



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA
INGENIERÍA MECÁNICA – TERMOFLUIDOS

ANÁLISIS TEÓRICO DE UN MICROMEZCLADOR ELECTROKINÉTICO

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
DOCTOR EN INGENIERÍA

PRESENTA:
M. EN C. EDSON MICHAEL JIMENEZ DAMIAN

TUTORES PRINCIPALES
Dr. Federico Méndez Lavielle, Facultad de Ingeniería, UNAM
Dr. Juan Pablo Escandón Colin, SEPI-ESIME UA, IPN
COMITÉ TUTOR
Dr. José Roberto Zenit Camacho, I.I.M., UNAM
Dr. Oscar Eladio Bautista Godínez, SEPI-ESIME UA, IPN

Ciudad Universitaria, Cd. Mx.

enero 2020



Universidad Nacional
Autónoma de México



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:

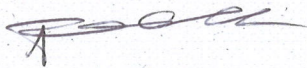
Presidente: Dr. José Roberto Zenit Camacho
Secretario: Dr. Lorenzo Alberto Martínez Suástegui
1 er. Vocal: Dr. Federico Méndez Lavielle
2 do. Vocal: Dr. Juan Pablo Escandón Colin
3 er. Vocal: Dr. Oscar Eladio Bautista Godínez

Lugar o lugares donde se realizó la tesis: Facultad de ingeniería, UNAM.

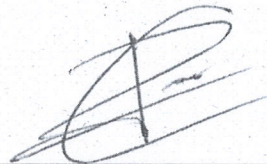
TUTORES DE TESIS:

Dr. Federico Méndez Lavielle

Dr. Juan Pablo Escandón Colin



FIRMA



FIRMA

Agradecimientos

Al Dr. Juan Pablo Escandón Colin, por las asesorías, por el invaluable tiempo dedicado en la dirección de esta tesis de doctorado y por sus consejos que han sido fundamentales para el cumplimiento de mis objetivos.

Al Dr. Federico Méndez Lavielle, por las aportaciones científicas al presente trabajo y escritura de artículos, y por todos sus consejos que me han ayudado a definir mis metas.

Al Dr. Oscar E. Bautista Godínez, por su colaboración en el planteamiento del presente tema de investigación y por sus aportaciones en la escritura de los artículos científicos.

Al Dr. José Roberto Zenit Camacho, por sus aportaciones en los comités tutoriales.

Al Dr. Lorenzo Alberto Martínez Suástegui, por su colaboración en la revisión de la tesis.

A la Universidad Nacional Autónoma de México, por darme la oportunidad de realizar mis estudios de doctorado.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología, por la beca otorgada durante mis estudios de doctorado.

Al proyecto SIP-20195892 con título: Análisis de un mezclador electrocinético bajo efectos viscoeléctricos y estéricos, del Instituto Politécnico Nacional

A mis amigos de la SEPI-ESIME UA, IPN.

Dedicatoria

A Dios, por ser quien me guía a cada instante y abre las puertas para continuar hacia nuevos horizontes.

A mis padres, por darme la vida, enseñarme el valor del trabajo y la perseverancia, y por brindarme el apoyo incondicional en toda esta etapa.

A mis hermanos por sus consejos y apoyo incondicional.

A Sandra, por todo su apoyo, comprensión, y por su paciencia en todo este proceso.

Índice general

Resumen	v
Abstract	VI
Lista de tablas	VII
Lista de figuras	VII
Nomenclatura	X
Justificación	XIII
Objetivos	XIV
1. Introducción	1
1.1. Motivación	1
1.2. Micromezcladores	2
1.2.1. Micromezcladores pasivos	3
1.2.2. Micromezcladores activos	4
1.3. Fenómenos electrocinéticos	7
1.3.1. Electroósmosis	8
1.3.2. Potencial de corriente	8
1.3.3. Electroforesis	8
1.3.4. Potencial de sedimentación	8
1.4. Fenómenos interfaciales	9
1.4.1. Doble capa eléctrica	9
1.4.2. Efecto viscoeléctrico	12
1.5. Estado del arte	12
2. Formulación del problema del micromezclador	15
2.1. Ecuaciones Gobernantes	15
2.1.1. Ecuación de Poisson-Boltzmann	15
2.1.2. Conservación de la masa	16
2.1.3. Conservación de la cantidad de movimiento	16
2.1.4. Ecuación convectivo-difusivo del transporte de masa	16
2.2. Modelo físico	16

2.3.	Ecuaciones gobernantes en coordenadas Cartesianas	17
2.4.	Consideraciones del modelo matemático	18
2.5.	Condiciones de frontera	19
2.6.	Análisis de órdenes de magnitud	20
2.7.	Modelo matemático adimensional	21
2.8.	Flujo volumétrico	22
3.	Metodología de solución numérica	23
3.1.	Construcción del modelo geométrico	23
3.2.	Definición de parámetros	24
3.3.	Incorporación de las ecuaciones gobernantes	25
3.3.1.	Conservación de corriente	25
3.3.2.	Flujo laminar	26
3.3.3.	Transporte de especies diluidas	27
3.3.4.	Construcción de la malla	28
3.3.5.	Estudio	28
3.4.	Resultados	28
3.4.1.	Campo de velocidad	29
3.4.2.	Presión	30
3.4.3.	Concentración	30
3.4.4.	Potencial eléctrico	30
3.4.5.	Exportar	31
4.	Análisis de resultados	33
4.1.	Campo del potencial eléctrico	34
4.2.	Campo de velocidad	37
4.2.1.	Caso I. Condiciones de entrada y salida para la presión adimensionalizada con $\bar{p}=\mathbf{0}$	37
4.2.2.	Caso II Condiciones de entrada con $\bar{\mathbf{u}}=\bar{\mathbf{u}}_{en}$ y a la salida con flujo desarrollado $\frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial \bar{x}}=\mathbf{0}$	45
4.3.	Transporte de masa de un soluto eléctricamente neutro	51
5.	Conclusiones	56
	Referencias	58

Resumen

El presente trabajo analiza la influencia de los efectos estéricos y viscoeléctricos sobre el mezclado de un soluto neutro con un flujo electroosmótico que pasa a través de un micromezclador electrocinético. El solvente se considera como una solución de un electrolito simétrico de un fluido newtoniano. Las ecuaciones de gobierno que describen el campo de flujo son la ecuación modificada de Poisson-Boltzmann para el potencial eléctrico, la conservación de masa y cantidad de movimiento, las cuales se resuelven numéricamente. En las paredes del canal, se consideran potenciales zeta arbitrarios y heterogéneos modulados mediante funciones sinusoidales que se controlan mediante un ángulo de fase, una amplitud y un número de onda. El uso de potenciales zeta arbitrarios conduce a considerar el efecto viscoeléctrico debido a la sensibilidad en las variaciones de la viscosidad adyacente a las paredes del canal. Además, la presencia de altas concentraciones iónicas y grandes tamaños iónicos efectivos que se generan por hidratación molecular, provocan una acumulación de iones en la doble capa eléctrica; por lo tanto, el estudio del efecto estérico es relevante en el presente trabajo. El campo de concentración de un soluto no cargado se analiza mediante la ecuación de naturaleza difusiva-convectiva del transporte de masa. Los resultados muestran que el efecto viscoeléctrico produce una reducción en la magnitud de la velocidad cuando los potenciales zeta aumentan, mientras que el efecto estérico contrarresta al fenómeno antes mencionado generando un incremento en la velocidad del flujo. Por otro lado, las recirculaciones y presiones dentro del micromezclador se inducen por la presencia de potenciales zeta heterogéneos en las paredes y que provocan el mezclado entre el soluto y el solvente. Finalmente, la eficiencia de la mezcla se mejora cuando se consideran números de Péclet bajos, alcanzando una distribución uniforme en la concentración del soluto a la salida del canal. Este estudio amplía el conocimiento de los movimientos electroosmóticos bajo efectos de campo para aplicaciones de mezcla.

Abstract

This work analyzes the influence of steric and viscoelectric effects on the mixed of a neutral solute with an electroosmotic flow through an electrokinetic micromixer. The solvent, is considered as a solution of a symmetric electrolyte of a newtonian fluid. The governing equations that describe the flow field are the modified Poisson-Boltzmann for electrical potential, mass conservation and momentum equations, which are solved numerically. In the walls of the channel, arbitrary and heterogeneous zeta potentials modulated by sinusoidal functions and that are controlled by a phase angle, amplitude and wave number, are considered. The use of arbitrary zeta potentials leads to consider the viscoelectric effect due to the sensitivity in the variations of the viscosity adjacent to the walls of the channel. In addition, the presence of high ionic concentrations and large effective ionic sizes that are generated by molecular hydration, cause a volume excluded by the accumulation of ions in the double electrical layer; therefore, the study of the steric effect is relevant in the present work. The concentration field of an uncharged solute is analyzed by the diffusive-convective equation of mass transport. The results show that the viscoelectric effect produces a reduction in the magnitude of the velocity when the zeta potentials increase, while the steric effect counteracts the aforementioned phenomenon generating an increase in the flow velocity. On the other hand, recirculations and pressures within the micromixer that are induced by the presence of heterogeneous zeta potentials in the walls and that cause the mixture between the solute and the solvent. Finally, the efficiency of the mixture is improved when low Peclet numbers are considered, reaching a uniform distribution in solute concentration at the channel outlet. This study broadens the knowledge of electroosmotic movements under field effects for mixing applications.

Lista de tablas

3.1. Parámetros adimensionales utilizados para la obtención de resultados del presente análisis.	25
4.1. Propiedades físicas y geométricas para la estimación de los parámetros adimensionales en el presente análisis.	33

Lista de figuras

1.1.	Aplicaciones en las tecnologías LOCs [1, 2].	2
1.2.	Tareas dentro de un dispositivo μ TAS [3].	3
1.3.	Micromezcladores pasivos [4].	3
1.4.	Micromezclador activo por perturbaciones de presión [5].	4
1.5.	Micromezclador activo por perturbaciones electrohidrodinámicas [6].	5
1.6.	Micromezclador activo por perturbaciones magnetohidrodinámicas [5].	6
1.7.	Micromezclador activo por perturbaciones acústicas [5].	6
1.8.	Micromezclador activo por perturbaciones electrocinéticas.	7
1.9.	Micromezclador electrocinético utilizando electrodos [5].	7
1.10.	Diagrama de un flujo electroosmótico.	8
1.11.	Diagrama de la doble capa eléctrica.	9
2.1.	Esquema del micromezclador electrocinético.	17
3.1.	Esquema de la geometría del mezclador electrocinético	24
3.2.	Esquema de la malla del mezclador electrocinético	28
3.3.	Visualización de los contornos de velocidad y líneas de corriente en el mezclador electrocinético.	29
3.4.	Visualización de los contornos de presión en el mezclador electrocinético.	30
3.5.	Visualización de los contornos de concentración del soluto del mezclador electrocinético.	31
3.6.	Visualización de los contornos de potencial eléctrico del mezclador electrocinético.	32
4.1.	Distribuciones del potencial eléctrico adimensional como función de las coordenadas (\bar{x}, \bar{y}) , con $\xi = 0.05$, $\bar{\zeta}_{1,2} = 6$, $\bar{\kappa} = 50$ y diferentes valores del número de onda, ángulo de fase y factor estérico; a) $n = 3$, $\omega = 0$, $\nu = 0$ b) $n = 3$, $\omega = 0$, $\nu = 0.05$, c) $n = 6$, $\omega = 0$, $\nu = 0$, d) $n = 6$, $\omega = 0$, $\nu=0.05$, e) $n = 3$, $\omega = 0.5\pi$, $\nu = 0$, f) $n = 3$, $\omega = 0.5\pi$, $\nu=0.05$, g) $n = 10$, $\omega = \pi$, $\nu = 0$ y h) $n = 10$, $\omega = \pi$, $\nu=0.05$	34
4.2.	Perfiles del potencial eléctrico para diferentes posiciones de los ejes \bar{x} e \bar{y} con $\xi = 0.05$, $\bar{\zeta}_{1,2} = 6$, $\bar{\kappa} = 50$, $\nu = 0$ (líneas continuas), $\nu = 0.05$ (líneas discontinuas) y diferentes valores del número de onda y ángulo de fase; a-b) $n = 3$, $\omega = 0$; c-d) $n = 6$, $\omega = 0$; e-f) $n = 3$, $\omega = 0.5\pi$ y g-h) $n = 10$, $\omega = \pi$	36

4.3.	Contornos de velocidad adimensional como función de las coordenadas (\bar{x}, \bar{y}) , con $\xi = 0.05$, $\bar{\zeta}_{1,2} = 6$, $\bar{\kappa} = 50$ y diferentes valores de los parámetros viscoelásticos y estéricos, número de onda y ángulo de fase; a) $\bar{f} = 0$, $\nu = 0$ $n = 3$, $\omega = 0$, b) $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0$, $n = 3$, $\omega = 0$, c) $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0.05$, $n = 3$, $\omega = 0$, d) $\bar{f} = 0$, $\nu = 0$, $n = 6$, $\omega = 0$, e) $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0$, $n = 6$, $\omega = 0$, f) $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0.05$ $n = 6$, $\omega = 0$, g) $\bar{f} = 0$, $\nu = 0$ $n = 3$, $\omega = 0.5\pi$, h) $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0$, $n = 3$, $\omega = 0.5\pi$, i) $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0.05$, $n = 3$, $\omega = 0.5\pi$, j) $\bar{f} = 0$, $\nu = 0$ $n = 10$, $\omega = 0.5\pi$, k) $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0$, $n = 10$, $\omega = 0.5\pi$ y l) $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0.05$, $n = 10$, $\omega = \pi$	39
4.4.	Perfiles de velocidad adimensional correspondientes a la Fig. 4.3 como función de la coordenada \bar{y} y para diferentes posiciones de \bar{x} ; a-c) $n = 3$, $\omega = 0$, d-f) $n = 6$, $\omega = 0$, g-i) $n = 3$, $\omega = 0.5\pi$ y j-l) $n = 10$, $\omega = \pi$	41
4.5.	Presión inducida adimensional como función de las coordenadas (\bar{x}, \bar{y}) , con $\xi = 0.05$, $\bar{\zeta}_{1,2} = 6$, $\bar{\kappa} = 50$, $\bar{f} = 0$ y $\nu = 0$; a) $n = 3$, $\omega = 0$, b) $n = 6$, $\omega = 0$, c) $n = 3$, $\omega = 0.5\pi$, y d) $n = 10$, $\omega = \pi$	42
4.6.	Perfiles de presión inducida adimensional como función del eje \bar{x} , con $\xi = 0.05$, $\bar{\zeta}_{1,2} = 6$, $\bar{\kappa} = 50$, y diferentes valores de \bar{f} , ν ; a) $n = 3$, $\omega = 0$, b) $n = 6$, $\omega = 0$, c) $n = 3$, $\omega = 0.5\pi$, d) $n = 10$, $\omega = \pi$	43
4.7.	Flujo volumétrico adimensional como función de a) potencial zeta $\bar{\zeta} = \bar{\zeta}_{1,2}$, b) ángulo de fase ω , c) parámetro electrocinético y d) parámetro viscoelástico $\bar{\kappa}$, con diferentes valores de n y ν	44
4.8.	Contornos de velocidad adimensional como función de las coordenadas (\bar{x}, \bar{y}) , con $\xi = 0.05$, $\bar{\zeta}_{1,2} = 6$, $\bar{\kappa} = 50$ y diferentes valores de los parámetros viscoelásticos y estéricos, número de onda y ángulo de fase; a) $\bar{f} = 0$, $\nu = 0$ $n = 3$, $\omega = 0$, b) $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0$, $n = 3$, $\omega = 0$, c) $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0.05$, $n = 3$, $\omega = 0$, d) $\bar{f} = 0$, $\nu = 0$, $n = 6$, $\omega = 0$, e) $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0$, $n = 6$, $\omega = 0$, f) $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0.05$ $n = 6$, $\omega = 0$, g) $\bar{f} = 0$, $\nu = 0$ $n = 3$, $\omega = 0.5\pi$, h) $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0$, $n = 3$, $\omega = 0.5\pi$, i) $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0.05$, $n = 3$, $\omega = 0.5\pi$, j) $\bar{f} = 0$, $\nu = 0$ $n = 10$, $\omega = 0.5\pi$, k) $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0$, $n = 10$, $\omega = 0.5\pi$ y l) $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0.05$, $n = 10$, $\omega = \pi$	47
4.9.	Perfiles de velocidad adimensional correspondientes a la Fig. 4.8 como función de la coordenada \bar{y} y para diferentes posiciones de \bar{x} ; a-c) $n = 3$, $\omega = 0$, d-f) $n = 6$, $\omega = 0$, g-i) $n = 3$, $\omega = 0.5\pi$ y j-l) $n = 10$, $\omega = \pi$	49
4.10.	Presión inducida adimensional como función de las coordenadas (\bar{x}, \bar{y}) , con $\xi = 0.05$, $\bar{\zeta}_{1,2} = 6$, $\bar{\kappa} = 50$, $\bar{f} = 0$ y $\nu = 0$; a) $n = 3$, $\omega = 0$, b) $n = 6$, $\omega = 0$, c) $n = 3$, $\omega = 0.5\pi$, y d) $n = 10$, $\omega = \pi$	50
4.11.	Perfiles de presión inducida adimensional como función del eje \bar{x} , con $\xi = 0.05$, $\bar{\zeta}_{1,2} = 6$, $\bar{\kappa} = 50$, y diferentes valores de \bar{f} , ν ; a) $n = 3$, $\omega = 0$, b) $n = 6$, $\omega = 0$, c) $n = 3$, $\omega = 0.5\pi$, d) $n = 10$, $\omega = \pi$	51
4.12.	Distribución de la concentración adimensional como función de las coordenadas (\bar{x}, \bar{y}) , correspondientes a la Fig. 4.3 (figuras del lado izquierdo (a, c, e, g)) y Fig. 4.8 (figuras del lado derecho (b, d, f, h)); cuando $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0.05$ y $Pe_D = 500$	52
4.13.	Perfiles de concentración como función del eje transversal \bar{y} , correspondientes a la Fig. 4.12 con $\bar{\kappa} = 50$, $\bar{\zeta}_{1,2} = 6$, $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0.05$ y $Pe_D = 500$. a) Caso I, b) Caso II.	53

4.14. Perfiles de concentración como función del eje transversal \bar{y} , con $\bar{\kappa} = 50$, $\bar{\zeta}_{1,2} = 6$, $\omega = 0$ y diferentes valores de \bar{f} , ν , n y Pe_D . a) Caso I, b) Caso II.	54
4.15. Índice de mezcla como función del número de Péclet Pe_D con $\bar{\kappa} = 50$, $\bar{\zeta}_{1,2} = 6$, $\omega = 0$, y diferentes valores de \bar{f} , ν y n . a) Caso I, b) Caso II.	55

Nomenclatura

a	tamaño del ión, nm
e	carga del electrón, C
c	concentración, M
\bar{c}	concentración adimensional
D	coeficiente de difusión del soluto, m^2s^{-1}
\mathbf{E}	vector de campo eléctrico, Vm^{-1}
E_x	campo eléctrico aplicado en la dirección x , Vm^{-1}
f	coeficiente viscoeléctrico, m^2V^{-2}
\bar{f}	coeficiente viscoeléctrico adimensional
f_e	fuerzas debidas al efecto del campo eléctrico, Nm^{-3}
f_g	fuerzas debidas al efecto del campo gravitacional, Nm^{-3}
H	alto del microcanal, m
k_B	constante de Boltzmann, JK^{-1}
L	longitud del microcanal, m
n_0	número de concentración iónica de la solución, m^{-3}
n	número de onda
p	presión, Pa
\bar{p}	presión adimensional
Pe_D	número de Péclet difusivo
Re	número de Reynolds
T	temperatura, K
u, v	componentes de la velocidad del fluido en las direcciones x e y , respectivamente, ms^{-1}
\bar{u}, \bar{v}	componentes de la velocidad adimensional del fluido en las direcciones \bar{x} e \bar{y} , respectivamente
\mathbf{V}	vector velocidad, ms^{-1}
x, y	coordenadas cartesianas, m
\bar{x}, \bar{y}	coordenadas cartesianas adimensional
z	valencia del electrolito
<i>Símbolos griegos</i>	
ϵ	constante dieléctrica, $\text{CV}^{-1}\text{m}^{-1}$
ζ	potencial zeta, V
$\bar{\zeta}$	potencial zeta adimensional
η_0	viscosidad del fluido en ausencia de un campo eléctrico, Nsm^{-2}
η	viscosidad adimensional del fluido dependiente de un campo eléctrico
κ	inverso de la longitud de Debye, m^{-1}
κ^{-1}	longitud de Debye, m
$\bar{\kappa}$	parámetro electrocinético

ν	factor estérico
ρ	densidad de masa, kgm^{-3}
ρ_e	densidad de carga eléctrica neta, Cm^{-3}
ϕ	potencial eléctrico en la dirección x , V
Φ	potencial eléctrico total, V
ψ	potencial eléctrico en la doble capa eléctrica, V
$\bar{\psi}$	potencial eléctrico adimensional
ω	ángulo de desfase

Subíndices

c	característica
-----	----------------

Justificación

Debido al acelerado avance en la miniaturización de dispositivos microfluídicos en donde se emplean micromezcladores electrocinéticos, la comunidad científica ha realizado diversas investigaciones sobre la mezcla de solutos en fluidos. Estos estudios utilizan diferentes configuraciones como el uso de incrustación de electrodos en las paredes del microcanal y potenciales zeta heterogéneos, para la generación de recirculaciones que propicien una mejora en la mezcla. El incremento de las fuerzas electroosmóticas para producir dichas recirculaciones, se pueden obtener incrementando los potenciales zeta. Sin embargo, este aumento conlleva a variaciones de la viscosidad en las cercanías de las paredes del microcanal, por lo que su estudio debe ser considerado. También, en aplicaciones de mezclado, es común el uso de concentraciones relativamente altas que causan una acumulación de iones en la capa compacta o de Stern en la doble capa eléctrica. En este contexto, los estudios para aplicaciones de mezcla presentes en la literatura científica toman en cuenta diferentes enfoques activos para crear y mejorar la mezcla de un soluto en un flujo electroosmótico a través de recirculaciones inducidas, y ciertamente hay implicaciones pertinentes como las propuestas por el presente trabajo que aún no han sido abordadas por la comunidad científica. Por lo tanto, y debido a que los efectos viscoeléctricos y estéricos junto con el uso de potenciales zeta arbitrarios y heterogéneos no se han tratado en el estudio hidrodinámico de los flujos electroosmóticos ni en la concentración de un soluto neutro, esta investigación tiene como objetivo cubrir estos aspectos en este tipo de flujos considerando microcanales donde el medio continuo sigue siendo aplicable.

Objetivos

General

Desarrollar un estudio paramétrico sobre el mezclado de un soluto neutro en un flujo electroosmótico de un fluido newtoniano a través de un micromezclador electrocinético, en donde las ecuaciones de gobierno correspondientes para predecir el campo de flujo y concentración, se resuelven de manera numérica para determinar el índice de mezcla y las implicaciones que tienen los efectos viscoeléctricos y estéricos sobre ella.

Específicos

- Revisar el estado del arte concerniente a mezcladores electrocinéticos en microcanales.
- Establecer formulaciones matemáticas basadas en las ecuaciones gobernantes para describir el campo de flujo y concentración de un soluto, considerando efectos estéricos y viscoeléctricos, así como las variaciones del potencial zeta en las paredes.
- Establecer las hipótesis aplicables al fenómeno electrocinético de estudio.
- Realizar un análisis de órdenes de magnitud para establecer las escalas características que servirán en la adimensionalización de las ecuaciones gobernantes y constitutivas, así como sus respectivas condiciones de frontera.
- Identificar los parámetros adimensionales que surgen del modelo matemático adimensionalizado y que sirvan para el estudio paramétrico.
- Resolver numéricamente el modelo matemático adimensional.
- Realizar el análisis de los resultados.

