial P}{\partial x}$$

$$-\frac{\partial P}{\partial x} = \frac{Q 2^q (q+1) K}{H^{(q+1)} W}$$

Fluido ley de la potencia cuando n=1 (Fluido Newtoniano)

$$\left(\frac{\partial v_x}{\partial z}\right) = \left(\frac{1}{\mu} \frac{\partial p}{\partial x}\right) \left(\frac{1}{k} \frac{\partial p}{\partial x}\right)$$

$$v_x = \left(\frac{1}{2\mu} \frac{\partial p}{\partial x}\right) \left[\left(z - \frac{h(x)}{2}\right)^2 - \left(\frac{h(x)}{2}\right)^2 \right]$$

$$v_z = -\frac{h(x)^2}{4} \left(\frac{1}{k} \frac{E}{W}\right) \left[\frac{h(x)}{3} \left(\frac{\partial^2 h(x)}{\partial x^2}\right) + \left(\frac{\partial h(x)}{\partial x}\right)^2 \right]$$

$$\langle v_x \rangle = \frac{H^2}{12\mu} \frac{\partial P}{\partial x}$$

$$-\frac{\partial P}{\partial x} = \frac{12Q\mu}{H^3 W}$$

APENDICE B

Solución aproximada para un fluido ley de la potencia n y cuando n=1(fluido newtoniano)

Fluido ley de la potencia

$$v_z = \frac{\partial h}{\partial t} \sim \frac{PW}{E\tau_r}$$

$$\left(\frac{\partial h(x)}{\partial x}\right)^q \sim \left(\frac{PW}{EL}\right)^q$$

$$h\left(\frac{\partial^q h}{\partial x^q}\right) \sim \left(\frac{HPW}{EL^q}\right)$$

$$\frac{PW}{E\tau_r} \sim -\frac{H^q}{2^q q} \left(\frac{E}{KW}\right)^{\frac{1}{n}} \left[\frac{1}{q+1} \left(\frac{HPW}{EL^q}\right) + \left(\frac{PW}{EL}\right)^q \right]$$

$$\frac{1}{\tau_r} \sim \frac{H^q}{2^q (q+1)L^q} \left(\frac{E}{KW}\right)^{\frac{1}{n}}$$

$$\tau_r \sim \frac{2^q (q+1)L^q}{H^q} \left(\frac{KW}{E}\right)^{\frac{1}{n}}$$

$$\left(\frac{h(x)}{\theta}\right)^{q+1} \sim 2^q (q+1) \left(\frac{\left(\frac{x}{\varepsilon}\right)^q \left(\frac{KW}{E}\right)^{\frac{1}{n}}}{\tau_r}\right)$$

Fluido Newtoniano n=1

$$v_z = \frac{\partial h}{\partial t} \sim \frac{PW}{E\tau_r}$$

$$\left(\frac{\partial h(x)}{\partial x}\right)^2 \sim \left(\frac{PW}{EL}\right)^2$$

$$h\left(\frac{\partial^2 h}{\partial x^2}\right) \sim \left(\frac{HPW}{EL^2}\right)$$

$$\frac{PW}{E\tau_r} \sim -\frac{H^2}{4} \left(\frac{E}{\mu W}\right) \left[\frac{1}{3} \left(\frac{HPW}{EL^2}\right) + \left(\frac{PW}{EL}\right)^2 \right]$$

$$\frac{1}{\tau_r} \sim \frac{2}{12L^2} \left(\frac{E}{\mu W}\right)$$

$$\tau_r \sim \frac{12L^2}{H^2} \left(\frac{\mu W}{E}\right)$$

$$\left(\frac{h(x)}{\theta}\right)^3 \sim 12 \left(\frac{\left(\frac{x}{\varepsilon}\right)^2 \left(\frac{\mu W}{E}\right)}{\tau_r}\right)$$

APENDICE C

Características del fluido ley de la potencia

Es uno de los modelos más utilizados para caracterizar fluidos no newtonianos, pudiendo explicar el comportamiento newtoniano, dilatante y pseudoplástico dependiendo del valor de n . En este caso la inversa de n , llamado en algunos casos índice de pseudoplasticidad se utiliza normalmente como indicador de la dilatancia o pseudoplasticidad de una sustancia. Una de las desventajas de este modelo es la predicción de viscosidades muy elevadas a bajos esfuerzos de corte, lo cual podría suponer una drástica sobrevaloración en situaciones de flujo en las que la velocidad de deformación es muy baja.

El modelo es el siguiente:

$$\tau_{rz} = K\dot{\gamma}^n = K \left(-\frac{dv_z}{dr} \right)^n = \left[K \left(\frac{dv_z}{dr} \right)^{n-1} \right] \left(-\frac{dv_z}{dr} \right)$$

Donde K y n son parámetros empíricos, K es el índice de consistencia y n es el índice de comportamiento de flujo. El término entre corchetes se denomina “viscosidad aparente” y es evidente que no es constante, dependiendo directamente de la velocidad de corte, $\dot{\gamma}$.

Debido a que n determina precisamente el modo en que se desarrolla el flujo, si $n < 1$ el fluido se denomina pseudoplástico, estos fluidos fluyen más fácilmente aumentando la velocidad de deformación.

Por el contrario, cuando $n > 1$ la resistencia a fluir aumenta con un aumento de la velocidad de corte, y el fluido se denomina dilatante.

La mayoría de los fluidos no newtonianos son pseudoplásticos: alimentos (jugos y puré de frutas, salsas), polímeros fundidos (poliestireno, acrilonitrilo, polipropileno, etc.), cosméticos, latex, tinta de imprenta.