Capítulo 1

Introducción

En este capítulo, se realiza una breve descripción de los conceptos generales del presente estudio, iniciando con la motivación del trabajo, los tipos de micromezcladores y su respectiva clasificación en pasivos y activos. Posteriormente, se enlistan los fenómenos electrocinéticos que surgen debido a la presencia de dos fases cargadas. Después, se hace una descripción detallada de los fenómenos interfaciales, que son el efecto estérico y viscoeléctrico, que servirán como marco teórico para el modelado del presente trabajo de tesis. Finalmente, se lleva a cabo una revisión del estado del arte, comenzando con los tipos de microcanales y fluidos usados en flujos electroosmóticos, los estudios en las cuales se consideran los efectos viscoeléctricos y estéricos, las aplicaciones de mezclado y los tipos de heterogeneidades de los potenciales zeta.

1.1. Motivación

El término de sistemas microfluídicos se refiere a sistemas con características de escala de longitud que están en el orden de micrómetros [7]. La miniaturización de dispositivos para aplicaciones médicas, químicas y biológicas ha sido de gran importancia en los últimos años en tareas como la preparación, el transporte, la separación, la detección y la mezcla de diferentes fluidos [8]. Estas tareas se pueden llevar a cabo en dispositivos llamados laboratorios en un chip LOC, por sus siglas en el idioma inglés o micro sistemas de análisis total (μ TAS por sus siglas en inglés), y ofrecen ventajas como mayor eficiencia, reducción de espacios y costos operativos, así como un mejor control durante el manejo de las muestras [9], en comparación con laboratorios convencionales. La Fig. 1.1 muestra algunos de los dispositivos usados en las tecnologías LOCs, que se han implementando en los procesos de cristalización de nanopartículas, polimerización [10], síntesis orgánica [11], plegamiento de proteínas, cultivos de células [1], optimización de bioprocesos [12], diagnósticos clínicos [2], entre otras aplicaciones. De manera general en un μ TAS se llevan a cabo las siguientes funciones secuenciales: introducción de muestras, inyección, mezcla, reacción, dispensación, separación y detección a través de una serie de canales a escala micrométrica [3], como se muestra en la Fig. 1.2. Aquí, la muestra de estudio se introduce a través del puerto 1 y posteriormente interactúa con un reactivo inyectado a través del puerto 2. La muestra se mezcla con el reactivo para facilitar el proceso de reacción química posterior. Finalmente, el producto reaccionado se distribuye en un canal de separación para la separación y detección de componentes utilizando instrumentación óptica. Así, las tareas y aplicaciones antes mencionadas requieren de

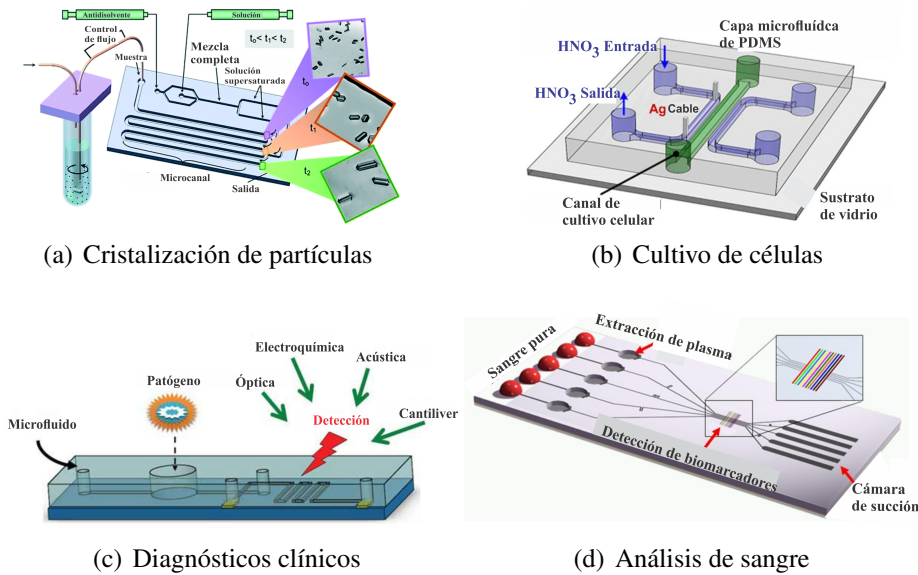


Figura 1.1: Aplicaciones en las tecnologías LOCs [1, 2].

fuerzas externas para manipular los fluidos que se mueven dentro de los dispositivos, por lo que las fuerzas mecánicas se generan por actuadores, válvulas, calentadores, sensores, microbombas, etc. Sin embargo, debido a la dificultad de fabricar piezas móviles en dispositivos a pequeña escala [13], surgió un gran interés en estudios relacionados con la electrocinética, que se refiere a la migración de partículas en una suspensión con la presencia de un campo eléctrico aplicado y que han sido muy útiles para las aplicaciones anteriores. Uno de los fenómenos estudiados por la electrocinética es la electroósmosis, que es el movimiento de una solución electrolítica en relación con una superficie cargada estacionaria cuando se aplica un campo eléctrico externo y actúa en una región de alta concentración de iones, llamada doble capa eléctrica, EDL por sus siglas en inglés [14, 15]. De esta manera la generación de fuerzas mediante la electrocinética ha desplazado a los dispositivos puramente mecánicos, ya que mediante los primeros dispositivos pueden hacerse portátiles reemplazando la fuente de alimentación con una batería pequeña [3].

1.2. Micromezcladores

Debido al aumento exponencial de la investigación sobre la miniaturización y las aplicaciones de la microfluídica, destaca la importancia de la continua comprensión de la teoría y de los mecanismos que rigen las tareas de mezclado a nivel de microescala. La tarea de mezclado consiste en la combinación de dos o más soluciones de manera rápida y precisa, que se realiza por los denominados micromezcladores, los cuales son de los dispositivos más importantes en los sistemas microfluídicos [16]. El mezclado en dispositivos microfluídicos es difícil de obtener debido a los pequeños números de Reynolds (Re). Siendo $Re = \frac{\rho u_c L_c}{\mu}$, y para aplicaciones típicas de dispositivos microfluídicos, la densidad del fluido $\rho \sim 10^{-3} \text{ kgm}^{-3}$, la velocidad característica $u_c \sim 10^{-3} \text{ ms}^{-1}$ y menores, la longitud característica $L_c \sim 10^{-4} \text{ m}$ y menores, y la viscosidad del orden $\eta_0 \sim 10^{-3} \text{ Nm}^{-2}\text{s}$, el orden de magnitud del número de Reynolds es $Re < 1$, por lo que los efec-

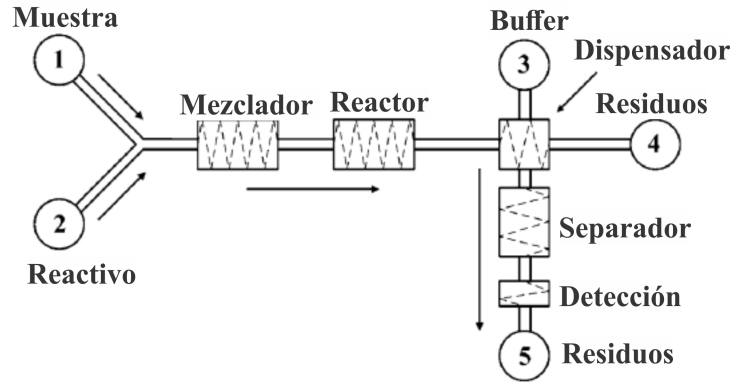


Figura 1.2: Tareas dentro de un dispositivo μ TAS [3].

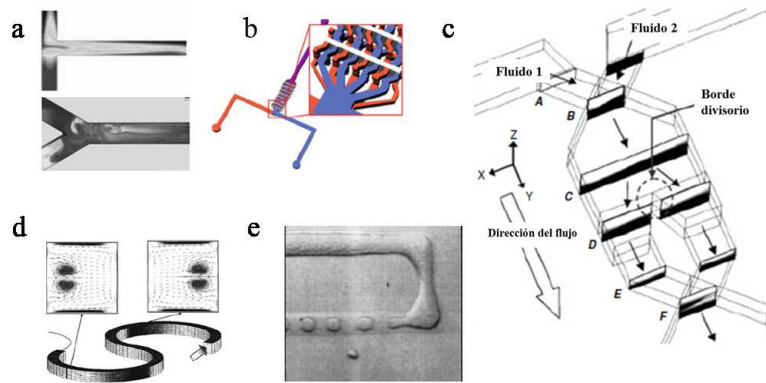


Figura 1.3: Micromezcladores pasivos [4].

tos viscosos dominan sobre los inerciales. En estos casos, comúnmente, la mezcla solo se puede lograr por difusión molecular o advección caótica [17]. Por esta razón, la comunidad científica ha estudiado diferentes diseños de micromezcladores para un mezclado eficiente, clasificándolos en activos y pasivos [18].

1.2.1. Micromezcladores pasivos

El proceso de mezclado en micromezcladores pasivos, no requieren de fuentes de energía externas y no necesitan partes móviles ni actuadores, generalmente se basan en la difusión o la advección caótica y se inducen al conducir los fluidos a través de microcanales con geometrías particulares y estriadas para crear vorticidades en el flujo [19]. En un micromezclador pasivo, la mezcla difusiva se mejora por el incremento del área interfacial entre el soluto y el solvente, el decremento del espesor de estriación, los coeficientes altos de difusión y gradientes altos de concentración, estos últimos se logran con pequeñas longitudes de mezclado. En la Fig. 1.3 se observan algunos ejemplos de los diferentes tipos de micromezcladores pasivos [4]. La Fig. 1.3a muestra un micromezclador en forma de T- y Y-, respectivamente, en donde la mezcla se obtiene por la inyección de dos líquidos que entran en contacto a través del arreglo del microcanal y la mezcla solo depende de

la difusión de especies. El mezclado que ocurre en los arreglos de tipo T- y Y-, se mejora mediante el uso de diseños más complejos que dividen las corrientes de entrada en subcorrientes que se unen posteriormente, a estos se les conoce como micromezcladores de laminación paralela, Fig. 1.3*b*. Similares a los de laminación paralela, son los llamados micromezcladores de laminación secuencial o SAR (split-and-recombine por sus siglas en el idioma inglés), como se muestra en Fig. 1.3*c*, con la diferencia que los procesos de división y unión son secuenciales. La Fig. 1.3*d* presenta un micromezclador de advección caótica, en donde las perturbaciones se inducen por medio de una secuencia de curvas en el microcanal. Por su parte la Fig. 1.3*e* muestra un micromezclador por goteo, el cual consiste en la introducción de líquidos inmiscibles para formar gotas que crean un campo de flujo interno, generando así perturbaciones que favorecen el mezclado. Es importante resaltar que una desventaja de los micromezcladores pasivos, es la complejidad de fabricación a escalas micrométricas y el requerimiento de una larga longitud de mezcla.

1.2.2. Micromezcladores activos

Los micromezcladores activos se basan en perturbaciones que se inducen por la aplicación de fuerzas externas para generar vórtices dentro de un flujo laminar [20]. Basados en el tipo de perturbaciones externas, algunas clasificaciones dadas por Nguyen [5] se muestran a continuación.

1.2.2.1. Perturbación por presión

El mezclado producido por perturbaciones de presión es uno de los primeros micromezcladores activos que se realizaron debido a su simplicidad. En esta clasificación de micromezcladores, las perturbaciones que se inducen sobre el flujo, son creados por actuadores que pueden ser neumáticos, termoneumáticos, termomecánicos, piezoeléctricos, electrocinéticos, electromagnéticos, fuerzas capilares, electroquímicos y químicos. En la Fig. 1.4, se muestra un modelo de configuración típica de mezclador con perturbaciones generados por presión. Aquí, el solvente y el soluto entran por los extremos del canal en forma de Y, los cuales se encuentran en el canal horizontal y fluyen a una velocidad media constante u_0 en dirección axial. En las cavidades transversales, se introducen flujos de fluidos a presión que perturban al solvente y al soluto favoreciendo el mezclado entre ambos.

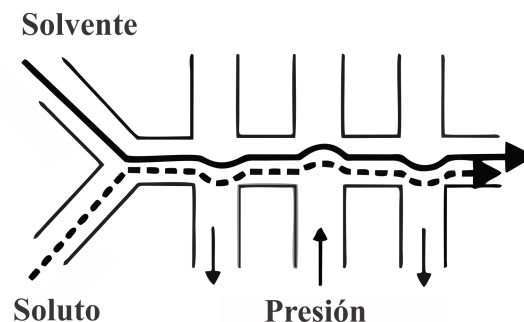


Figura 1.4: Micromezclador activo por perturbaciones de presión [5].

1.2.2.2. Perturbación electrohidrodinámica

Aunque los efectos electrocinéticos se consideran subcampos de la electrohidrodinámica (EHD), en este tipo de micromezcladores solo se consideran sistemas de fluidos con al menos un fluido dieléctrico que generalmente son inmiscibles. Por lo tanto, mezclar estos fluidos conducirá a una emulsión. Hay muchas aplicaciones prácticas, como la extracción líquida orgánico-acuosa para la purificación de ADN. La mezcla o división se logra al perturbar la interfaz líquido/líquido con un campo eléctrico. La discontinuidad de las propiedades eléctricas a través de la interfaz afecta el equilibrio de fuerza en la interfaz fluido/fluido y conduce a la inestabilidad. En la Fig. 1.5, se muestra un ejemplo de micromezclador electrohidrodinámico realizado por El Moctar et al. [6], en donde dos fluidos con conductividades y permitividades eléctricas diferentes ingresan al microcanal en forma de T por cada uno de sus brazos. Cuando estos fluidos se encuentran en el microcanal longitudinal, se genera un salto en la conductividad eléctrica y/o permitividad en la interfaz entre los dos fluidos, que no produce efecto mientras el campo eléctrico esté ausente. Sin embargo, a medida que los fluidos ingresan a la zona de influencia del campo eléctrico cerca de un par de electrodos transversales, estos se sujetan a una fuerza eléctrica que si su magnitud es lo suficientemente grande, crea un flujo secundario transversal a través de la interfaz entre los dos fluidos, por lo tanto, la interfaz se desestabiliza y promueve el proceso de mezclado.

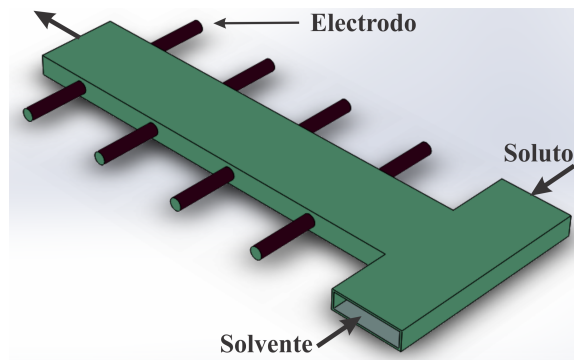


Figura 1.5: Micromezclador activo por perturbaciones electrohidrodinámicas [6].

1.2.2.3. Perturbación magnetohidrodinámica

La Fig. 1.6 muestra el concepto esquemático de un micromezclador activo basado en la inestabilidad magnetohidrodinámica (MHD). Los electrodos interdigitados están conectados a una fuente de alimentación de corriente continua. Si el fluido es un electrolito, hay una densidad de corriente J entre un par de electrodos. Si el líquido se somete a un campo magnético externo con la densidad B como se muestra en la Fig. 1.6, resulta una fuerza de Lorentz [21].

1.2.2.4. Perturbación acústica

Un disco de material piezoeléctrico como se muestra en la Fig. 1.7, es a menudo el actuador de elección en dispositivos microfluídicos, debido a su simplicidad en la implementación y la alta eficiencia energética. Otra ventaja clave del actuador piezoeléctrico es la alta frecuencia de actuación. La alta frecuencia genera energía acústica, que a su vez induce un flujo secundario

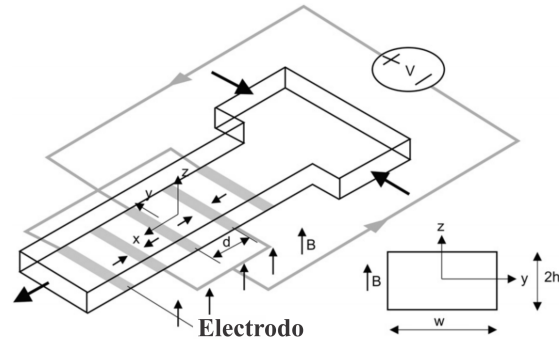


Figura 1.6: Micromezclador activo por perturbaciones magnetohidrodinámicas [5].

en una cámara de mezcla. Se puede inducir una perturbación acústica eligiendo la frecuencia de actuación en los modos resonantes de una membrana.

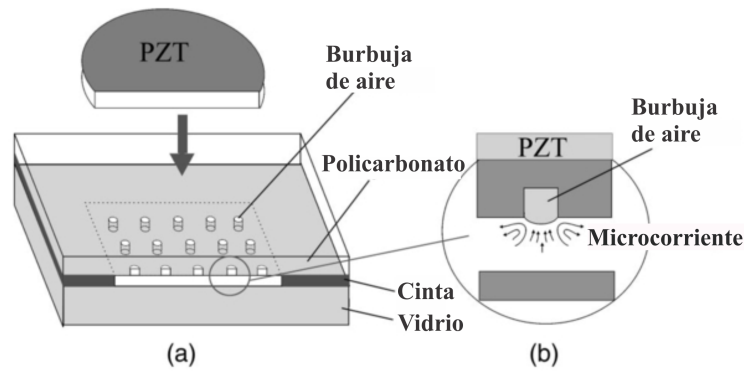


Figura 1.7: Micromezclador activo por perturbaciones acústicas [5].

1.2.2.5. Perturbación electrocinética

Los parámetros relevantes que afectan el flujo electrocinético son las propiedades electrohidrodinámicas del fluido, como la conductividad y la permitividad, el campo eléctrico y los potenciales zeta en las paredes del canal como se muestra en la Fig. 1.8. La consideración de los parámetros antes mencionados, conducirán a la generación de perturbaciones en un flujo electrocinético. La perturbación electrocinética en una red de canales impulsada por electroósmosis se puede utilizar para mejorar la mezcla. La perturbación electrocinética ocurre cuando las fuerzas electroosmóticas necesitan trabajar contra las fuerzas electroviscosas en el flujo. Mientras que la fuerza electroosmótica se genera en la doble capa eléctrica debido a fuerzas electrostáticas, la fuerza electroviscosa es causada por gradientes de carga en el fluido. En general, la inestabilidad electrocinética se puede clasificar como inestabilidades convectivas y absolutas. En la inestabilidad convectiva, la perturbación introducida en la entrada del sistema se propaga solo aguas abajo en la dirección del flujo. Un sistema convectivamente inestable es físicamente un amplificador de perturbaciones. En inestabilidad absoluta, la perturbación se extiende en ambas direcciones: aguas abajo y aguas arriba. Las perturbaciones debido a campos eléctricos y potenciales zeta en las paredes del microcanal, se explican de mejor manera a continuación.

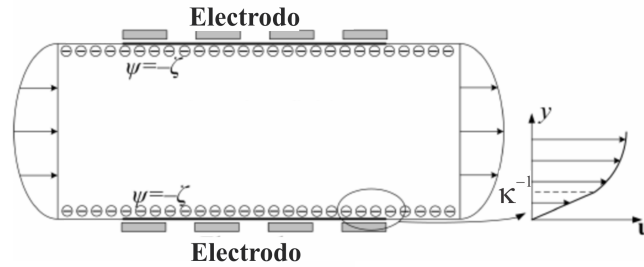


Figura 1.8: Micromezclador activo por perturbaciones electrocinéticas.

Inestabilidad causada por la variación del campo eléctrico.

Las perturbaciones en un micromezclador pueden ser inducidas por un flujo transversal periódico debido a un campo eléctrico similar al caso de la inestabilidad hidrodinámica. En un campo eléctrico alto, el flujo se vuelve inestable con un comportamiento caótico tridimensional. Por lo tanto, un campo eléctrico de corriente alterna también puede aplicarse en la dirección del flujo para crear inestabilidad y mejorar la mezcla.

Inestabilidad causada por la variación de potenciales zeta.

El flujo electrocinético pulsante también se puede generar manteniendo constante el campo eléctrico mientras se varía el potencial zeta en la pared del canal. El potencial zeta en las paredes del canal puede controlarse mediante electrodos incrustados como se observa en la Fig. 1.9 y por modificaciones químicas utilizando patrones de carga superficial que pueden modelarse usando potenciales zeta periódicos en las paredes del microcanal [22, 23].

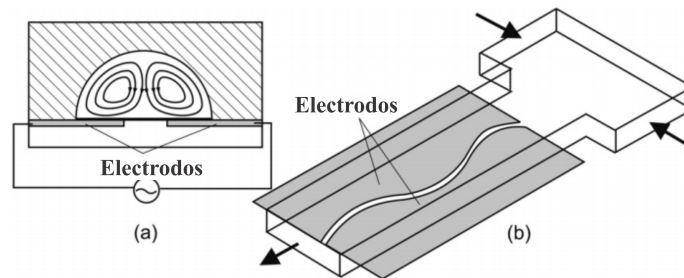


Figura 1.9: Micromezclador electrocinético utilizando electrodos [5].

1.3. Fenómenos electrocinéticos

La electrociética comprenden los fenómenos en los que un líquido se mueve tangencialmente a una superficie cargada [24]. El fenómeno electrocinético ocurre cuando bajo la aplicación de un campo eléctrico, los iones disueltos en un sistema coloidal experimentan una migración neta hacia una superficie cargada transportando disolvente juntamente con ellos, causando así el movimiento del solvente [14]. Algunos de los fenómenos que ocurren como resultado del movimiento relativo entre fases cargadas y electrólitos que se describen a continuación.

1.3.1. Electroósmosis

El flujo electroosmótico se genera debido a las interacciones de iones en el EDL con un campo eléctrico aplicado externamente. La densidad iónica distinta de cero dentro de la doble capa eléctrica da como resultado una migración neta de iones hacia el electrodo con carga opuesta, arrastrando el fluido viscoso con él [25]. La Fig. 1.10, muestra el fenómeno electroosmótico.

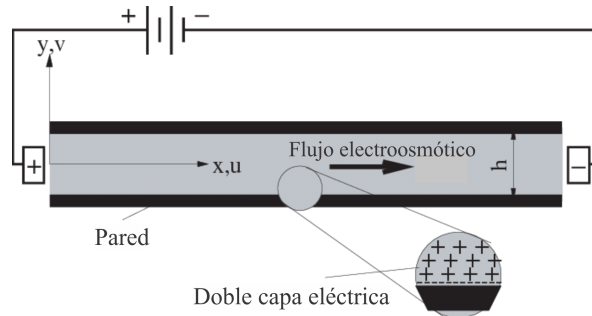


Figura 1.10: Diagrama de un flujo electroosmótico.

1.3.2. Potencial de corriente

El potencial de corriente es opuesto a la electroósmosis. Cuando una solución electrolítica se ve obligada a fluir a través de un capilar estacionario o un tapón poroso, se producirá una diferencia de potencial eléctrico entre los dos extremos del tapón capilar o poroso. Esta diferencia de potencial eléctrico se conoce como potencial de corriente, lo que significa que el líquido transporta los iones con la carga opuesta a la superficie, dando lugar a una corriente de transmisión, lo que lleva a la acumulación de carga en los extremos y un campo eléctrico [26].

1.3.3. Electroforesis

La electroforesis es un término general que describe la migración y separación de partículas cargadas (iones) bajo la influencia de un campo eléctrico. Un sistema electroforético consiste en dos electrodos de carga opuesta (ánodo, cátodo), conectados por un medio conductor llamado electrolito. El efecto de separación en las partículas iónicas resulta de diferencias en su velocidad, que es el producto de la movilidad de la partícula y la intensidad del campo [27].

1.3.4. Potencial de sedimentación

El potencial de sedimentación se debe al campo eléctrico creado por partículas cargadas que se asientan debido a un campo gravitacional o a un campo de fuerza centrífuga. Esto significa que cuando se asientan, las partículas cargadas dejan los iones con la carga opuesta a ellos en su lugar original, lo que hace que las cargas positivas y negativas se separen entre sí [26].

1.4. Fenómenos interfaciales

1.4.1. Doble capa eléctrica

La carga superficial de la fase dispersa influye en la distribución de iones cercanos en el medio de dispersión. Los iones de carga opuesta (contraiones) son atraídos hacia la superficie, y los iones de carga similar (coiones) son repelidos lejos de la superficie. Esto, conduce a la formación de una doble capa eléctrica compuesta de la superficie cargada y un exceso neutralizante de contraiones sobre los coiones. La teoría de la doble capa eléctrica se ocupa de esta distribución de iones y, por lo tanto, de la magnitud de los potenciales eléctricos, que se producen en las inmediaciones de la superficie cargada [26]. De manera general, una doble capa eléctrica es la capa que rodea una partícula de fase dispersa, que incluye los iones adsorbidos en la superficie de la partícula y una película del medio de dispersión contracargado como se muestra en la Fig. 1.11. La doble capa eléctrica es eléctricamente neutra y consta de tres partes [28]:

1. **Carga superficial:** iones cargados (comúnmente negativos) adsorbidos en la superficie de la partícula.
2. **Capa de Stern:** contraiones (cargados frente a la carga superficial), atraídos por la superficie de la partícula y estrechamente unidos a ella por la fuerza electrostática.
3. **Capa difusa:** una película del medio de dispersión (disolvente) adyacente a la partícula. La capa difusa contiene iones libres con una mayor concentración de los contraiones. Los iones de la capa difusa se ven afectados por la fuerza electrostática de la partícula cargada.

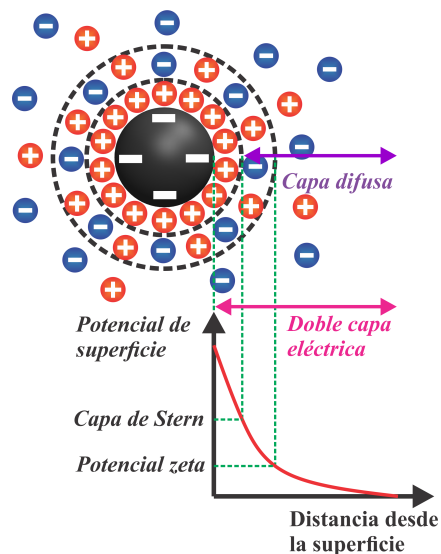


Figura 1.11: Diagrama de la doble capa eléctrica.

El potencial eléctrico dentro de la doble capa eléctrica tiene su valor máximo en la superficie de la partícula (capa de Stern) y cae con el aumento de la distancia desde la superficie llegando a cero en el límite de la doble capa eléctrica y fuera de ella. La extensión de la EDL se puede predecir aproximadamente por la longitud de Debye (κ^{-1}), que se define como la distancia desde la pared,

donde la energía del potencial electrocinético es igual a la energía térmica [25]. La longitud de Debye depende de la concentración molar del fluido ionizado, y su espesor está dado por

$$\kappa = \sqrt{\frac{e^2 \sum_i n_i z_i^2}{\epsilon k_B T}}, \quad (1.1)$$

donde n es la concentración, k_B es la constante de Boltzmann, e es la carga del electrón, z es la valencia, T es la temperatura absoluta y ϵ la permitividad del fluido.

1.4.1.1. Efecto estérico

Comúnmente, en los trabajos de investigación de flujos electroosmóticos, generalmente se consideran a los iones como cargas puntuales. Aunque esto es suficientemente adecuado para soluciones diluidas, puede dar lugar a errores significativos en la predicción del campo de potencial eléctrico en presencia de altas concentraciones iónicas, especialmente cuando se tienen potenciales zeta arbitrarios. La importancia de los efectos del tamaño iónico se determina por la fracción de volumen de los iones en masa, usualmente llamado factor estérico. La fracción de volumen medio de cada ion en la masa está dado por $\nu = a^3 n_0$. En esta relación, n_0 es la concentración iónica para condiciones neutras y a denota el tamaño iónico efectivo [29]. Aunque el tamaño iónico típicamente es del orden de Angstroms, el parámetro a puede tomar valores tan altos (nanómetros), debido a los efectos de hidratación y correlaciones ion-ion. Suponiendo un tamaño iónico efectivo de 2 nm el factor estérico llega a ser cercano a 0.24 para una concentración iónica de 50 mol m⁻³. Por lo tanto, el factor estérico puede ser bastante significativo para algunas situaciones prácticas. En la literatura se han reportado trabajos con potenciales zeta de 100 mV y más altos que con la combinación de soluciones con concentraciones altas propician y la consideración del factor estérico. En este contexto, Bikerman [30] propuso un modelo simple para tomar en cuenta el tamaño finito de iones y moléculas solventes. El modelo de Bikerman es equivalente a modificar los potenciales electroquímicos [31]

$$\mu_{\pm} = \pm z e \psi + k_B T \ln n_{\pm} - k_B T \ln (1 - n_+ a^3 - n_- a^3), \quad (1.2)$$

donde n_{\pm} , ψ , y a son los números de densidades iónicas, el potencial eléctrico en la EDL y el tamaño de cada ion, respectivamente. Borukhov et al. [32] derivaron la Ec. (1.2) mediante argumentos de la mecánica estadística, suponiendo que los iones y las moléculas de solvente ocupan sitios en una red cuadrada de tamaños de celdas unitarias a . Las condiciones de equilibrio $\nabla \mu_{\pm} = 0$ pueden resolverse analíticamente para dar una relación explícita entre el potencial eléctrico y las densidades de iones. Tomando en cuenta la condición de equilibrio, de la Ec. (1.2) se puede determinar una distribución de iones modificada entre dos paredes como se deduce de [33]

$$\mu_{\pm} = \int dr \left[\pm e z \psi + k_B T \ln \left(\frac{n_{\pm} a^3}{1 - n_+ a^3 - n_- a^3} \right) \right] = \text{constante}. \quad (1.3)$$

Debido a que dr es arbitrario, entonces μ_{\pm} implica que

$$\pm e z \psi + k_B T \ln \left(\frac{n_{\pm} a^3}{1 - n_+ a^3 - n_- a^3} \right) = \text{constante}. \quad (1.4)$$

Haciendo $1 - n_+ a^3 - n_- a^3 = P_1$, la Ec. (1.4) puede reescribirse como

$$\ln \left(\frac{n_+}{P_1} \right) = \mp \frac{ez\psi}{k_B T} + K_{\pm,1}, \quad (1.5)$$

donde $K_{\pm,1}$ es constante. Para evaluar $K_{\pm,1}$, se puede aplicar la condici3n de simetría en la línea central, donde $n_{\pm} = n_{\pm,C}$ y $\psi = \psi_C$. Considerando la concentraci3n de la línea central, uno puede escribir:

$$K_{\pm,1} = \ln \left(\frac{n_{\pm,C}}{P_{1,C}} \right) \pm \frac{ez\psi_C}{k_B T}, \quad (1.6)$$

donde $P_{1,C} = 1 - a^3 (n_{+,C} + n_{-,C})$. Por lo tanto, la distribuci3n de concentraci3n i3nica es

$$\frac{n_+}{P_1} = \frac{n_{+,C}}{P_{1,C}} \exp \left[-\frac{ez}{k_B T} (\psi - \psi_C) \right], \quad (1.7)$$

y

$$\frac{n_-}{P_1} = \frac{n_{-,C}}{P_{1,C}} \exp \left[\frac{ez}{k_B T} (\psi - \psi_C) \right]. \quad (1.8)$$

Las Ecs. (1.7) y (1.8) no son explícitas para n_+ o n_- . Para obtener una forma explícita, se puede dividir la Ec. (1.7) por la Ec. (1.8) para obtener

$$n_+ = n_- \frac{n_{+,C}}{n_{-,C}} \exp \left[-\frac{2ez}{k_B T} (\psi - \psi_C) \right]. \quad (1.9)$$

Usando la Ec. (1.9) en Ecs. (1.7) y (1.8), finalmente se obtiene

$$n_{\pm} = \frac{n_{\pm,C} \exp \left[\mp \frac{ez}{k_B T} (\psi - \psi_C) \right]}{1 + a^3 \left\{ n_{+,C} \left[\exp \left(-\frac{ez}{k_B T} (\psi - \psi_C) \right) - 1 \right] + n_{-,C} \left[\exp \left(\frac{ez}{k_B T} (\psi - \psi_C) \right) - 1 \right] \right\}}. \quad (1.10)$$

Si no existe superposici3n de EDLs, se puede aplicar una condici3n de frontera en la línea de simetría $n_{\pm,C} = n_0$, $\psi_C = 0$, por lo tanto la ecuaci3n anterior queda como

$$n_{\pm} = \frac{n_0 \exp \left(\mp \frac{ez\psi}{k_B T} \right)}{1 + 4\nu \sinh^2 \left(\frac{ez\psi}{2k_B T} \right)}, \quad (1.11)$$

donde ν es el factor estérico y es igual a $n_0 a^3$. Para el caso en la que los iones son tratados como cargas puntuales, es decir, $\nu = 0$, se recupera la distribuci3n de Boltzmann clásico. Además, la densidad de carga eléctrica ρ_e está dada por:

$$\rho_e = ze (n_+ - n_-). \quad (1.12)$$

Introduciendo la Ec. (1.11) en la ecuaci3n anterior, se tiene la densidad de carga volumétrica como

$$\rho_e = ze \left[\frac{n_0 e^{(ze\psi/k_B T)}}{1 + 4\nu \sinh^2 (ze\psi/2k_B T)} - \frac{n_0 e^{(-ze\psi/k_B T)}}{1 + 4\nu \sinh^2 (ze\psi/2k_B T)} \right]. \quad (1.13)$$

1.4.2. Efecto viscoeléctrico

El modelo de Gouy-Chapman-Stern-Grahame se centra en el impacto de los iones sobre las propiedades eléctricas de la interfase sólido-líquido, pero no presta atención a las propiedades físicas del disolvente. En soluciones acuosas, las moléculas de agua cercanas a una superficie cargada están orientadas y polarizadas debido al campo eléctrico normal a la superficie dentro de la EDL; los protones en una molécula de agua tienden a orientarse hacia la superficie cargada negativamente, mientras que cerca de una carga superficial positiva, el átomo de oxígeno en la molécula de agua se orienta preferentemente hacia la superficie. En este contexto, el campo eléctrico dentro del EDL aumenta el grado de polarización de las moléculas de agua alterando la viscosidad de la solución [34–36]. Con base en resultados experimentales, Andrade y Dodd [37] propusieron una relación entre la viscosidad local y el campo eléctrico en los sistemas de solventes polares, llamado efecto viscoeléctrico. Posteriormente Lyklema y Overbeek [34] y Lyklema [35], realizaron un modelo que describe el efecto viscoeléctrico como sigue

$$\eta = \eta_0 (1 + f |E|^2), \quad (1.14)$$

donde η_0 , f , y E son la viscosidad en ausencia de un campo eléctrico, el coeficiente viscoeléctrico y el campo eléctrico local, respectivamente. También, Lyklema y Overbeek [34] estimaron el valor del coeficiente viscoeléctrico siendo $1.02 \times 10^{-15} \text{ m}^2/\text{V}^2$. Posteriormente, Hunter y Leyendekkers [38] estimaron el coeficiente viscoeléctrico a partir de mediciones de la viscosidad de soluciones acuosas entre láminas paralelas de montmorillonita. Se obtuvo un rango de $0.5 - 1 \times 10^{-15} \text{ m}^2/\text{V}^2$ para las interfaces agua-óxido.

1.5. Estado del arte

Los estudios sobre flujos electroosmóticos en pequeñas escalas comenzaron a tener gran interés desde la investigación realizada por Burgreen [39], quien llevó a cabo un estudio sobre un flujo electroosmótico sugiriendo con sus resultados la posibilidad de aplicaciones prácticas en bombeo, generación de energía e instrumentación. A partir de entonces, el estudio de los flujos electroosmóticos en microescala se hizo muy importante, llevando a cabo investigaciones que cubren diferentes aspectos, como la consideración de la reología de los fluidos transportados en estudios con fluidos newtonianos [40–44] y no newtonianos [45–49], así como la utilización de canales con diferentes geometrías tales como placas planas paralelas, [50–53], rectangulares [54–57] y cilíndricas [58–61], o bien, considerando el uso de potenciales zeta pequeños [62–64] o altos [65–68], entre otros aspectos. Sin embargo, gracias a los avances tecnológicos y la creciente fabricación de dispositivos y aplicaciones a pequeña escala [69, 70], el estudio de los flujos electroosmóticos también se han realizado en escala nanométrica [71–74]. Las investigaciones anteriores se realizaron utilizando supuestos del medio continuo para aplicar las ecuaciones de gobierno de Poisson-Boltzmann y Navier-Stokes, o en representaciones más generales utilizando las ecuaciones modificadas de Poisson-Boltzmann para el potencial eléctrico, Cauchy para la cantidad de movimiento y Poisson-Nernst-Planck para los procesos de electrodifusión iónica. Sin embargo, conforme los dispositivos electrocinéticos se hacen más pequeños, la altura del canal puede ser del orden de las dobles capas eléctricas, y por lo tanto, las ecuaciones antes mencionadas basadas en el medio continuo podrían producir errores al describir las distribuciones de iones y el comportamiento del flujo electroosmótico [75].

Cuando el medio continuo no es aplicable, los estudios de flujo electroosmótico, comúnmente en la nanoescala, se realizan con dinámica molecular MD, por sus siglas en inglés [75, 76], dinámica de partículas disipativas DPD, siglas en inglés [77], simulaciones atomísticas [78], entre otros. De lo anterior, en la investigación de Qiao y Aluru [79] se establece que la utilización del medio continuo tiene discrepancias en el flujo electroosmótico en canales de 0.95 nm; sin embargo, puede usarse en canales tan pequeños como 2.22 nm siempre que se considere la variación de la viscosidad cerca de la pared del canal [79]. Con esto, y dado que Kandlikar y Grande [80] propusieron una uniformidad en la clasificación de canales con $0.1\mu\text{m} \leq D_h$ para nanocanales moleculares, $1\mu\text{m} \leq D_h \leq 0.1\mu\text{m}$ para nanocanales de transición, $10\mu\text{m} \leq D_h \leq 1\mu\text{m}$ para microcanales de transición, $200\mu\text{m} \leq D_h \leq 10\mu\text{m}$ para microcanales, $3\text{mm} \leq D_h \leq 200\mu\text{m}$ para minicanales, es evidente la aplicabilidad del medio continuo en canales de flujo con líquidos; donde D_h es el diámetro hidráulico del canal. En la literatura sobre flujos electrocinéticos, se conoce que las variaciones de la viscosidad cerca de las paredes del canal mencionadas en el párrafo anterior, se producen porque el campo eléctrico dentro de la EDL aumenta el grado de polarización de las moléculas de agua [81]. Estas variaciones en la viscosidad del fluido se puede analizar a través del efecto viscoeléctrico, que fue propuesto por Lyklema y Overbeek [34] y Lyklema [35]; este modelo describe la viscosidad en función de un campo eléctrico dado por $\eta = \eta_0(1 + fE^2)$, donde E es la fuerza del campo eléctrico local relacionado con el potencial zeta dentro de la EDL, η_0 es la viscosidad en ausencia de un campo eléctrico, y f es el coeficiente viscoeléctrico. Recientemente, estudios sobre flujos electroosmóticos han demostrado que la consideración del efecto viscoeléctrico con altos voltajes dentro de EDL, conduce a una reducción en la magnitud de la velocidad [81–84].

Por otro lado, en muchas situaciones sobre la teoría de la electrodifusión de iones y fenómenos electrocinéticos con soluciones diluidas, y en condiciones de equilibrio de potencial químico, se deriva la distribución iónica clásica de Boltzmann teniendo en cuenta los iones como cargas puntuales; sin embargo, la respuesta de un electrolito bajo la presencia de altos voltajes provoca una acumulación de iones cerca de una superficie cargada produciendo que los iones no sigan esta distribución clásica [66]. En esta dirección, los iones no deben considerarse como cargas puntuales ya que su tamaño es significativo en el análisis de flujos electroosmóticos [85]. Por lo tanto, los efectos del tamaño iónico finito llamado efecto estérico se da como $\nu = a^3 n_0$; donde a es el tamaño iónico efectivo y n_0 es la concentración iónica de la solución en condiciones neutrales [66, 85, 86]. El efecto estérico debe considerarse en fenómenos electrocinéticos con potenciales superficiales tales como $\zeta = \left[\frac{k_B T}{ze} \ln(\nu^{-1}) \right]$ [66]; donde k_B es la constante de Boltzmann, T es la temperatura absoluta, e es la carga elemental y z es el valor absoluto de la valencia del electrolito. De lo anterior, en soluciones diluidas y teniendo en cuenta que $a \sim \text{Å}$, el efecto estérico se considera desde $\zeta \approx 13k_B T/ze = 330 \text{ mV}$ con $a = 7\text{Å}$ y una concentración iónica de 10^{-5} M . Sin embargo, aunque el tamaño iónico efectivo no es menor que el radio iónico, es decir, $\approx 1\text{Å}$, podría alcanzar tamaños en el orden de nanómetros teniendo en cuenta los efectos de hidratación y las correlaciones iónicas, especialmente bajo campos eléctricos fuertes [66]. Además, considerando los tamaños iónicos en el orden de nanómetros junto con altas concentraciones, este efecto se puede considerar con potenciales zeta menores al límite antes mencionado. En este sentido, en estudios de flujos electroosmóticos cuando la solución electrolítica tiene altas concentraciones iónicas y especialmente con potenciales zeta altos, pueden ocurrir errores significativos para la predicción del campo del potencial eléctrico [29]. En esta dirección, la influencia del efecto estérico fue desarrollado inicialmente por Bikerman [30], quien propuso un modelo modificado de la ecuación

ción de Poisson-Boltzmann (MPB). Este modelo ha sido ampliamente utilizado por la comunidad científica en estudios de flujos electroosmóticos [29, 33, 87–89] y otros trabajos sobre fenómenos electrocinéticos. Como se mencionó anteriormente, el uso de altas concentraciones iónicas y potenciales zeta hace que los efectos viscoeléctricos y estéricos sean más evidentes.

En esta dirección, diversas investigaciones en pequeña escala se han llevado a cabo para aplicaciones de mezclado donde es necesario generar recirculaciones bajo efectos electrocinéticos, donde también se usan potenciales zeta heterogéneos y concentraciones iónicas relativamente altos [73, 74, 90, 91]. De esta manera, las tareas de mezcla se analizaron por Ahmed et al. [6], quienes desarrollaron un trabajo experimental de un micromezclador electrohidrodinámico en forma de T-, donde dos fluidos newtonianos con conductividades y permitividades eléctricas distintas, pero de viscosidad idéntica, ingresan al microducto mediante la aplicación de fuerzas de presión desde los brazos de un microcanal hacia la sección longitudinal del arreglo, llamada “zona de influencia de campo”. Perpendicularmente a esta zona, se coloca una serie de electrodos para generar inestabilidades hidrodinámicas a través de la aplicación de campos eléctricos altos, que interactúan con las propiedades eléctricas de los fluidos. En dicho trabajo se observó que las perturbaciones del flujo se mejoran mediante el incremento del campo eléctrico que se aplica externamente. También, Chao et al. [92] realizaron un estudio numérico de modulaciones de campo de flujos electroosmóticos incrustando electrodos discretos en las paredes del microcanal para generar recirculaciones en el flujo. En su trabajo el campo eléctrico modulado está por debajo del límite estérico y determinaron que el modelo con tres electrodos mejora la eficiencia de mezcla en comparación con uno y dos electrodos. Por otro lado, Nayak [74], llevó a cabo un análisis numérico de un micromezclador con un flujo electroosmótico de un fluido newtoniano a través de un canal con heterogeneidades de los potenciales zetas en las paredes. El fluido se mueve debido a la aplicación de campos eléctricos externos. En esta investigación, el autor demostró que la mezcla es más eficiente al introducir arreglos de potenciales zeta heterogéneos asimétricos, generando un efecto de difusión mucho más fuerte que los casos simétricos, logrando una distribución más uniforme de la concentración de especies y una mejora en la eficiencia de mezclado. Por su parte, Lee et al. [50] estudiaron un flujo electroosmótico a través de un microcapilar con heterogeneidades de los potenciales zeta, localizadas en dos regiones a lo largo del capilar. La aplicación de un campo eléctrico externo resulta en una perturbación del flujo y los resultados muestran la distorsión que sufre el perfil de velocidad uniforme, el cual es característico de los flujos puramente electroosmóticos. También se observan cambios súbitos en la velocidad del flujo en la interfaz entre las dos regiones donde los potenciales zeta son diferentes, generándose una recirculación del flujo. Cho et al. [93] estudiaron numéricamente los efectos de potenciales zeta heterogéneos en un microcanal y observaron que incrementando los valores del potencial zeta, se produce una recirculación más fuerte, logrando una mejor eficiencia de mezclado. Además de los trabajos antes mencionados donde se utilizan electrodos incrustados y parches heterogéneos, otros estudios emplean las mismas técnicas para obtener variaciones en los potenciales zeta de pared [94–100]. Sin embargo, la simulación de efectos electrocinéticos similares a parches heterogéneos o electrodos incrustados, se ha llevado a cabo utilizando potenciales zeta heterogéneos modulados en las paredes del canal mediante funciones de onda coseno [101, 102] o mediante forma periódica de onda cuadrada [103]. En este sentido, Ghosh y Chakraborty [104] consideraron un función cosenoidal en las paredes del canal, concluyendo que estas influencias de perturbación producen gradientes axiales en la velocidad. También, concluyeron que al aplicar un potencial zeta asimétrico en las paredes, se producen líneas de flujo asimétricas alcanzando una mezcla mejorada, pero sin aumentar el flujo volumétrico.

Capítulo 2

Formulación del problema del micromezclador

En este capítulo, se presenta la formulación del problema en estudio, comenzando con la descripción del esquema del modelo físico, posteriormente se enumeran las ecuaciones que gobiernan el flujo electroosmótico y el campo de concentración. Más adelante, se listan las consideraciones que se toman en cuenta para la simplificación de las ecuaciones gobernantes así como el análisis de órdenes de magnitud, para determinar las escalas características. Finalmente, basados en la especificación de las escalas características del sistema, se realiza la adimensionalización del modelo matemático.

2.1. Ecuaciones Gobernantes

Las ecuaciones gobernantes generales en forma vectorial que describen los fenómenos de transporte del presente trabajo son: ecuación de Poisson-Boltzmann, ecuación de la conservación de la masa, ecuación de la conservación de la cantidad de movimiento y la ecuación del transporte de un soluto neutro.

2.1.1. Ecuación de Poisson-Boltzmann

La mayoría de materiales adquieren una carga eléctrica superficial cuando se pone en contacto con un medio acuoso [105]. Por este motivo, la presencia de superficies cargadas es uno de los estudios principales de la electrocinética ya que juegan un papel importante en el campo de la dinámica molecular y la biofísica para el modelado de flujos de fluidos biológicos y no biológicos en microcanales. La ecuación que describe la distribución espacial de carga eléctrica en estos sistemas, es la ecuación de Poisson, dada por [14]

$$\nabla^2\Phi = -\frac{\rho_e}{\epsilon}, \quad (2.1)$$

donde Φ es el potencial eléctrico total, ρ_e la densidad de carga eléctrica y ϵ es la constante dieléctrica.

2.1.2. Conservación de la masa

Un sistema es una parte del universo limitada para un estudio. En el sistema hay un balance entre la variación total de la masa del sistema y el flujo neto de masa a través de una superficie de control, a esta definición se le conoce como conservación de la masa y se expresa como

$$\frac{D\rho}{Dt} + \nabla \cdot \rho \mathbf{V} = 0, \quad (2.2)$$

donde ρ es la densidad del fluido, t el tiempo y \mathbf{V} es el vector velocidad.

2.1.3. Conservación de la cantidad de movimiento

El balance de fuerzas en el sistema a analizar en el presente trabajo, están dados por las ecuaciones de Navier-Stokes que se expresan vectorialmente de la siguiente manera

$$\rho \frac{D\mathbf{V}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot (\eta \nabla \mathbf{V}) + \mathbf{b}, \quad (2.3)$$

donde p es la presión. Las fuerzas de cuerpo están dadas por

$$\mathbf{b} = \mathbf{f}_e + \mathbf{f}_g, \quad (2.4)$$

donde el primer y segundo términos del lado derecho de la Ec. (2.4) son la fuerza debido al campo eléctrico (fuerza de Coulomb) y la fuerza gravitacional, respectivamente. \mathbf{f}_e se expresa como

$$\mathbf{f}_e = \rho_e \mathbf{E}, \quad (2.5)$$

donde \mathbf{E} , es el vector del campo eléctrico. \mathbf{f}_g se establece de la siguiente manera

$$\mathbf{f}_g = \rho \mathbf{g}, \quad (2.6)$$

donde \mathbf{g} , es el vector de aceleración gravitacional.

2.1.4. Ecuación convectivo-difusivo del transporte de masa

El análisis del transporte de masa de un soluto eléctricamente neutro, se puede expresar en términos de la ecuación convectivo-difusivo dada por

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \nabla^2 c - \mathbf{V} \cdot \nabla c, \quad (2.7)$$

donde c y D , son la concentración y el coeficiente de difusión del soluto, respectivamente.

2.2. Modelo físico

En el presente trabajo se analiza el mezclado de un soluto neutro en un flujo electroosmótico de un fluido newtoniano que pasa a través de un micromezclador electrocinético. El solvente consiste en un fluido de un electrolito simétrico $z : z$. Este dispositivo está formado por dos placas planas

paralelas de alto H y longitud L , y el origen del sistema en coordenada Cartesianas (x, y) se coloca en la pared inferior del canal como se muestra en la Fig. 2.1. Con la finalidad de generar perturbaciones en el flujo para generar el mezclado entre el soluto y el solvente, se consideran potenciales zeta heterogéneos y arbitrarios en las paredes, es decir, $\zeta_1^*(x) = \zeta_1 \sin(n\pi x/L)$ y $\zeta_2^*(x) = \zeta_2 \sin(n\pi x/L + \omega)$; donde ζ_1 y ζ_2 son los potenciales zeta de referencia para cada pared, n representa el número de onda y ω es el ángulo de desfase. Para generar el movimiento del fluido por fuerzas electroosmóticas, en la entrada y salida del sistema se colocan electrodos para producir un campo eléctrico constante E_x a lo largo del canal, el cual actúa en una región de alta concentración de cargas eléctricas llamada longitud de Debye $\kappa^{-1} = (\epsilon k_B T / 2e^2 z^2 n_0)^{1/2}$ [14, 105].

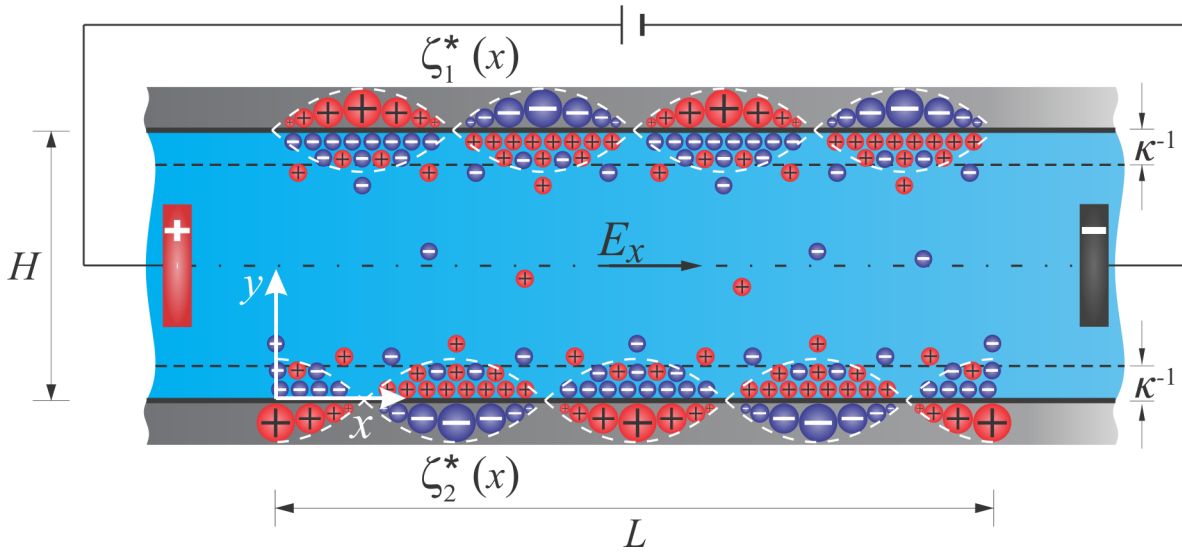


Figura 2.1: Esquema del micromezclador electrocinético.

2.3. Ecuaciones gobernantes en coordenadas Cartesianas

En la presente sección, las ecuaciones vectoriales dadas en la sección 2.1, se muestran en coordenadas Cartesianas debido a la geometría del problema. Estas ecuaciones, gobiernan la distribución del potencial eléctrico en la doble capa eléctrica, conservación de la masa, conservación de la cantidad de movimiento y la ecuación de transporte convectivo-difusivo de un soluto, involucradas en el estudio del flujo electrocinético del presente trabajo. Estas ecuaciones son la base del modelado teórico de la hidrodinámica del flujo electroosmótico de un fluido newtoniano. Con el fin de simplificar las ecuaciones gobernantes, se considera que el flujo es incompresible y en estado permanente. De esta manera, las ecuaciones básicas de gobierno que describen el flujo electroosmótico son:

Ecuación de Poisson

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} = -\frac{\rho_e}{\epsilon}. \quad (2.8)$$

Ecuación de conservación de la masa

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad (2.9)$$

donde u y v son las componentes de la velocidad en las coordenadas Cartesianas x y y respectivamente. Mientras que las componentes de la ecuación de cantidad de movimiento son

$$\rho \left(u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\eta \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\eta \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \rho_e E_x, \quad (2.10)$$

$$\rho \left(u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} \right) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\eta \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\eta \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \rho_e E_y, \quad (2.11)$$

donde p es la presión. Finalmente la ecuación de transporte de un soluto está dado por

$$u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} = D \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right). \quad (2.12)$$

2.4. Consideraciones del modelo matemático

La modelación matemática para resolver el micromezclador electrocinético y que se basa en las ecuaciones gobernantes en coordenadas cartesianas anteriores, se modifican tomando en cuenta las siguientes consideraciones:

1. La distribución del potencial eléctrico total Φ depende del potencial debido al campo eléctrico aplicado externamente y del potencial eléctrico dentro de la doble capa eléctrica, es decir $\Phi(x, y) = \phi(x) + \psi(x, y)$, que es una superposición lineal del potencial en la doble capa eléctrica $\psi(x, y)$ y el potencial debido al campo eléctrico aplicado externamente $\phi(x) = \phi_0 - xE_x$, donde ϕ_0 es el potencial eléctrico en $x = 0$. También, se tiene que el campo eléctrico está dado por [74], $\vec{E} = -\nabla\Phi = (E_x, E_y)$.
2. Se consideran las variaciones de la viscosidad debido al campo eléctrico local a través del efecto viscoeléctrico. Aquí, dentro de la doble capa eléctrica se cumple el siguiente orden de magnitud $[E_y \sim (\partial\psi/\partial y) \sim (\zeta_{1,2}/\kappa^{-1})] \gg [E_x \sim (\partial\psi/\partial x) \sim (\zeta_{1,2}/L)]$. Por lo tanto, el coeficiente de viscosidad dinámica de la Ec. (1.14), se puede reescribir en una primera aproximación como $\eta = \eta_0 \left[1 + f \left(\frac{\partial\psi}{\partial y} \right)^2 \right]$.
3. La presión en flujos electroosmóticos se puede relacionar con la fuerza de atracción o repulsión que existe entre los iones del electrolito en la doble capa eléctrica, a través de la presión electrostática dada por $p_e(\psi) = \int \rho_e(\psi) d\psi$ [106]. La solución de la integral anterior produce una constante de integración que es igual a cero, cuando se toma en cuenta la condición de la presión electrostática fuera de la EDL $p_e(\psi = 0) = 0$; por lo tanto, la presión electrostática como una función del potencial eléctrico resulta en $p_e(\psi) = \frac{n_0 k_B T}{\nu} \ln \left[1 + 4\nu \sinh^2 \left(\frac{ze\psi}{k_B T} \right) \right]$. De lo anterior, se toma en cuenta el siguiente cambio de variable $p' = p - p_e(\psi)$.

4. No existe superposición de dobles capas eléctricas.

Tomando en cuenta las consideraciones antes mencionadas se obtienen las siguientes ecuaciones de gobierno modificadas en coordenadas cartesianas. De la combinación de las Ecs. (1.13) y (2.8), el modelo que describe la distribución del potencial eléctrico dentro de la doble capa eléctrica se expresa finalmente como la ecuación de Poisson-Boltzmann modificada (MPB) [107–109]

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = \frac{2n_0 z e}{\epsilon} \frac{\sinh(z e \psi / k_B T)}{1 + 4\nu \sinh^2(z e \psi / 2k_B T)}. \quad (2.13)$$

Las Ecs. (2.10) y (2.11), pueden reescribirse como

$$\rho \left(u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right) = -\frac{\partial p'}{\partial \bar{x}} + \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \eta_0 \left[1 + f \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \right)^2 \right] \frac{\partial u}{\partial x} \right\} + \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \eta_0 \left[1 + f \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \right)^2 \right] \frac{\partial u}{\partial y} \right\} + \rho_e \frac{\partial \psi}{\partial x}, \quad (2.14)$$

y

$$\rho \left(u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} \right) = -\frac{\partial p'}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \eta_0 \left[1 + f \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \right)^2 \right] \frac{\partial v}{\partial x} \right\} + \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \eta_0 \left[1 + f \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \right)^2 \right] \frac{\partial v}{\partial y} \right\}, \quad (2.15)$$

La ecuación convectivo-difusivo queda como

$$D \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right) = u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y}. \quad (2.16)$$

2.5. Condiciones de frontera

La ecuaciones que describen el flujo electrosmótico en el micromezclador están sujetas a las siguientes condiciones de frontera:

Potencial eléctrico Ec. (2.13) en las paredes del micromezclador

$$\psi|_{y=0} = \zeta_2 \sin(n\pi x/L + \omega), \quad \psi|_{y=H} = \zeta_1 \sin(n\pi x/L), \quad (2.17)$$

y en la entrada y salida

$$\psi|_{x=0} = 0, \quad \psi|_{x=L} = 0. \quad (2.18)$$

Cantidad de movimiento Ecs. (2.14)-(2.15), de impermeabilidad y no deslizamiento en las paredes, respectivamente

$$v|_{y=0} = 0, \quad v|_{y=H} = 0, \quad u|_{y=0} = 0, \quad u|_{y=H} = 0, \quad (2.19)$$

y para las condiciones de entrada y salida del micromezclador se tienen los siguientes casos:

Caso I. Condiciones en la entrada y salida con presión cero

$$p'|_{x=0} = p_0 - p_e(\psi), \quad p'|_{x=L} = p_0 - p_e(\psi), \quad (2.20)$$

donde p_0 es la presión de referencia.

Caso II. Condiciones de entrada con velocidad dada y flujo desarrollado a la salida del micromezclador, respectivamente

$$u|_{x=0} = u_{en}, \quad \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=L} = 0. \quad (2.21)$$

Finalmente, para el campo de concentración de especies Ec. (2.12) las condiciones de frontera en las paredes son

$$\left. \frac{\partial c}{\partial y} \right|_{y=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial c}{\partial y} \right|_{y=H} = 0, \quad (2.22)$$

y en la entrada y salida

$$c|_{x=0} = c_{en}, \quad \left. \frac{\partial c}{\partial y} \right|_{x=L} = 0. \quad (2.23)$$

2.6. Análisis de órdenes de magnitud

El análisis de escalas o de órdenes de magnitud, permite representar y comparar de una forma simplificada las distintas magnitudes físicas para la solución de problemas de los modelos matemáticos que describen el comportamiento de un fenómeno. En esta sección se realiza un análisis de órdenes de magnitud, empleando las ecuaciones gobernantes y constitutivas mencionadas anteriormente, con el objetivo de obtener las escalas características adecuadas que se emplearán para definir las variables adimensionales. Debido a la geometría del canal, se establecen las siguientes escalas características:

$$x \sim H; \quad y \sim H. \quad (2.24)$$

Las escalas características para la velocidad, potencial eléctrico y presión se establecen de la siguiente manera:

$$u \sim u_c, \quad v \sim v_c, \quad \psi \sim \psi_c, \quad p \sim p_c, \quad (2.25)$$

donde $u_c = -\epsilon k_B T E_x / z e \eta_0$, es la velocidad característica. La velocidad característica en la dirección transversal, $v_c \sim u_c$, se obtiene al comparar en órdenes de magnitud los términos de la ecuación de conservación de la masa. También, la presión característica, $p_c \sim u_c \eta_0 / H$, se obtiene al comparar en órdenes de magnitud el término de fuerzas de presión y el término de fuerzas viscosas en la dirección de la coordenada x de la ecuación de cantidad de movimiento. Por otro lado, el potencial eléctrico de referencia y el potencial zeta en las paredes del micromezclador, se basan en el potencial térmico de un electrólito simétrico como $\psi_c \sim \frac{k_B T}{ze}$ y $\zeta_c \sim \frac{k_B T}{ze}$, respectivamente. Finalmente, la concentración del soluto se basa en una concentración de referencia como $c \sim c_0$.

2.7. Modelo matemático adimensional

Haciendo uso de las escalas características de la sección anterior, se introducen las siguientes variables adimensionales:

$$\begin{aligned} \bar{x} &= \frac{x}{H}, & \bar{y} &= \frac{y}{H}, & \bar{u} &= \frac{u}{u_c}, & \bar{v} &= \frac{v}{u_c}, \\ \bar{p} &= \frac{[p' + p_e(\psi) - p_0] H}{u_c \eta_0}, & \bar{\psi} &= \frac{ze\psi}{k_B T}, & \bar{\zeta}_{1,2} &= \frac{ze\zeta_{1,2}}{k_B T}, & \bar{c} &= \frac{c}{c_0}. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Por lo tanto, la versión adimensional de las ecuaciones gobernantes de las Ecs. (2.13), (2.9), (2.14), (2.15), (2.16), pueden reescribirse de la siguiente manera, respectivamente:

$$\frac{\partial^2 \bar{\psi}}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 \bar{\psi}}{\partial \bar{y}^2} = \bar{\kappa}^2 \frac{\sinh(\bar{\psi})}{1 + 4\nu \sinh^2(\bar{\psi}/2)}, \quad (2.27)$$

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{x}} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial \bar{y}} = 0, \quad (2.28)$$

$$\begin{aligned} Re\bar{u} \frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{x}} + Re\bar{v} \frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{y}} &= -\frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{x}} + \frac{\partial}{\partial \bar{x}} \left[\frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{x}} + \frac{\bar{f}}{\bar{\kappa}^2} \left(\frac{\partial \bar{\psi}}{\partial \bar{y}} \right)^2 \frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{x}} \right] + \\ &\frac{\partial}{\partial \bar{y}} \left[\frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{y}} + \frac{\bar{f}}{\bar{\kappa}^2} \left(\frac{\partial \bar{\psi}}{\partial \bar{y}} \right)^2 \frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{y}} \right] + \bar{\kappa}^2 \frac{\sinh(\bar{\psi})}{1 + 4\nu \sinh^2(\bar{\psi}/2)}, \end{aligned} \quad (2.29)$$

$$\begin{aligned} Re\bar{u} \frac{\partial \bar{v}}{\partial \bar{x}} + Re\bar{v} \frac{\partial \bar{v}}{\partial \bar{y}} &= -\frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{y}} + \frac{\partial}{\partial \bar{x}} \left[\frac{\partial \bar{v}}{\partial \bar{x}} + \frac{\bar{f}}{\bar{\kappa}^2} \left(\frac{\partial \bar{\psi}}{\partial \bar{y}} \right)^2 \frac{\partial \bar{v}}{\partial \bar{x}} \right] + \\ &\frac{\partial}{\partial \bar{y}} \left[\frac{\partial \bar{v}}{\partial \bar{y}} + \frac{\bar{f}}{\bar{\kappa}^2} \left(\frac{\partial \bar{\psi}}{\partial \bar{y}} \right)^2 \frac{\partial \bar{v}}{\partial \bar{y}} \right]. \end{aligned} \quad (2.30)$$

$$\frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial \bar{y}^2} = Pe_D \left(\bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial \bar{x}} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial \bar{y}} \right), \quad (2.31)$$

Las condiciones de frontera adimensionales para las Ecs. (2.17), (2.18), (2.19), (2.20), (2.21), (2.22), (2.23) son como se muestran a continuación:

$$\bar{\psi}|_{\bar{y}=0} = \bar{\zeta}_2 \sin(n\pi\xi\bar{x} + \omega), \quad \bar{\psi}|_{\bar{y}=1} = \bar{\zeta}_1 \sin(n\pi\xi\bar{x}), \quad (2.32)$$

$$\bar{\psi}|_{\bar{x}=0} = 0, \quad \bar{\psi}|_{\bar{x}=1/\xi} = 0. \quad (2.33)$$

$$\bar{v}|_{\bar{y}=0} = 0, \quad \bar{v}|_{\bar{y}=1} = 0, \quad \bar{u}|_{\bar{y}=0} = 0, \quad \bar{u}|_{\bar{y}=1} = 0, \quad (2.34)$$

Caso I.

$$\bar{p}|_{\bar{x}=0} = 0, \quad \bar{p}|_{\bar{x}=1/\xi} = 0. \quad (2.35)$$

Caso II.

$$\bar{u}|_{\bar{x}=0} = \bar{u}_{en}, \quad \left. \frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{x}} \right|_{\bar{x}=1/\xi} = 0. \quad (2.36)$$

$$\left. \frac{\partial \bar{c}}{\partial \bar{y}} \right|_{(\bar{y}=0)} = 0, \quad \left. \frac{\partial \bar{c}}{\partial \bar{y}} \right|_{(\bar{y}=1)} = 0, \quad (2.37)$$

$$\bar{c}|_{(\bar{x}=0)} = 1, \quad \left. \frac{\partial \bar{c}}{\partial \bar{x}} \right|_{(\bar{x}=1/\xi)} = 0. \quad (2.38)$$

Los parámetros adimensionales que aparecen en las ecuaciones anteriores son definidos como sigue:

$$Pe_D = \frac{u_c H}{D}, \quad \bar{\kappa} = \kappa H, \quad Re = \frac{\rho u_c H}{\eta_0}, \quad \bar{f} = f \left(\frac{\kappa k_B T}{ze} \right)^2, \quad \xi = \frac{H}{L}, \quad (2.39)$$

donde $Pe_D = \frac{u_c H}{D}$, es el número de Péclet y representa la competencia entre el transporte asociado a la cantidad de movimiento y el correspondiente debido a la transferencia difusiva de masa del soluto neutro, $\bar{\kappa}$ es el parámetro electrocinético dado por la relación entre la altura del microcanal y la longitud de Debye, Re es el número de Reynolds indicando la competencia entre las fuerzas inerciales y viscosas; \bar{f} es el coeficiente viscoeléctrico y ξ es la relación del alto entre el largo del canal.

2.8. Flujo volumétrico

El flujo volumétrico adimensional en el mezclador electrocinético se obtiene integrando el perfil de velocidades en la sección transversal del conducto, y en cualquier punto del eje longitudinal \bar{x} de la siguiente manera

$$\bar{Q} = \int_{\bar{y}=0}^{\bar{y}=1} \bar{u} d\bar{y}, \quad (2.40)$$

donde $\bar{Q} = \frac{Q}{Q_c}$ y $Q_c = u_c H$ es el flujo volumétrico característico por unidad de ancho del canal.

Capítulo 3

Metodología de solución numérica

En este capítulo se presenta la metodología de solución numérica especificando los procedimientos que se llevaron a cabo en el software computacional COMSOL Multiphysics, utilizando el módulo CFD. Las ecuaciones gobernantes adimensionales que describen el campo de flujo de las Ecs. (2.27)-(2.31), con sus respectivas condiciones de frontera de las Ecs. (2.32)-(2.38), son no lineales y no tiene solución analítica exacta. Por lo tanto, los resultados del flujo electroosmótico se resuelven utilizando el módulo de CFD del software computacional COMSOL Multiphysics, siguiendo el procedimiento que se presenta a continuación.

3.1. Construcción del modelo geométrico

En el menú **File**, elegir **New**.

NEW

1. En la ventana **New**, dar click en el boton **Model Wizard**.

MODEL WIZARD

1. En la ventana **Model Wizard**, clic en el botón **2D**.
2. En la ventana de **Select physics**, seleccionar **AC/DC>Electric Currents>Add; Fluid Flow>Single-Phase Flow>Laminar Flow>Add; Chemical Species Transport>Transport of Diluted Species>Add**.
3. Clic en el botón **Study**.
4. En la ventana **Select Study**, clic en **Preset Studies for Selected Physics Interfaces>Stationary**.
5. Clic en el botón **Done**.

GEOMETRY

1. Clic en **Component 1**.

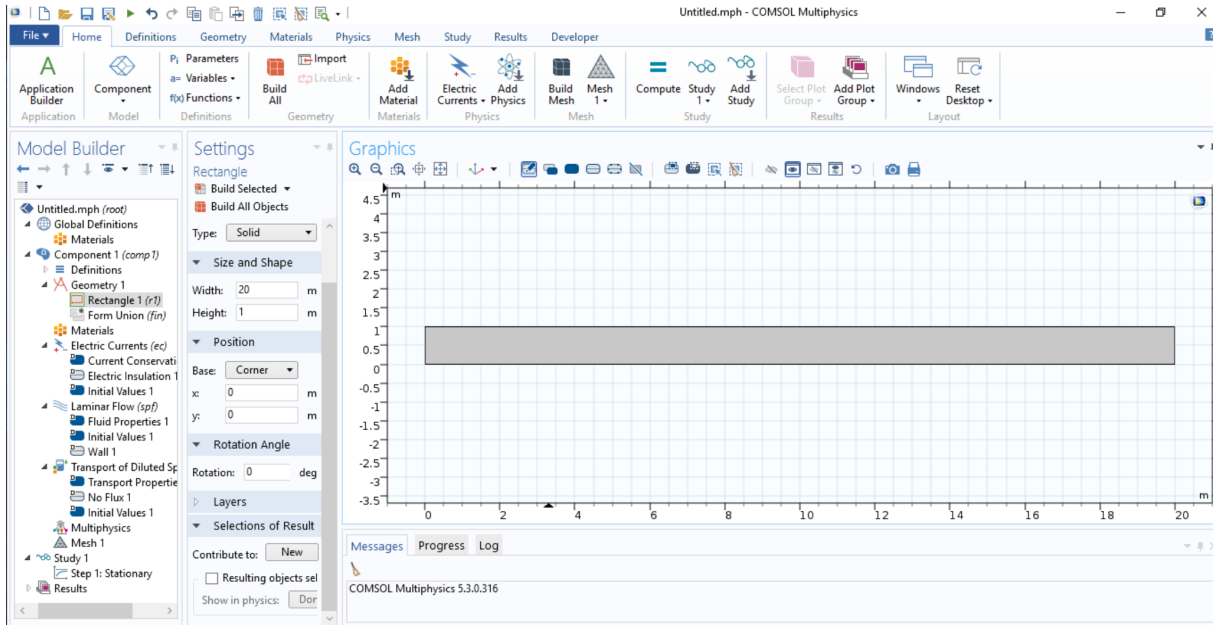


Figura 3.1: Esquema de la geometría del mezclador electrocinético

2. Seleccionar **Geometry 1**, clic derecho y seleccionar **Rectangle**.
3. Clic en **Rectangle 1**>**Size and Shape**, colocar los valores del ancho y alto del dominio de estudio en **Width**= 20 y **Height**= 1, respectivamente. Clic en **Position**>**Base**>**Corner**, colocar la posición del origen del eje de coordenadas en $x = 0, y = 0$.
4. Clic derecho en **Geometry**, agregar **Point**. Seleccionar **Point** y escribir 0 y 0.5 en x e y , respectivamente.
5. Clic en **Build all objects**, para formar el dominio del problema como se muestra en la Fig. 3.1

3.2. Definición de parámetros

GLOBAL DEFINITIONS

1. En el menú **Global Definitions**, clic derecho y seleccionar **Parameters**.
2. Clic en **Parameters** e introducir los valores, como se muestra en la Tabla 3.1.
3. Seleccionar y clic derecho en **Global Definitions**, clic en **Functions** y seleccionar **Analytic**.
4. Repetir el paso anterior.
5. Seleccionar **Analytic 1**, colocar en **Expression** la función " $Zeta_1 * \sin(Wave_n * Pi * Beta_1 * x)$ " y en **Arguments** colocar x . Clic en **Plot Parameters**, colocar los siguientes valores en la tabla, **Lower limit**= 0 y **Upper limit**= 20. Clic en **Plot**.

Tabla 3.1: Parámetros adimensionales utilizados para la obtención de resultados del presente análisis.

Nombre	Expresión	Valor	Descripción
kappa ($\bar{\kappa}$)	50	50	parámetro electrocinético
zeta_1 ($\bar{\zeta}_{1,2}$)	6	6	potencial zeta de la pared superior
pi (π)	3.141592	3.1416	valor de Pi
wave_n (n)	6	6	número de onda
omega (ω)	0*Pi	0	ángulo de desfase
height (H)	1	1	alto del canal
length (L)	20	20	largo del canal
xi_1 (ξ)	Height/Length	0.05	razón entre la altura y el largo del canal
nu (ν)	0	0	factor estérico
f_Visc (\bar{f})	0.07	0.07	factor viscoeléctrico
u_inlet (\bar{u}_{en})	1	1	velocidad de entrada
Re (Re)	0.001	0.001	número de Reynolds
visc_f (η)	1e - 6	1E-6	viscosidad
dif_coef (D)	1e - 10	1E-10	coeficiente de difusión
Sc (Sc)	Visc_f/Dif_coef	1E-6	número de Schmidt
Pe (Pe_D)	Re*Sc	500	número de Péclet

6. Seleccionar **Analytic 2**, colocar en **Expression** la función " $Zeta_1 * \sin(Wave_n * Pi * Beta_1 * x + omega)$ " y en **Arguments** colocar x . Clic en **Plot Parameters**, colocar los siguientes valores en la tabla, **Lower limit**= 0 y **Upper limit**= 20. Clic en **Plot**.

3.3. Incorporación de las ecuaciones gobernantes

Teniendo definido el dominio del canal en estudio, así como los parámetros utilizados en el presente trabajo, la simulación de las ecuaciones adimensionales que gobiernan el flujo electroosmótico con sus respectivas condiciones de frontera, se realizan como sigue.

3.3.1. Conservación de corriente

Determinación del potencial eléctrico que se genera por las condiciones de frontera de los potenciales zeta variables en las paredes del canal.

1. Clic en **Component**>**Electric Currents**. En el menú **Equation**>**Equation form** seleccionar **Stationary**. Clic en **Thickness**> $d = 1$, **Manual Terminal Sweep Settings**> $Z_{ref} = 1$.
2. En la barra de herramientas **Current Conservation**, clic en **Material type** y seleccionar **solid**. En el menú **Conduction Current**>**Electrical conductivity**, seleccionar **User defined**

y escribir el valor de 1. Clic en **Electric Field**<**Constitutive relation**, seleccionar **Relative permittivity**>**User defined**, colocar el valor de 1.

3. Clic derecho en el menú principal **Electric Currents**, agregar **External current density**.
4. En el menú **External current density**, clic en **Domain selection**>**Manual** y seleccionar el dominio de trabajo. Clic en **External current density** y colocar los valores de 0.
5. En el menú principal **Electric Currents**, agregar **Current Source**.
6. En el menú **Current Source**>, clic en **Domain selection**>**Manual** y seleccionar el dominio de trabajo. Clic en **Current Source**, colocar la siguiente expresión: $-\text{Kappa} * \text{Kappa} * \sinh(V)/(1 + 4 * \text{Nu} * \sinh(V/2) * \sinh(V/2))$.

Introducción de las condiciones de frontera de no deslizamiento en las paredes y de entrada y salida del canal.

Condiciones de frontera, de entrada y salida del canal

1. Clic en **Electric Currents**, agregar dos veces **Electric Potential**.
2. En la primera condición, clic en **electric potential** y escribir en $V_0 = an1(x)$. Seleccionar la pared superior del canal.
3. En la segunda condición, clic en **electric potential** y escribir en $V_0 = an2(x)$. Seleccionar la pared inferior del canal.
4. Clic en **Electric Insulation**, seleccionar la entrada y salida del canal.

3.3.2. Flujo laminar

Solución de las ecuaciones de Navier-Stokes para la descripción del perfil de velocidades del flujo electroosmótico.

1. Clic en **Laminar Flow**, en **Equation**>**Equation form** seleccionar **Stationary**. Clic en **Physical Model**, seleccionar **Incompressible flow**.
2. En el menú **Laminar Flow**, clic en **Fluid Properties**. Colocar el parámetro "Re" en **Density** y $1 + (F_Visc/(Kappa * Kappa)) * V_y * V_y$.
3. Desde el menú **Laminar Flow**, agregar **Volume Force**. Seleccionar el dominio de trabajo y en **Volume Force** escribir $-\text{Kappa} * \text{Kappa} * \sinh(V)/(1 + 4 * \text{Nu} * \sinh(V/2) * \sinh(V/2))$, para el eje x .

Condiciones de frontera, de entrada y salida del canal

1. Clic en **Laminar Flow**, agregar **Inlet** y **Outlet** al dominio de estudio.

Caso I Condiciones de entrada y salida $\bar{p} = 0$

1. Clic en **Inlet**, seleccionar **Boundary Condition>Pressure** y colocar el valor de cero. En **Flow direction** seleccionar **Normal flow**.
2. Clic en **Outlet**, seleccionar **Boundary Condition>Pressure** y colocar el valor de cero.

Caso II Condiciones de entrada y salida $\bar{u}_{in} = 0$ y flujo desarrollado a la salida

1. Clic en **Inlet**, seleccionar **Boundary Condition>Velocity<Normal inflow velocity** y colocar el parámetro u_{in} .
2. Clic en **Outlet**, seleccionar **Boundary Condition>Velocity>Normal outflow velocity** y colocar $ux + u$.

Para ambos casos, las condiciones de frontera en las paredes del canal es la condición de no deslizamiento.

1. Clic en **Wall>Boundary condition>Wall condition>No slip** y seleccionar las paredes superior e inferior del canal.

3.3.3. Transporte de especies diluidas

Solución de las ecuaciones de transporte de masa para la concentración de un soluto eléctricamente neutro.

1. Clic en **Transport of Diluted Species>Transport Mechanisms**, marcar la casilla **Convection**.
2. Del menú **Transport of Diluted Species**, clic en **Transport properties>Convection** y en **Velocity field>user defined** colocar u y v para los ejes x e y , respectivamente. Clic en **Diffusion>Diffusion coefficient>user defined**, escribir $1/Pe$.
3. Clic derecho en **Transport of Diluted Species** y agregar **Reactions**. Clic en **Reactions Rates> user defined** y escribir cero.

Condiciones de frontera, de entrada y salida del canal

1. Agregar a **Transport of Diluted Species** la condición de **Inflow**. Clic en **Concentration**, colocar el valor de 1 y seleccionar en la entrada del canal de 0.5 a 1 en el eje transversal.
2. Agregar a **Transport of Diluted Species** la condición de **Inflow**. Clic en **Concentration**, colocar el valor de 0 y seleccionar en la entrada del canal de 0 a 0.5 en el eje transversal.
3. Agregar a **Transport of Diluted Species** la condición de **Outflow** y clic en la salida del canal.
4. Clic en **No Flux**, seleccionar las paredes del canal.

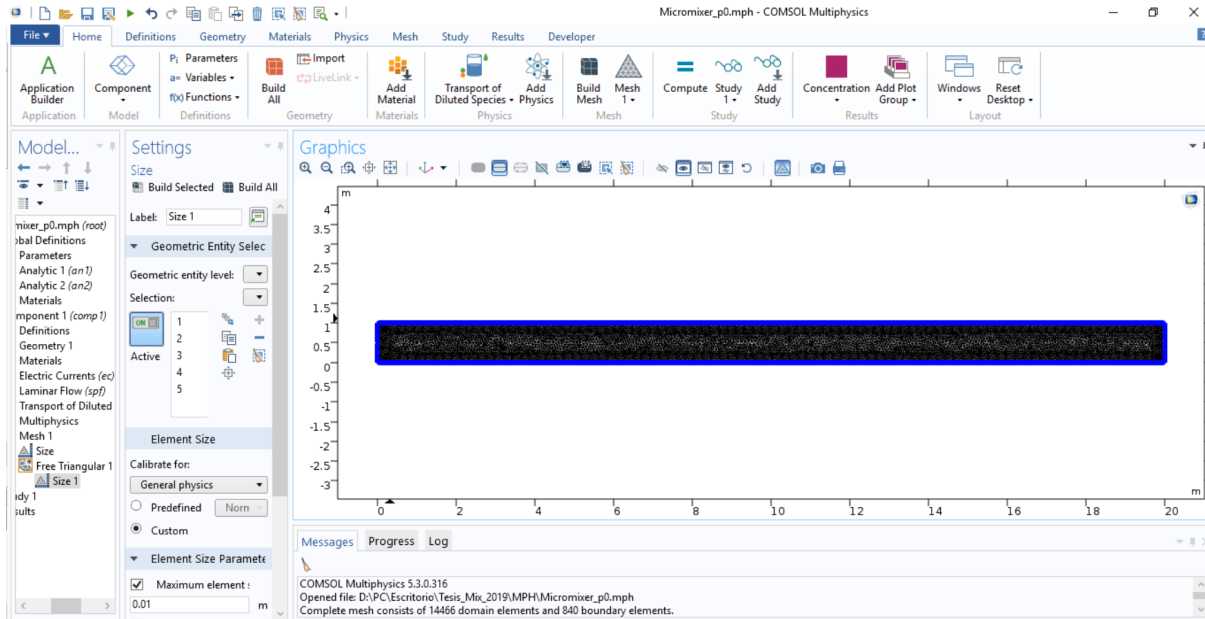


Figura 3.2: Esquema de la malla del mezclador electrocinético

3.3.4. Construcción de la malla

Generación de la malla para la evaluación del flujo electroosmótico.

1. Clic en **Mesh**, agregar **Free Triangular**, clic derecho y agregar **Size**. Clic en **Geometric Entity Selection**>**Geometric entity level**>**Boundary**, seleccionar **Selection**>**All boundaries**.
2. En **Element Size**>**Calibrate for** seleccionar **General physics**, marcar **Custom**.
3. Clic en **Element Size Parameters**, marcar la casilla **Maximum element size** y escribir 0.01.
4. Clic en **Build All** para generar la malla que se muestra en la Fig. 3.2

3.3.5. Estudio

1. Seleccionar el estudio **Stationary**.
2. Clic en **Solver Configurations**>**Stationary Solver**, colocar en **Relative tolerance** el valor de 0.0001.
3. Clic en **Compute** para la obtención de resultados.

3.4. Resultados

Obtención de los resultados para el potencial eléctrico, contornos de velocidad y concentración adimensional del flujo electroosmótico.

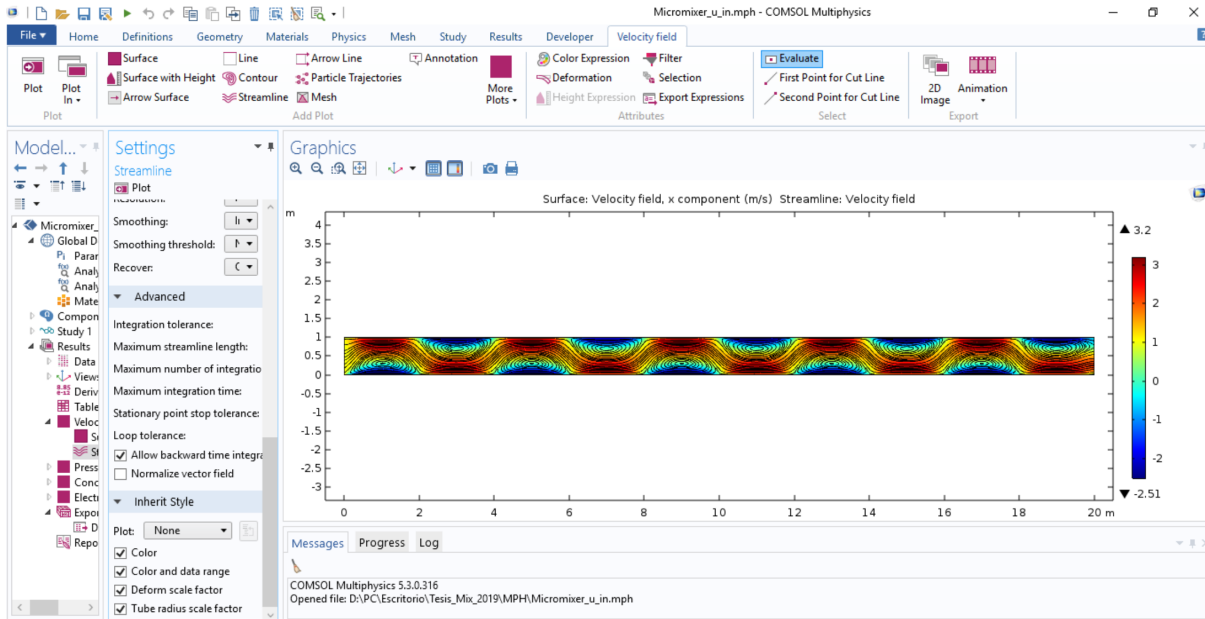


Figura 3.3: Visualización de los contornos de velocidad y líneas de corriente en el mezclador electrocinético.

Visualización de resultados

1. Clic en **Results** con el botón derecho y agregar tres veces **2D Plot Group**.

En cada uno de los menú agregados anteriormente, realizar lo siguiente.

3.4.1. Campo de velocidad

1. Clic derecho en **2D Plot Group 1**, elegir **Rename** y renombrar con "Velocity field".
2. Clic derecho en **Velocity field** y agregar **surface**. Clic en **Data>Data set** y elegir **Study 1/Solution 1**. Clic en **Expression>Expression**, colocar el parámetro u .
3. Clic derecho en **Velocity field** y agregar **Streamline**. Clic en **Data>Data set** y elegir **Study 1/Solution 1**. Clic en **Expression**, colocar en x **component** la variable u y en y **component** la variable v .
4. En el menú **Streamline**, clic en **Streamline Positioning>Positioning** elegir **Uniform density**. Colocar el valor de 0.005 en **Separating distance**. Clic en **Advanced**, colocar 0.001 en **Integration tolerance**.
5. Clic en **Plot**, para la obtención de los contornos de velocidad y líneas de corriente como se muestra en la Fig. 3.3.

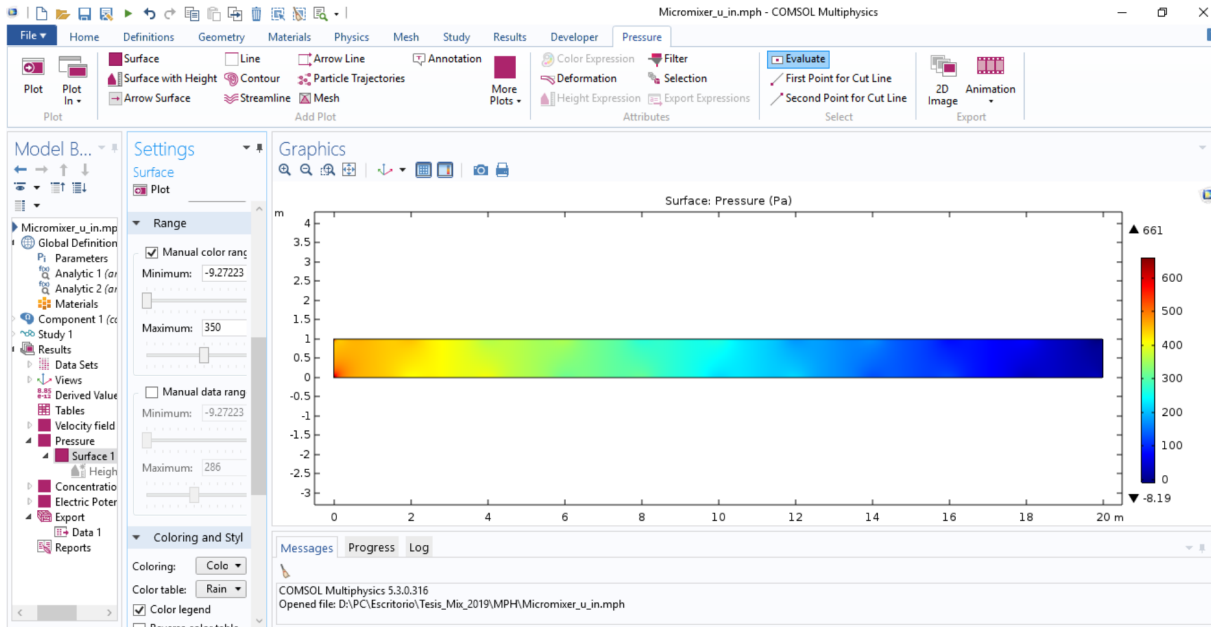


Figura 3.4: Visualización de los contornos de presión en el mezclador electrocinético.

3.4.2. Presión

1. Clic derecho en **2D Plot Group 2**, elegir **Rename** y renombrar con **”Pressure”**.
2. Clic derecho en **Pressure** y agregar **surface**. Clic en **Data>Data set** y elegir **Study 1/Solution 1**. Clic en **Expression>Expression**, colocar el parámetro p .
3. Clic en **Plot**, para la obtención de los contornos de presión como se muestra en la Fig. 3.4.

3.4.3. Concentración

1. Clic derecho en **2D Plot Group 3**, elegir **Rename** y renombrar con **”Concentration”**.
2. Clic derecho en **Concentration** y agregar **surface**. Clic en **Data>Data set** y elegir **Study 1/Solution 1**. Clic en **Expression>Expression**, colocar el parámetro c .
3. Clic en **Plot**, para la obtención de los contornos de concentración como se muestra en la Fig. 3.5.

3.4.4. Potencial eléctrico

1. Clic derecho en **2D Plot Group 4**, elegir **Rename** y renombrar con **”Electric potential”**.
2. Clic derecho en **Electric potential** y agregar **surface**. Clic en **Data>Data set** y elegir **Study 1/Solution 1**. Clic en **Expression>Expression**, colocar el parámetro V .
3. Clic derecho en **Surface** y agregar **Height Expression**. En **Height data** elegir **Expression** y colocar la variable V .

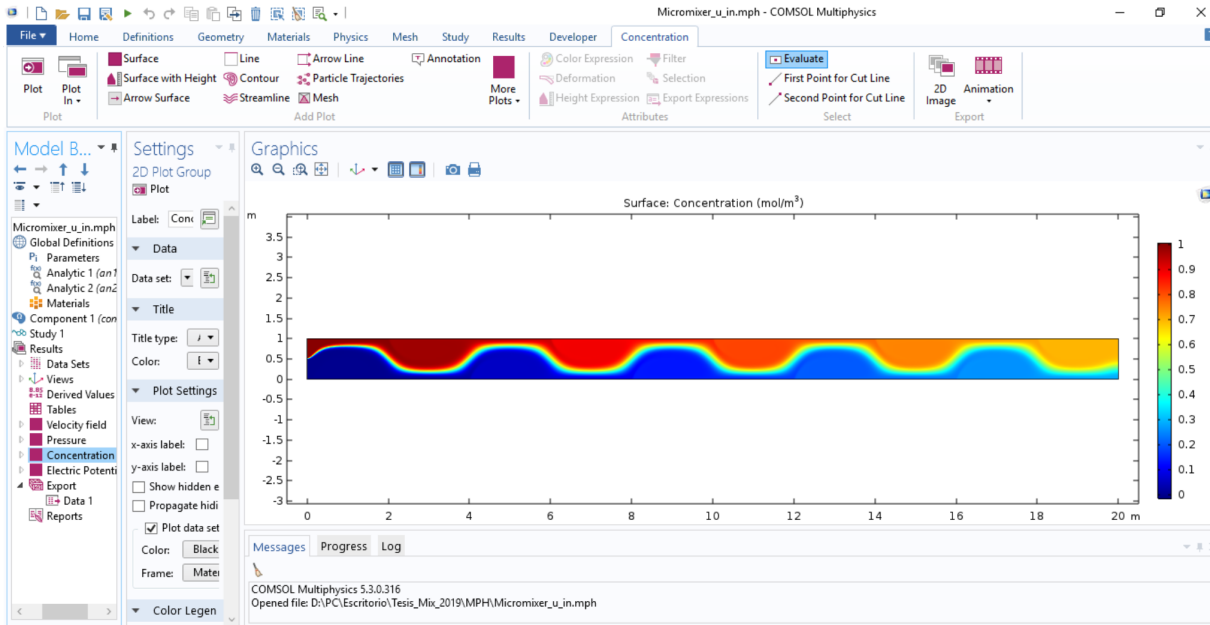


Figura 3.5: Visualización de los contornos de concentración del soluto del mezclador electrocinético.

4. Clic en **Plot**, para la obtención de los contornos de concentración como se muestra en la Fig. 3.6.

3.4.5. Exportar

1. Clic derecho en **Export** y agregar **Date**.
2. En el menú **Date**, seleccionar en **Data>Date set** la opción **Study 1/Solution 1**.
3. En la opción **Expression**, escribir la variable que se desea exportar.
4. Clic en **Output**, seleccionar en **File type** la opción **text** y escribir la dirección en donde se almacenará el archivo.
5. Seleccionar en **Points to evaluate in** y **Data format**, la opción de **Grid**. Especificar el paso y el dominio que se desea exportar dando clic en el icono **Range**.
6. Clic en **Export**.

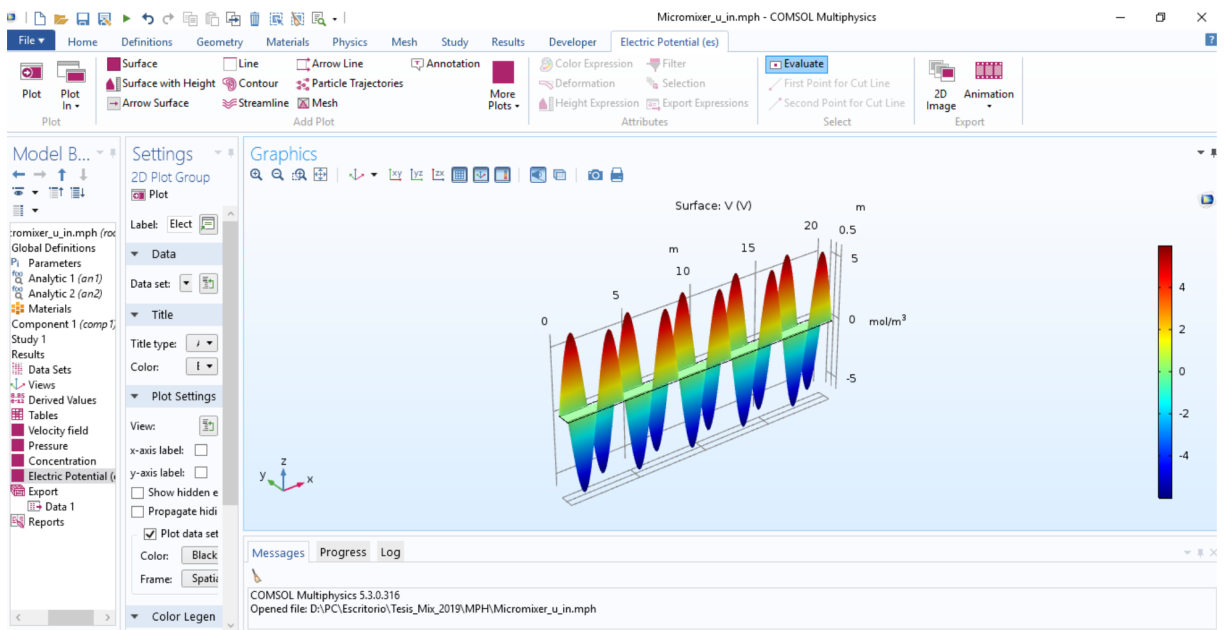


Figura 3.6: Visualización de los contornos de potencial eléctrico del mezclador electrocinético.

Capítulo 4

Análisis de resultados

El presente capítulo se divide en el análisis y discusión de resultados para los campos de distribución del potencial eléctrico, velocidad y concentración del soluto en el micromezclador para discutir los resultados numéricos. Los valores de los parámetros adimensionales se obtienen mediante la combinación apropiada de los valores que se muestran en la Tabla 4.1. Además, se seleccionaron los siguientes intervalos $3 \leq n \leq 10$ y $0 \leq \omega \leq 2\pi$ para representar potenciales zeta heterogéneos que se modulan con polaridades alternas a lo largo de las paredes del canal y para obtener disposiciones simétricas, antisimétricas o desfasadas entre las ondas de las funciones $\bar{\zeta}_1^*(\bar{x})$ y $\bar{\zeta}_2^*(\bar{x})$, respectivamente. Sin embargo, el intervalo seleccionado para n y ω , no es restrictivo para nuestra solución y puede tomar cualquier valor positivo.

Tabla 4.1: Propiedades físicas y geométricas para la estimación de los parámetros adimensionales en el presente análisis.

Parámetro	Valor	Unidad	Referencia
a	0.1 to 2	(nm)	[29, 66, 83, 86]
H	0.1 to 10	(μm)	[74, 80, 85, 90]
L	2 to 200	(μm)	[89, 91, 110]
κ^{-1}	3 to 300	(nm)	[14, 25]
D	10^{-12} to 10^{-9}	(m^2s^{-1})	[25, 74]
E_x	500 to 5000	(Vm^{-1})	[25, 74]
f	10^{-17} to 10^{-15}	(m^2V^{-2})	[34, 35, 83, 106]
ζ_n	-250 to 250	(mV)	[41, 51, 66, 111]
n_0	6.02×10^{20} to $6.02 \times 10^{24}\dagger$	(m^{-3})	[14, 52, 106]
T	298.15	(K)	[14, 52]
ϵ	6.95×10^{-10}	($\text{CV}^{-1}\text{m}^{-1}$)	[14, 52]
η_0	10^{-3}	($\text{kgm}^{-1}\text{s}^{-1}$)	[14, 52]
ρ	998	(kgm^{-3})	[14, 52]

\dagger Basado en el rango de concentración molar de 10^{-6} to 10^{-2} M, de las referencias citadas y usando $n_0 = 1000N_A M$ [14], donde el número de Avogadro es $N_A = 6.022 \times 10^{22} \text{ mol}^{-1}$.

4.1. Campo del potencial eléctrico

La Fig. 4.1 muestra los contornos del potencial eléctrico adimensional con potenciales zeta heterogéneos simétricos y asimétricos en las paredes del micromezclador con $\xi = 0.05$, $\bar{\zeta}_{1,2} = 6$ y $\bar{\kappa} = 50$; adicionalmente se toman en cuenta diferentes valores del número de onda n , ángulo de desfase ω y factor estérico ν . Debido a que los cambios en el potencial eléctrico ocurren cerca de las paredes y tienden a cero hacia el centro del canal, se realizan cortes en el eje \bar{y} para resaltar las regiones cercanas a la doble capa eléctrica. En este conjunto de figuras se analizan primordialmente la influencia del efecto estérico sobre el potencial eléctrico. En esta dirección, cuando $\nu = 0$ en

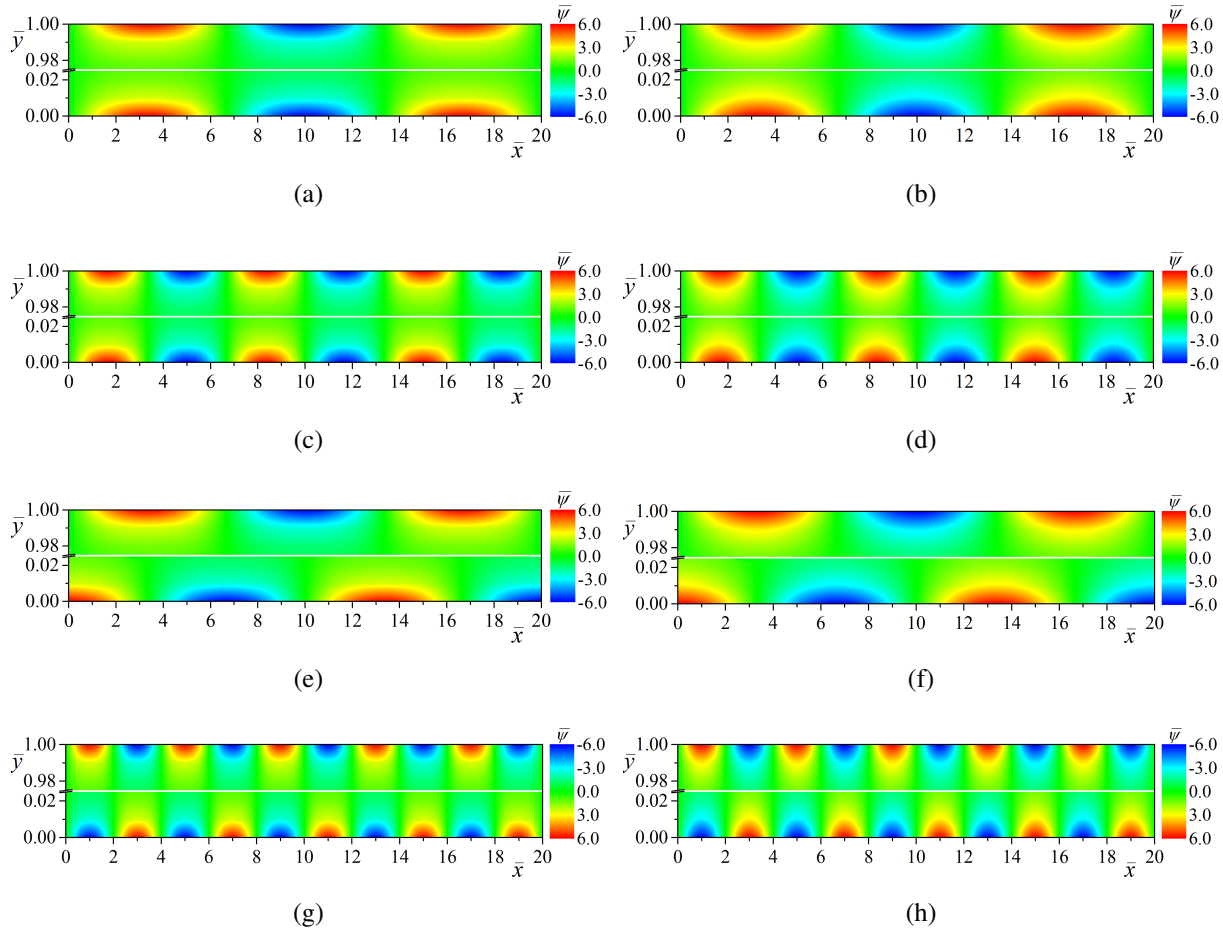


Figura 4.1: Distribuciones del potencial eléctrico adimensional como función de las coordenadas (\bar{x}, \bar{y}) , con $\xi = 0.05$, $\bar{\zeta}_{1,2} = 6$, $\bar{\kappa} = 50$ y diferentes valores del número de onda, ángulo de fase y factor estérico; a) $n = 3$, $\omega = 0$, $\nu = 0$ b) $n = 3$, $\omega = 0$, $\nu = 0.05$, c) $n = 6$, $\omega = 0$, $\nu = 0$, d) $n = 6$, $\omega = 0$, $\nu = 0.05$, e) $n = 3$, $\omega = 0.5\pi$, $\nu = 0$, f) $n = 3$, $\omega = 0.5\pi$, $\nu = 0.05$, g) $n = 10$, $\omega = \pi$, $\nu = 0$ y h) $n = 10$, $\omega = \pi$, $\nu = 0.05$.

la Ec. (2.27) se recupera el caso clásico de la ecuación de Poisson-Boltzmann para la distribución del potencial eléctrico y que se representan en las Figs. 4.1a, c, e y g; mientras que la inclusión del efecto estérico se muestran en las Figs. 4.1b, d, f y h, tomando un valor de $\nu = 0.05$. En la literatura se conoce que en la teoría clásica de Boltzmann, la caída de los voltajes aplicados en paredes cargadas se dan en la capa de Stern o compacta inmóvil dentro de la doble capa eléctrica,

sobrecargando esa región; sin embargo, la acumulación de iones conduce a que la capa compacta avance hacia el líquido, contrarrestando dicha sobrecarga [106]. Por esta razón, al comparar las figuras antes mencionadas, se puede ver que el ancho de los contornos del potencial eléctrico aumenta hacia la región central del canal, cuando se considera el efecto estérico. Por otro lado las Figs. 4.1a y b, muestran las distribuciones de potencial eléctrico con un número de onda impar de $n = 3$ y con un valor cero del ángulo de fase, es decir, $\omega = 0$. En ambas figuras se pueden ver dos contornos rojos positivos contra un contorno azul negativo que sigue una distribución sinusoidal del potencial eléctrico en cada pared del canal. En las Figs. 4.1c y d, el número de onda toma un valor de $n = 6$ con $\omega = 0$ y muestran que para el caso de n par, existe el mismo número de contornos positivos y negativos del potencial eléctrico en las paredes del canal. En las figuras anteriores y debido a un ángulo de fase $\omega = 0$, las distribuciones de potencial eléctrico entre las paredes superior e inferior siguen una configuración simétrica. Las Figs. 4.1e y 4.1f, las distribuciones del potencial eléctrico se dan con $n = 3$ y $\omega = 0.5\pi$. En estas figuras se muestra que en la pared inferior del canal, el potencial eléctrico comienza y termina con el valor máximo de la amplitud dada por el potencial zeta $\bar{\zeta}_2 = 6$ y que genera una distribución asimétrica con respecto a la pared superior. Por otro lado, las Figs. 4.1g y 4.1h, muestran las distribuciones de potencial eléctrico con un ángulo de fase de $\omega = \pi$ y un número de onda par de $n = 10$. En estas figuras, el ángulo de fase produce una distribución antisimétrica del potencial eléctrico entre las paredes del canal.

La Fig 4.2, muestra los perfiles del potencial eléctrico como función del eje transversal \bar{y} (figuras del lado izquierdo) y del eje longitudinal \bar{x} (figuras del lado derecho); aquí, los perfiles se obtienen de la Fig. 4.1. Para esta figura, las líneas continuas representan la condición con un factor estérico de $\nu = 0$ y las líneas discontinuas el caso con $\nu = 0.05$. En estas figuras, los valores de los potenciales eléctricos máximos y mínimos en la EDL a lo largo del eje \bar{x} se pueden obtener al derivar las condiciones de frontera dadas en la Ec. (2.32) con respecto a \bar{x} , resultando en:

$$\bar{x}_{max,min} = (2m + 1)/2n\xi \quad (4.1)$$

para la pared superior y

$$\bar{x}_{max,min} = [\pi(2m + 1) - 2\omega]/2n\pi\xi \quad (4.2)$$

para la pared inferior, respectivamente y con $0 \leq m < n$. En esta dirección, las posiciones de \bar{x} para las figuras del lado izquierdo se eligieron arbitrariamente, donde se presenta algún valor máximo o mínimo del potencial eléctrico. En las Figs. 4.2a y c, se muestra el caso simétrico de la distribución del potencial eléctrico para dos posiciones en el eje longitudinal del canal en $\bar{x}_{max} = 3.33$ ($m = 0$), $\bar{x}_{min} = 10$ ($m = 1$) y $\bar{x}_{max} = 8.33$ ($m = 2$), $\bar{x}_{min} = 11.67$ ($m = 3$), respectivamente. En estas posiciones, se ubican los potenciales zeta máximos y mínimos, lo que conduce a una distribución similar del potencial eléctrico entre ambas figuras; además, debido a las distribuciones de potenciales alternas y por las posiciones axiales seleccionadas, se presentan pares de distribuciones antisimétricas en cada figura. Como se puede ver en la Fig. 4.2e, los potenciales eléctricos comienzan con un valor negativo en $\bar{x} = 6.66$ y un valor positivo en $\bar{x} = 13.33$ y se tiende a cero en el resto del dominio debido al valor del ángulo de fase. Por otro lado, en las Figs. 4.2g las distribuciones de potenciales eléctricos en la pared superior e inferior muestran un comportamiento con polaridad opuesta. En las figuras anteriores, se puede ver más claramente que el área de influencia del potencial eléctrico se extiende más allá de la superficie cargada, cuando se tienen en cuenta los efectos estéricos. También es notable que, la pendiente negativa de

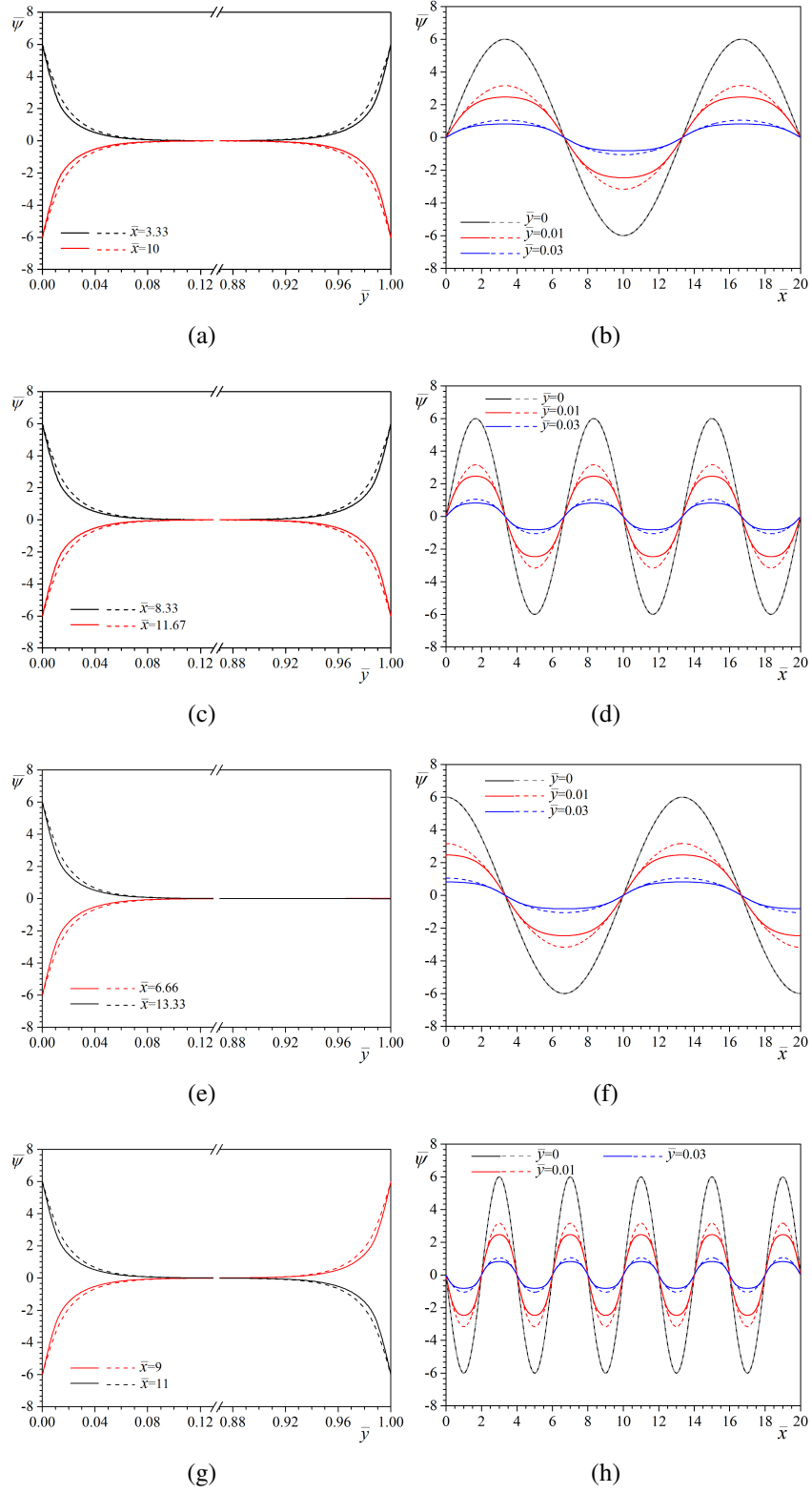


Figura 4.2: Perfiles del potencial eléctrico para diferentes posiciones de los ejes \bar{x} e \bar{y} con $\xi = 0.05$, $\bar{\zeta}_{1,2} = 6$, $\bar{\kappa} = 50$, $\nu = 0$ (líneas continuas), $\nu = 0.05$ (líneas discontinuas) y diferentes valores del número de onda y ángulo de fase; a-b) $n = 3$, $\omega = 0$; c-d) $n = 6$, $\omega = 0$; e-f) $n = 3$, $\omega = 0.5\pi$ y g-h) $n = 10$, $\omega = \pi$.

las distribuciones del potencial cercano a las paredes del canal en la teoría clásica de Boltzmann con cargas puntuales, es mayor que cuando se incluyen los tamaños iónicos finitos mediante el efecto estérico (ver líneas negras cercanas al origen del eje y), ocasionando una disminución en el gradiente del potencial eléctrico en el eje \bar{y} . Además, las Figs. 4.2b,d,f,h, muestran la comparación de la distribución del potencial eléctrico como función de \bar{x} , cuando $\nu = 0$ (líneas continuas) y $\nu = 0.05$, (líneas discontinuas) para tres posiciones cercanas a la pared inferior en $\bar{y} = 0, 0.01, 0.03$. En $\bar{y} = 0$ corresponde a los valores del potencial de superficie impuestos a través de la condición de frontera mediante el potencial zeta variable $\bar{\zeta}_2^*(\bar{x})$. Como se puede observar en estas figuras, las discrepancias de las magnitudes en el potencial eléctrico para cualquier posición de $\bar{y} \neq 0$, se presentan en regiones próximas a los potenciales zeta máximos y mínimos, mientras que para potenciales zeta débiles en la superficie, el efecto estérico no genera cambios en las magnitudes de los potenciales eléctricos. En este sentido, se determina que los efectos del tamaño iónico son más visibles al aumentar el potencial en las paredes. En estas figuras, el potencial eléctrico para posiciones $\bar{y} \neq 0$, es mayor cuando se consideran los efectos de tamaño iónico finito, debido a que la acumulación de cargas eléctricas ocurren en un espacio mayor a través de \bar{y} .

4.2. Campo de velocidad

Una vez descrito el comportamiento de las distribuciones de potencial eléctrico en el micromezclador, su influencia en el campo de flujo se estudiará en las siguientes figuras, haciendo mención que el número de Reynolds se estimó en un rango de $10^{-5} \leq Re \leq 10^{-3}$ para la obtención de los resultados. Esta sección se divide en dos casos que se presentan a continuación.

4.2.1. Caso I. Condiciones de entrada y salida para la presión adimensionalizada con $\bar{p}=0$

En este apartado las condiciones de entrada y salida del canal se consideran como $\bar{p} = 0$. En esta dirección, la distribución de la velocidad y las líneas de corriente con $\xi = 0.05$, $\bar{\zeta}_{1,2} = 6$, $\bar{\kappa} = 50$ y diferentes valores de ν , \bar{f} , n y ω que se muestran en la Fig. 4.3, se obtienen de las fuerzas electroosmóticas generadas por los potenciales eléctricos dados en la Fig. 4.1. Para comentar este conjunto de figuras, se tienen en cuenta las siguientes consideraciones; primero, en las figuras de la columna izquierda Figs. 4.3a, d, g, j, los efectos viscoeléctricos y estéricos estas ausentes, es decir, $\bar{f} = 0$ y $\nu = 0$; segundo, en las figuras de la columna central, es decir, Figs. 4.3b, e, h, k, solo se toma en cuenta la variación de la viscosidad a través del efecto viscoeléctrico con $\bar{f} = 0.07$; y tercero, las figuras en la columna lateral derecha, Figs. 4.3c, f, i, l, muestran la combinación de los efectos viscoeléctricos y estéricos sobre el flujo electroosmótico con $\bar{f} = 0.07$ y $\nu = 0.05$. De lo anterior, en las Figs. 4.3a-c cuando los números de onda son pares con $n = 3$, las magnitudes de la velocidad positiva representada por contornos rojos predominan sobre las negativas con contornos azules; ocasionando que el movimiento del fluido sea en dirección axial. Para este caso simétrico con $\omega = 0$, se observa que en la entrada del canal el fluido es atraído rápidamente hacia las paredes con contornos positivos, sin embargo, la existencia de flujo inverso entre estos contornos hacia el centro del canal, generan recirculaciones produciendo un estancamiento del fluido. Siguiendo las líneas de corriente hacia el centro del canal en el eje longitudinal \bar{x} , se puede ver que el fluido aumenta su velocidad cuando pasa entre polaridades opuestas, aunque la atracción hacia las paredes

es lo suficientemente grande como para mover una parte del fluido en dirección opuesta y produciendo recirculaciones más grandes que las antes mencionadas. En estas figuras, las magnitudes de las velocidades se referencian con los valores de la Fig. 4.3a en donde los valores máximos y mínimos se estiman como $\bar{u} = 4.58$ y $\bar{u} = -3.94$, respectivamente. Para comparar estas cifras y analizar los efectos viscoeléctricos y estéricos, la viscosidad en forma adimensional se puede expresar como

$$\bar{\eta} = 1 + \frac{\bar{f}}{\bar{\kappa}^2} \left(\frac{d\bar{\psi}}{d\bar{y}} \right)^2. \quad (4.3)$$

Como se puede ver en la ecuación anterior, cuando solo se tiene en cuenta el efecto viscoeléctrico, la viscosidad del fluido en las cercanías de las paredes aumenta proporcionalmente al gradiente del potencial eléctrico. Esta consideración conduce a una reducción en las magnitudes de las velocidades, como se muestra en la Fig. 4.3b con respecto a la Fig. 4.3a. Por el contrario, la inclusión del efecto estérico produce una disminución en el gradiente del potencial eléctrico, lo que conduce a una reducción en la viscosidad. De esta manera, en la Fig. 4.3c existe un ligero aumento en la magnitud de la velocidad del fluido con respecto a la Fig. 4.3b. Aunque las líneas de corriente en las Figs. 4.3b y c tienen un comportamiento similar, es notorio que el aumento de la viscosidad genera recirculaciones más largas y planas que la Fig. 4.3a. En el caso de la Fig. 4.3d cuando se consideran el número de onda par $n = 6$ y con $\omega = 0$, se observa que la magnitud máxima de los contornos de velocidad positiva y negativa son iguales en magnitud y forma pero con el signo opuesto, es decir, $\bar{u} = \pm 4.13$. Como en las figuras anteriores, aquí es más visible que para cada par de contornos de velocidad transversal ubicados en las cercanías de las paredes, se genera un contorno de velocidad con signo opuesto entre ellos en $\bar{y} = 0.5$; además, como resultado del mismo número de contornos positivos y negativos a lo largo del canal, se genera un estancamiento del fluido en todo el dominio geométrico, como se puede ver en las recirculaciones de las líneas de corriente. En las Figs. 4.3e y f, la magnitud de los contornos de velocidad disminuye con el efecto viscoeléctrico y contrarrestándose con la inclusión del efecto estérico como se mencionó con anterioridad. Por otro lado, el comportamiento del fluido es similar al descrito en la figura anterior. Diferente de los casos simétricos de las figuras anteriores, el ángulo de fase con valores de $\omega = 0.5\pi$ y $\omega = \pi$ genera un comportamiento asimétrico en el flujo de fluido como se muestra en las Figs. 4.3g,h,i con $n = 3$ y Figs. 4.3j,k,l con $n = 10$. En los casos de las Figs. 4.3g,h,i, las líneas de corriente siguen una dirección diagonal alrededor de las recirculaciones de forma irregular que se forman entre los contornos de velocidad cerca de las paredes del canal. Aquí se puede observar que en las inmediaciones de la entrada del canal, el fluido es atraído hacia la pared cargada adyacente a la pared inferior, sin embargo la velocidad del fluido no es suficiente para evitar la regresión de flujo que se da contiguo a $\bar{y} = 0.5$. Para el caso cuando el ángulo de fase toma un valor de $\omega = \pi$, los contornos de velocidad son de magnitud opuesta a lo largo de las paredes del canal, como se puede ver en las Figs. 4.3j,k,l. Una comparación entre el conjunto de las Figs. 4.3d,e,f con las Figs. 4.3j,k,l, ambos con un valor de n par, muestra que cuando $\omega = 0$ y $\omega = \pi$, respectivamente, resulta en contornos de velocidad simétricos y antisimétricos, produciendo recirculaciones transversales pares y unitarios a lo largo del canal, respectivamente. En todos los casos de la Fig. 4.3, las posiciones para los valores máximos y mínimos de las magnitudes de la velocidad cercanos a las paredes, se pueden estimar de acuerdo con las distribuciones de potencial eléctrico a través de las ecuaciones (4.1) y (4.2).

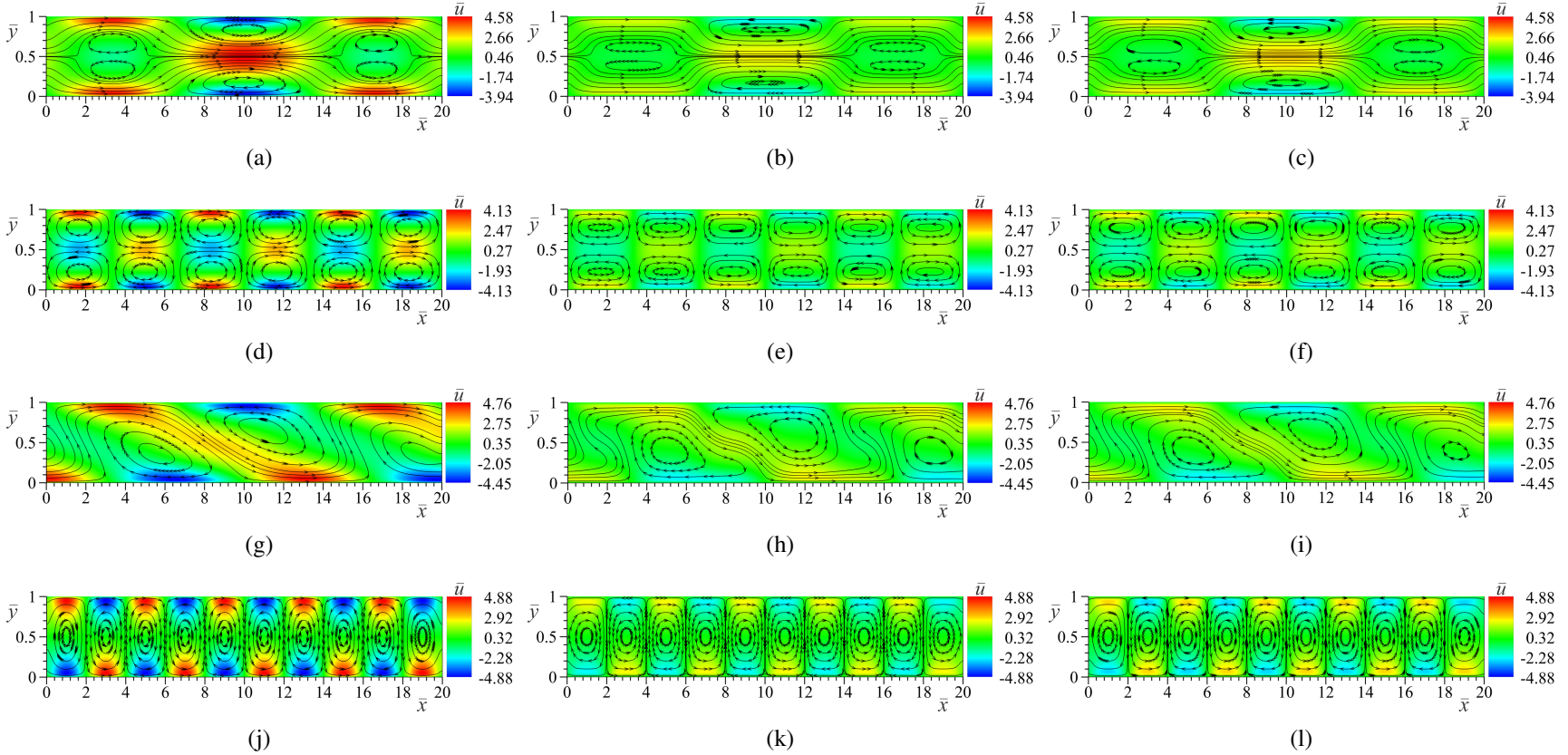


Figura 4.3: Contornos de velocidad adimensional como función de las coordenadas (\bar{x}, \bar{y}) , con $\xi = 0.05$, $\bar{\zeta}_{1,2} = 6$, $\bar{\kappa} = 50$ y diferentes valores de los parámetros viscoeléctricos y estéricos, número de onda y ángulo de fase; a) $\bar{f} = 0$, $\nu = 0$, $n = 3$, $\omega = 0$, b) $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0$, $n = 3$, $\omega = 0$, c) $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0.05$, $n = 3$, $\omega = 0$, d) $\bar{f} = 0$, $\nu = 0$, $n = 6$, $\omega = 0$, e) $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0$, $n = 6$, $\omega = 0$, f) $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0.05$, $n = 6$, $\omega = 0$, g) $\bar{f} = 0$, $\nu = 0$, $n = 3$, $\omega = 0.5\pi$, h) $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0$, $n = 3$, $\omega = 0.5\pi$, i) $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0.05$, $n = 3$, $\omega = 0.5\pi$, j) $\bar{f} = 0$, $\nu = 0$, $n = 10$, $\omega = 0.5\pi$, k) $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0$, $n = 10$, $\omega = 0.5\pi$ y l) $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0.05$, $n = 10$, $\omega = \pi$.

Con el fin de dilucidar de manera más precisa y cuantitativa los efectos viscoeléctricos y estéricos sobre el flujo electroosmótico de la Fig. 4.3, se seleccionan algunos perfiles de velocidad correspondientes a cada caso de esta figura y se presentan en la Fig. 4.4. En esta dirección, en el grupo de Figs. 4.4a-c, se observa que en posiciones equidistantes al centro del canal en el eje \bar{x} , que está en las posiciones $\bar{x} = 0.02, 3.3, 16.7, 19.98$, los perfiles de velocidad tienen la misma forma y magnitud. Como se puede ver en la Fig. 4.4a, los valores máximos y mínimos de la velocidad aparecen a la mitad de la longitud del canal en $\bar{x} = 10$ son $\bar{u} = 4.58$ y $\bar{u} = -3.94$, respectivamente. En esta figura en las posiciones $\bar{x} = 3.3, 10, 16.7$ se genera flujo inverso; sin embargo, está claro que el flujo positivo es predominante y produce un flujo volumétrico de $\bar{Q} = 1.23$. En la Fig. 4.4b, y debido al aumento de la viscosidad por los efectos viscoeléctricos a través de $\bar{f} = 0.07$, la magnitud máxima y mínima de la velocidad cae a $\bar{u} = 2.48$ y $\bar{u} = -1.79$ en $\bar{x} = 10$, ocasionando una disminución del flujo volumétrico de 39.83 % ($\bar{Q} = 0.74$) con respecto a la Fig. 4.4a. Además, al agregar el efecto estérico a los resultados anteriores, es decir, considerando $\bar{f} = 0.07$ y $\nu = 0.05$ de manera combinada, en la Fig. 4.4c, la magnitud máxima y mínima de la velocidad adquiere valores de $\bar{u} = 2.82$ y $\bar{u} = -2.09$ en $\bar{x} = 10$, mientras que el flujo volumétrico desciende 33.33 % ($\bar{Q} = 0.82$) con respecto a la Fig. 4.4a. Con esto, queda claro que el efecto estérico evita que se produzca un aumento de la viscosidad ocasionado por cargas excesivas en las proximidades de las paredes del canal. Como se ve en los resultados cualitativos presentados por los contornos de velocidad de la Fig. 4.3, el efecto estérico contrarresta el efecto viscoeléctrico. Contrario al análisis anterior, cuando el número de onda n es par, los perfiles de velocidad equidistantes al centro del canal, tienen la misma forma y magnitud pero en dirección opuesta, como se puede ver en las Figs. 4.4d, e y f. En las figuras anteriores para cualquier posición de \bar{x} , el flujo volumétrico a través de la ecuación (2.40) es cero; siendo más evidente para el perfil de velocidad plano con magnitud nula en $\bar{x} = 10$. Al comparar el siguiente conjunto de Figs. 4.4g, h, i, ($\bar{Q} = 0.6, 0.37, 0.4$) con las Figs. 4.4a, b, c ($\bar{Q} = 1.23, 0.74, 0.82$), bajo las mismas características de flujo, exceptuando que el ángulo de fase toma un valor de $\omega = 0.5\pi$, se puede determinar que los flujos volumétricos disminuyen en 51.21 %, 50 % y 51.21 %, respectivamente, en comparación cuando $\omega = 0$. Aquí es notorio que las velocidades mayores se presentan para regiones cercanas a la pared como se ven en los perfiles correspondientes a $\bar{x} = 0.02, 3.3, 16.7$. Las Figs. 4.4j, k, l, muestran que la velocidad antisimétrica genera un flujo volumétrico nulo. Aquí, es visible que en el centro del canal para cualquier posición de \bar{x} , la magnitud de la velocidad es cero. En este contexto, tomando valores de $0 < \omega < 2\pi$ como se muestra en las Figs. 4.4g-i para $\omega = 0.5\pi$ y en las Figs. 4.4j-l para $\omega = \pi$, se obtienen perfiles de velocidad asimétricos y antisimétricos, respectivamente; mientras que para $\omega = 0$ o $\omega = 2\pi$ (para un período completo), como se muestra en las Figs. 4.4a-f, se recuperan los perfiles de velocidad simétricos.

La Fig. 4.5, muestra los campos de presión inducidos de las Figs. 4.3a, d, g y j, casos en los que los efectos viscoeléctricos y estéricos están ausentes. Para todos los casos de la Fig. 4.5, se presenta una competencia entre presiones negativas y positivas inducidas debido a potenciales zeta heterogéneos. En la Fig. 4.5a, se puede observar que las magnitudes de presión positiva y negativa tienen la misma magnitud, es decir, son antisimétricas. Con ayuda de las líneas de corriente de la Fig. 4.5a, se puede ver que las presiones mayores representadas en color rojo se dan en la región de $\bar{x} = 4 - \bar{x} = 8$, donde las líneas de corriente convergen después de pasar alrededor de las recirculaciones que se dan en $\bar{x} = 3.3$. Cuando el fluido circula hacia el centro del canal en $\bar{x} = 10$, la velocidad aumenta mientras que la presión desciende hasta un valor de cero; al salir de dicha región, el fluido es atraído hacia las paredes entre $\bar{x} = 12 - -\bar{x} = 16$ y obstruido

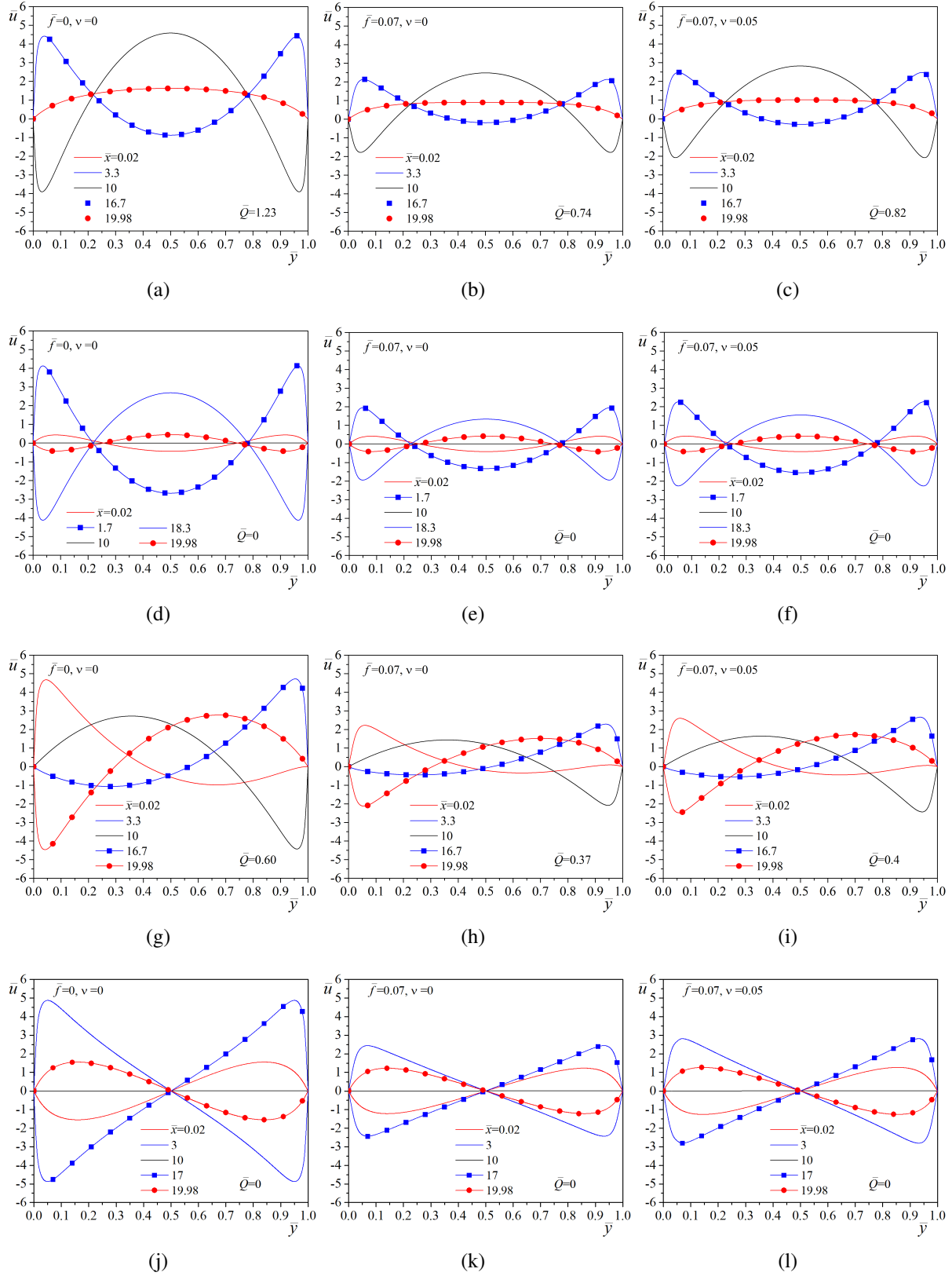


Figura 4.4: Perfiles de velocidad dimensional correspondientes a la Fig. 4.3 como función de la coordenada \bar{y} y para diferentes posiciones de \bar{x} ; a-c) $n = 3$, $\omega = 0$, d-f) $n = 6$, $\omega = 0$, g-i) $n = 3$, $\omega = 0.5\pi$ y j-l) $n = 10$, $\omega = \pi$.

por las recirculaciones de $\bar{x} = 16.7$ por lo que su velocidad disminuye produciendo presiones negativas. Por otro lado, en la Fig. 4.5b se puede observar que las presiones positivas son mucho mayores que las negativas, esta última tendiendo a cero. Los contornos de presión en azul se dan cuando el fluido es atraído hacia las paredes del canal como sucede en la entrada del canal, mientras que las presiones más altas surgen cuando el flujo se dirige hacia la parte central, como se puede apreciar con ayuda de las líneas de corriente de la Fig. 4.3d, en la región que comprende de $\bar{x} = 2.3 - \bar{x} = 4.3$. Este comportamiento es sucesivo en todo el dominio del eje longitudinal. La Fig. 4.5c, muestra un comportamiento similar al descrito en las 4.5a, sin embargo, se observa una inclinación de la distribución de presión debido a que en la pared inferior inicia con una velocidad positiva máxima. En las Figs. 4.5a, b y c, la presión inducida se distribuye de manera casi uniforme en la sección transversal del canal y siendo ligeramente cóncavo en la región central en $\bar{y} = 0.5$, esto sucede cuando $0 \leq \omega < \pi$ y $\pi < \omega \leq 2\pi$. Por otro lado en la Fig. 4.5d para $\omega = \pi$, las presiones inducidas son más fuertes en las regiones cercanas a las paredes.

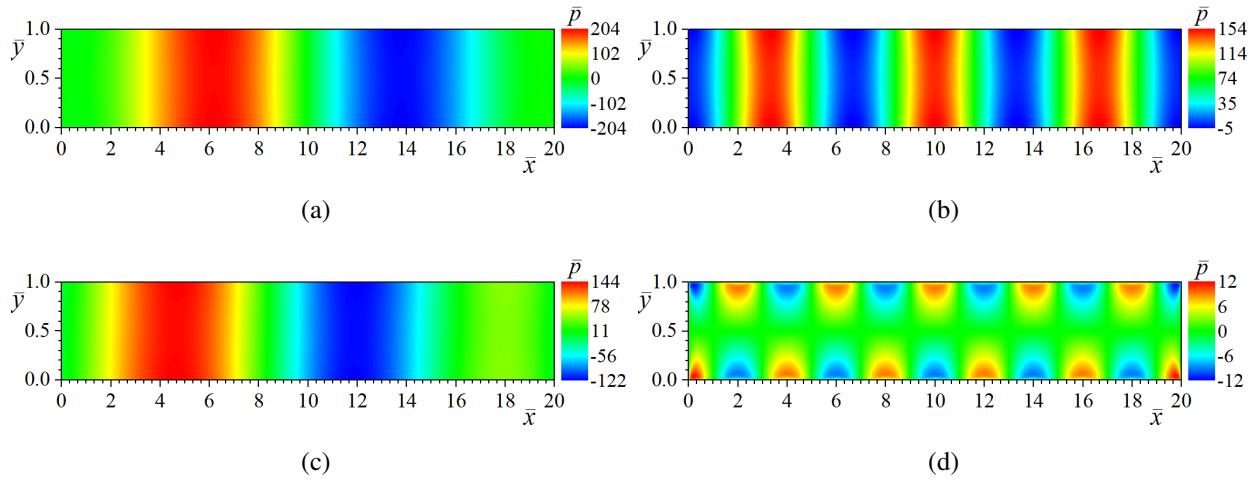


Figura 4.5: Presión inducida adimensional como función de las coordenadas (\bar{x}, \bar{y}) , con $\xi = 0.05$, $\bar{\zeta}_{1,2} = 6$, $\bar{\kappa} = 50$, $\bar{f} = 0$ y $\nu = 0$; a) $n = 3$, $\omega = 0$, b) $n = 6$, $\omega = 0$, c) $n = 3$, $\omega = 0.5\pi$, y d) $n = 10$, $\omega = \pi$.

Para ampliar los resultados cualitativos sobre las distribuciones de presión inducida que se muestran en la figura anterior, en la Fig. 4.6 se presentan los perfiles de presión inducidos longitudinales para una posición fija de $\bar{y} = 0.5$, que se obtienen a partir de campo de flujo de la Fig. 4.3. Por lo tanto, las diferentes líneas representan las distribuciones de presión para los tres flujos electroosmóticos principales estudiados aquí, flujo con $\bar{f} = 0$ y $\nu = 0$ (líneas negras), flujo con $\bar{f} = 0.07$ y $\nu = 0$ (líneas rojas), y flujo con $\bar{f} = 0.07$ y $\nu = 0.05$ (líneas azules). Al observar los resultados en la Fig. 4.6, está claro que la magnitud de la presión inducida a lo largo del canal disminuye principalmente por tres razones; la primera se debe a la presencia del efecto viscoeléctrico que aumenta la viscosidad (ver Figs. 4.6a-c, al comparar líneas negras y rojas); la segunda se debe al aumento del número de onda que produce un aumento correspondiente de las recirculaciones de flujo (por ejemplo, comparar las líneas negras entre las Figs. 4.6a y b); y la tercera razón se debe a que el ángulo de fase toma valores de $0 < \omega < 2\pi$, lo que rompe la simetría del flujo (por ejemplo, comparar las líneas negras de las Figs. 4.6a y c). Las tres razones antes mencionadas, disminuyen la velocidad de flujo; por lo tanto, al mantener una misma fuerza electroosmótica mediante $\bar{\zeta}_{1,2} = 6$, los efectos de presión necesarios para equilibrar las fuerzas viscosas también disminu-

yen. De manera contraria, en los resultados de la Fig. 4.6, el efecto estérico siempre aumenta la presión inducida (ver Figs. 4.6a-c, al comparar las líneas roja y azul). Como caso particular, para el caso antisimétrico cuando $\omega = \pi$, la presión inducida tiende a cero lejos de las paredes del canal como se muestra en la Fig. 4.6d en $\bar{y} = 0.5$ a lo largo de toda la longitud del canal.

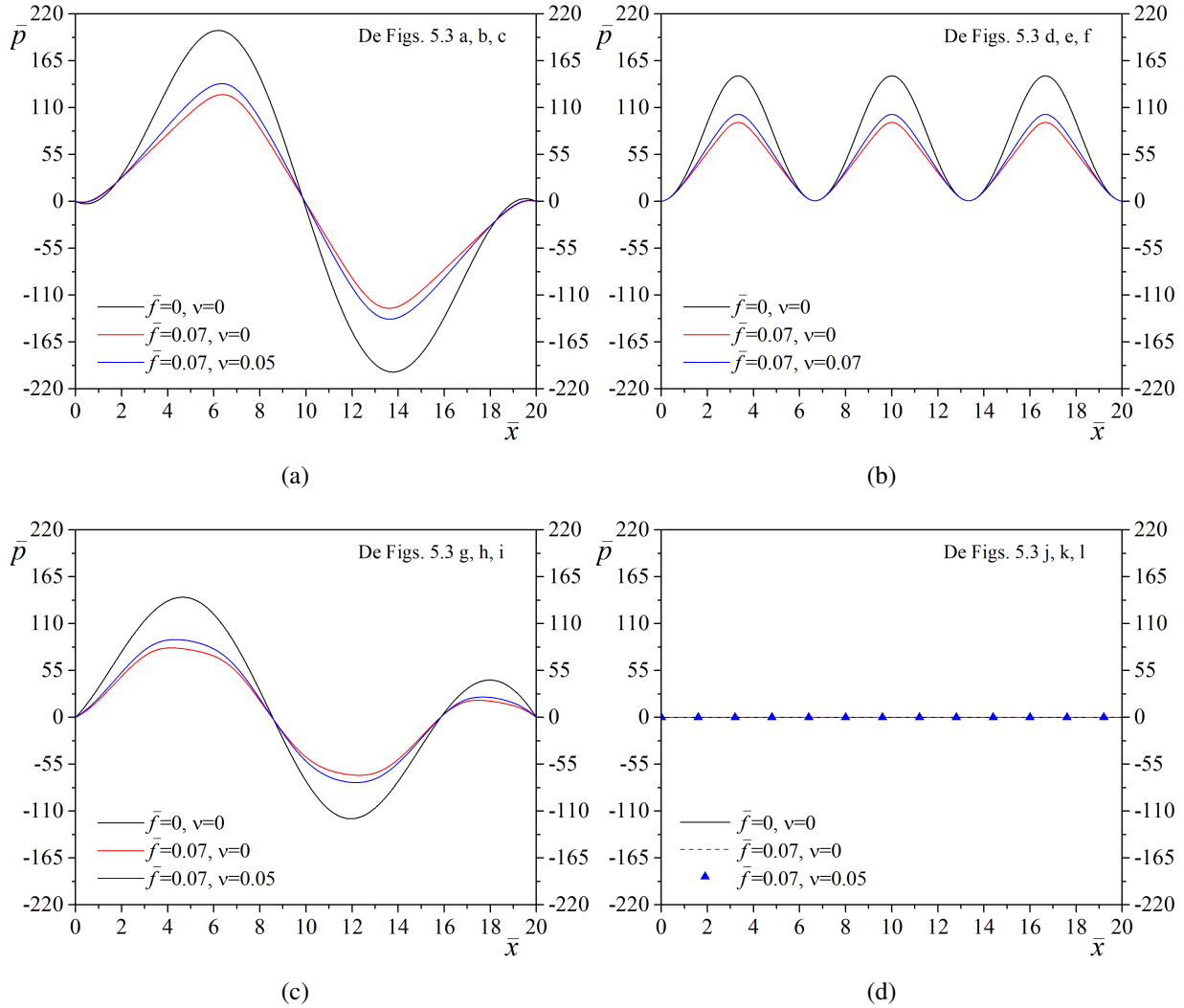


Figura 4.6: Perfiles de presión inducida adimensional como función del eje \bar{x} , con $\xi = 0.05$, $\bar{\zeta}_{1,2} = 6$, $\bar{\kappa} = 50$, y diferentes valores de \bar{f} , ν ; a) $n = 3$, $\omega = 0$, b) $n = 6$, $\omega = 0$, c) $n = 3$, $\omega = 0.5\pi$, d) $n = 10$, $\omega = \pi$.

La Fig. 4.7 muestra el flujo volumétrico \bar{Q} en función de la amplitud del potencial zeta adimensional $\bar{\zeta}_{1,2}$, el ángulo de fase ω y el parámetro electrocinético $\bar{\kappa}$, respectivamente. Con el fin de comparar los resultados del flujo volumétrico, en las Figs. 4.7a, b y c, se toman en cuenta dos números de onda $n = 3$ (líneas azules) y $n = 5$ (líneas rojas). Además, las tres combinaciones para los efectos viscoeléctricos y estéricos utilizados en el presente trabajo a través de \bar{f} y ν , también están presentes aquí; que son, sin efectos $\bar{f} = 0, \nu = 0$, únicamente el efecto viscoeléctrico con $\bar{f} = 0.07$ y efectos combinados con $\bar{f} = 0.07$ y $\nu = 0.05$. La Fig. 4.7a, muestra el flujo volumétrico en función del potencial zeta; aquí se observa claramente que en ausencia de los efectos

viscoeléctricos y estéricos, el flujo volumétrico tiene un comportamiento lineal y es directamente proporcional al potencial zeta, como se puede ver en las líneas azul y roja correspondientes. Sin

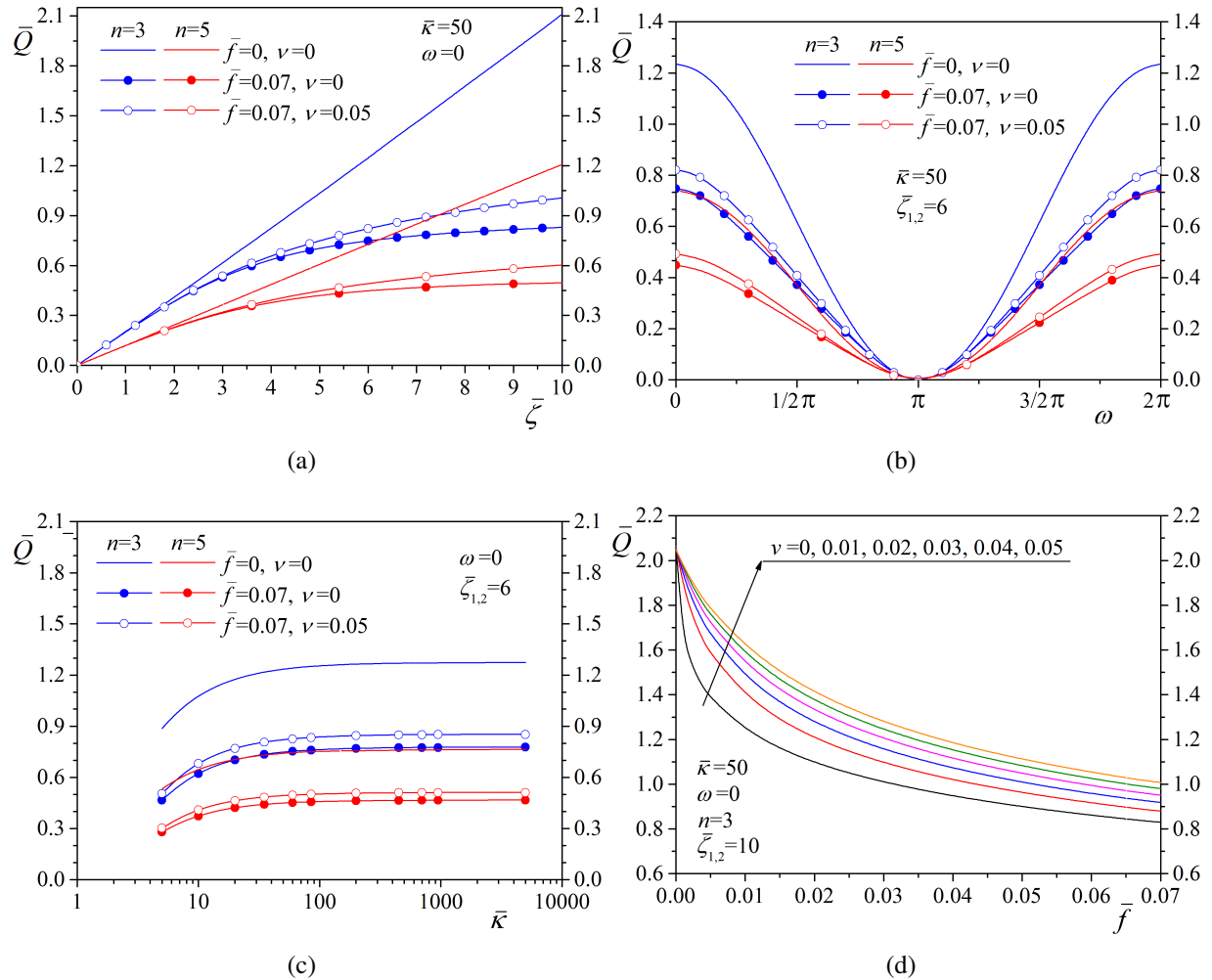


Figura 4.7: Flujo volumétrico adimensional como función de a) potencial zeta $\bar{\zeta} = \bar{\zeta}_{1,2}$, b) ángulo de fase ω , c) parámetro electrocinético y d) parámetro viscoeléctrico \bar{k} , con diferentes valores de n y ν .

embargo, como se mencionó anteriormente, el gradiente del potencial eléctrico cerca de las paredes del canal aumenta con el incremento del potencial zeta, por lo tanto, también se amplifica la viscosidad del fluido. Estas variaciones conducen a un comportamiento no lineal en el flujo volumétrico, causando disminuciones en su magnitud conforme aumentan los potenciales zeta. Este comportamiento no lineal se produce para valores del potencial zeta de $\bar{\zeta} \geq 1.5$. Para el valor máximo del potencial zeta cuando $\bar{\zeta}_{1,2} = 10$ y para $n = 3$, el flujo volumétrico va de $\bar{Q}_{\bar{f}=0} = 2.19$ a $\bar{Q}_{\bar{f}=0.07} = 0.83$, disminuyendo un 62.1%. Por otro lado, al comparar las líneas azul y roja para las cuales los efectos viscoeléctricos y estéricos están ausentes y con el mismo valor de $\bar{\zeta}_{1,2} = 10$, muestra que el flujo volumétrico va de $\bar{Q}_{n=3} = 2.19$ a $\bar{Q}_{n=5} = 1.23$ disminuyendo en 44.1%; por lo tanto, a medida que aumenta el número de onda, disminuye el caudal. Además, como se ve en el análisis de la velocidad del flujo, el efecto estérico genera un debilitamiento de la viscosidad del fluido, por lo tanto, contrarresta el efecto viscoeléctrico generando un ligero aumento del flujo

volumétrico de 8.2% con $\bar{\zeta}_{1,2} = 10$ aumentando de $\bar{Q} = 0.83$ a $\bar{Q} = 1.01$ con $n = 3$, y de 9.7% cuando va de $\bar{Q} = 0.49$ to $\bar{Q} = 0.61$ con $n = 5$. Todos los porcentajes obtenidos aquí se referencian a partir de las condiciones de flujo donde los efectos viscoeléctricos y estéricos están ausentes. Es importante mencionar que aunque el efecto estérico comúnmente se considera para potenciales zeta altos ($\bar{\zeta} = \ln(\nu^{-1}) \approx 13$ para soluciones diluidas), en este trabajo tal efecto tiene influencia sobre el flujo desde valores del potencial de zeta de $\bar{\zeta} \approx 3$, cuando se tienen en cuenta altas concentraciones iónicas de los electrolitos y tamaños iónicos grandes. La Fig. 4.7b muestra el flujo volumétrico en función del ángulo de fase; como se puede ver en esta figura, el valor máximo del flujo volumétrico se obtiene para el caso simétrico, es decir, con $\omega = 0$ y $\omega = 2\pi$, mientras que en el caso antisimétrico cuando $\omega = 2\pi$ es cero. También se puede observar la disminución de la magnitud del flujo volumétrico debido al efecto viscoeléctrico y el aumento debido al efecto estérico. Además, la Fig. 4.7c muestra que el flujo volumétrico aumenta drásticamente con los primeros valores del parámetro electrocinético hasta obtener una tendencia constante con el aumento de $\bar{\kappa}$. A partir de esta figura y especificando que $n = 3$, $\bar{\kappa} = 5$, $\nu = 0$, se puede determinar que $\bar{Q} = 0.88$ con $\bar{f} = 0$ y con $\bar{f} = 0.07$ se tiene que $\bar{Q} = 0.46$, es decir, el flujo volumétrico se reduce 47.42%; mientras que cuando $n = 3$, $\bar{\kappa} = 50$, $\nu = 0$, se tiene que $\bar{Q} = 1.23$ con $\bar{f} = 0$ y $\bar{Q} = 0.74$ con $\bar{f} = 0.07$, produciendo un decremento de 39.41%; por lo tanto, el efecto viscoeléctrico es más fuerte con la reducción del tamaño del canal a través del parámetro $\bar{\kappa}$. El comportamiento antes mencionado se repite para $n = 5$. Para cualquier caso presentado en la Fig. 4.7c, el efecto estérico contrarresta el efecto viscoeléctrico como se explicó anteriormente. Finalmente, el análisis en el incremento de la concentración iónica sobre el flujo volumétrico se muestra claramente en la Fig. 4.7d a través del parámetro viscoeléctrico \bar{f} ; aquí, los parámetros adimensionales seleccionados son $\bar{\zeta}_{1,2} = 10$, $n = 3$, $\omega = 0$ y utilizando diferentes valores del factor estérico ν . En esta figura se observa que el incremento de \bar{f} conduce a un aumento de la viscosidad; esto se debe al aumentar las concentraciones iónicas la longitud de Debye se vuelve más delgada, por lo tanto, los gradientes del potencial eléctrico cercanos a las cargas superficiales crecen (ve la ecuación Ec. (4.3)); por esta razón, el flujo volumétrico disminuye. Por otro lado, cuando la concentración aumenta el valor de ν también crece, contrarrestando el efecto viscoeléctrico. Sin embargo, como se puede ver en esta figura, el efecto estérico no es suficiente para contrarrestar completamente el efecto viscoeléctrico sobre el flujo, porque el primero está restringido por los tamaños iónicos y los valores de las concentraciones iónicas en las que existe físicamente un flujo electroosmótico; de esta manera, el efecto viscoeléctrico es dominante sobre el comportamiento del flujo, ya que se pueden alcanzar potenciales zeta de superficie superiores a los utilizados aquí [51, 66].

4.2.2. Caso II Condiciones de entrada con $\bar{u}=\bar{u}_{en}$ y a la salida con flujo desarrollado $\frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{x}}=0$

Para realizar una comparación con los resultados hidrodinámicos anteriores, en este apartado se consideran las mismas características de los parámetros utilizados, teniendo como única diferencia las condiciones de entrada y salida. Aquí, se considera una velocidad dada $\bar{u}_{in} = 1$ en la entrada, mientras que en la salida se considera que $\frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{x}} = 0$. En este sentido, la Fig. 4.8 muestra los contornos de velocidad adimensional y líneas de corriente equivalentes a la Fig. 4.3. Teniendo en cuenta lo antes mencionado, en las Figs. 4.8a-c se pueden observar que los efectos viscoeléctricos y estéricos tienen la misma injerencia sobre la velocidad del flujo aunque en magnitudes distintas en comparación con las Figs. 4.3a-c. Aquí, también se puede observar con ayuda de las líneas de

corriente que el flujo es atraído en dirección axial hacia las paredes del canal donde se encuentran los contornos con velocidades positivas; sin embargo, diferente de las figuras en comparación, el par de recirculaciones hacia la mitad del canal en $\bar{x} = 3.3$ y $\bar{x} = 16.7$ desaparece cuando únicamente se toma en cuenta el efecto viscoeléctrico en la Fig. 4.8b. Esto se debe a que las velocidades electroosmóticas que se generan en la EDL se reducen con el incremento de la viscosidad y por lo tanto no son suficientes para llegar hacia el centro del canal, generar flujo inverso y evitar el arrastre del fluido en dirección axial producidos por la velocidad de entrada. Por esta razón en esta figura se puede observar que en $\bar{y} = 0.5$ existe una línea de corriente que no es obstaculizado por ninguna recirculación. También, cuando se considera el efecto estérico la viscosidad es contrarrestada produciendo un aumento en la velocidad electroosmótica suficiente para crear recirculaciones en el flujo aunque de menor tamaño, como se muestra en la Fig. 4.8c. Por otro lado, una comparación entre las Figs. 4.3d-f con las Fig. 4.8d-f muestran que cuando se tiene número de ondas pares existe flujo volumétrico ya que este depende de la velocidad de entrada y evita un estancamiento de flujo como sucede con las condiciones de entrada y salida antes analizadas. Aquí también se puede observar que la disminución de la magnitud de la velocidad electroosmótica por el efecto viscoeléctrico, provoca que la velocidad de entrada evite la formación de los pares de recirculaciones que se forman adyacentes al centro del canal en $\bar{x} = 1.7, 8.3, 15$, en comparación con las Figs. 4.8d y f. En las figuras hasta aquí analizadas, se puede observar que al tener una velocidad de entrada las magnitudes de los contornos de velocidad negativa que se forman entre contornos positivos cercanos a las paredes, disminuyen en comparación con las respectivas figuras de 4.3. Por otro lado, el caso asimétrico equivalente a las Figs. 4.3g-i, se presentan en las Figs. 4.8g-i. Una comparación entre ambas figuras muestra que cuando el movimiento del fluido solo depende de la velocidad electroosmótica, es decir condiciones de entrada y salida $\bar{p} = 0$, en la entrada del canal existe una regresión de flujo fuera del dominio de estudio debido a las velocidades negativas que se presentan cerca de la entrada. Por otro lado, la velocidad de entrada externa compite con la velocidad negativa produciendo una pequeña recirculación cercano a la entrada del canal como se puede ver en la Fig. 4.8g. Al disminuir la velocidad electroosmótica por las variaciones de la viscosidad de la Fig. 4.8h e i, las recirculaciones desaparecen ya que la velocidad de entrada es predominante, sin embargo a la salida del canal de las figuras mencionadas se generan recirculaciones debido a la disminución de la velocidad positiva a la salida y que entran en competencia con los flujos inversos. Finalmente, el caso antisimétrico de las Figs. 4.8j-l muestran que la velocidad de entrada es suficiente para romper con el estancamiento de flujo que produce al considerarse presiones de entrada y salida cero.

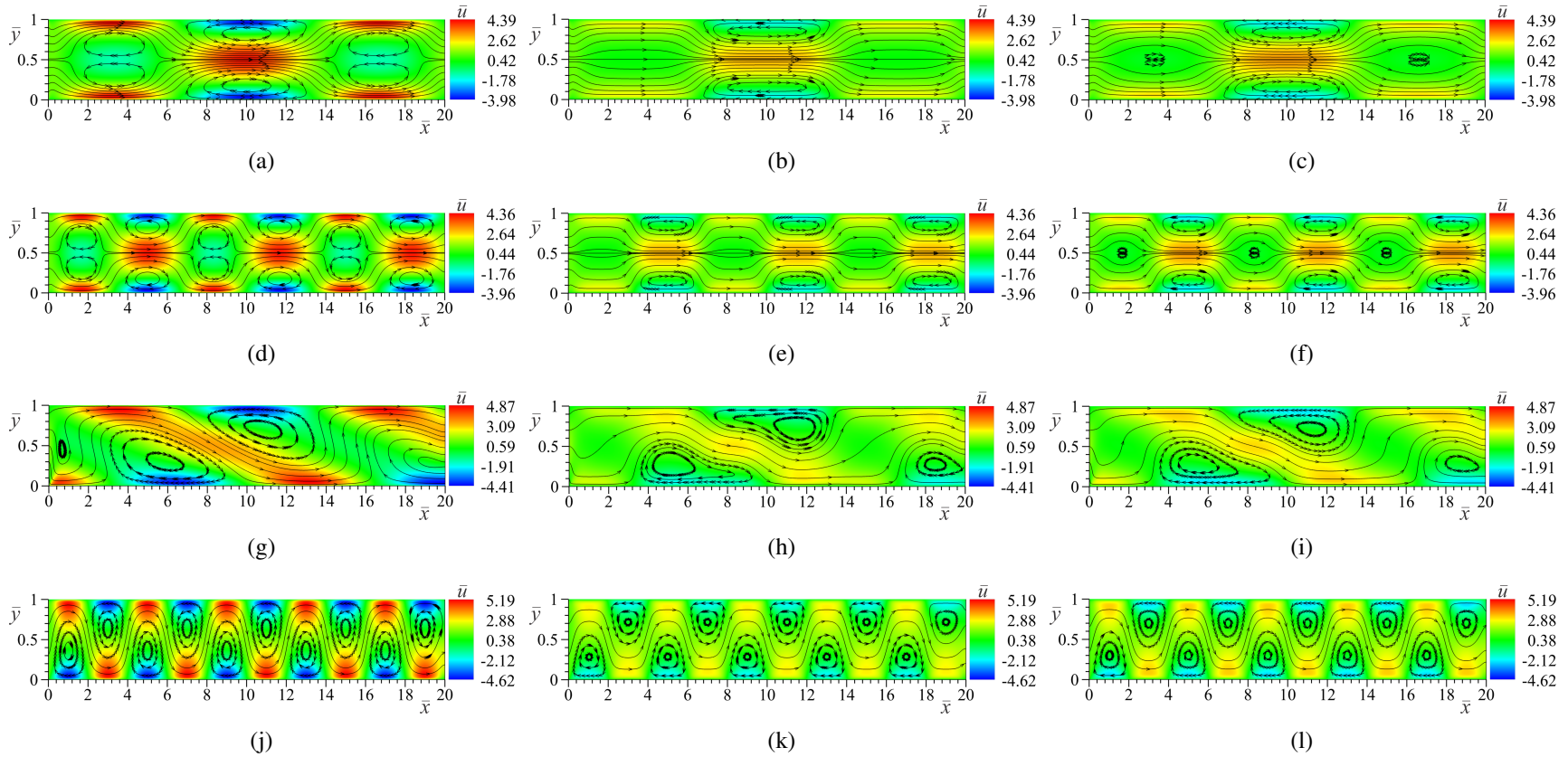


Figura 4.8: Contornos de velocidad adimensional como función de las coordenadas (\bar{x}, \bar{y}) , con $\xi = 0.05$, $\bar{\zeta}_{1,2} = 6$, $\bar{\kappa} = 50$ y diferentes valores de los parámetros viscoeléctricos y estéricos, número de onda y ángulo de fase; a) $\bar{f} = 0$, $\nu = 0$, $n = 3$, $\omega = 0$, b) $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0$, $n = 3$, $\omega = 0$, c) $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0.05$, $n = 3$, $\omega = 0$, d) $\bar{f} = 0$, $\nu = 0$, $n = 6$, $\omega = 0$, e) $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0$, $n = 6$, $\omega = 0$, f) $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0.05$, $n = 6$, $\omega = 0$, g) $\bar{f} = 0$, $\nu = 0$, $n = 3$, $\omega = 0.5\pi$, h) $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0$, $n = 3$, $\omega = 0.5\pi$, i) $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0.05$, $n = 3$, $\omega = 0.5\pi$, j) $\bar{f} = 0$, $\nu = 0$, $n = 10$, $\omega = 0.5\pi$, k) $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0$, $n = 10$, $\omega = 0.5\pi$ y l) $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0.05$, $n = 10$, $\omega = \pi$.

La Fig. 4.9, muestra los perfiles de velocidad para diferentes posiciones del eje axial \bar{x} de la Fig. 4.8 y que se comparan con los perfiles de la Fig. 4.4. En esta dirección, en las Figs. 4.9a-c se pueden observar que los perfiles de velocidad en las cercanías de la entrada del canal en $\bar{x} = 0.02$ (líneas rojas continuas) presentan la forma de flujo tapón debido a la consideración de una velocidad de entrada, mientras que a la salida en $\bar{x} = 19.98$ (círculos rojos) se presentan perfiles parabólicos semejantes a las correspondientes Figs. 4.4a-c, en donde la velocidades electroosmóticas tienen más influencia. Mientras que en las Figs. 4.4a-c la velocidad máxima se presenta siempre en el centro del canal en $(\bar{x} = 10, \bar{y} = 0.5)$, en la 4.9a en donde los efectos estéricos y viscoelétricos están ausentes, la velocidad máxima se encuentra en los contornos positivos que se forman en la paredes y que corresponden a los perfiles de $\bar{x} = 3.3, 16.8$ (líneas continuas y con símbolos azules, respectivamente), en los puntos $\bar{y} = 0.03, 0.97$. Esto se debe a que la velocidad de entrada es atraída hacia las paredes del canal sumándose a las velocidades electroosmóticas que ahí se generan. Cuando el flujo llega hacia la mitad del largo del canal la velocidad de entrada disminuye su influencia por el bloqueo que se produce por las recirculaciones que se forman en las cercanías de la entrada y por lo tanto, la velocidad electroosmótica prevalece sobre el movimiento del fluido hasta ser atraída nuevamente hacia las paredes cercanas a la salida. Por otro lado, al disminuir la velocidad electroosmótica debido al efecto viscoelétrico en la Fig. 4.9b, la velocidad de entrada no tiene ningún bloqueo en $\bar{y} = 0.5$ por lo que su influencia llega hasta el contorno positivo presente en $\bar{x} = 10$ aumentando su magnitud y por lo tanto alcanza su magnitud máxima en esta región. Como el caso anterior, también en la siguiente Fig. 4.9c, se puede observar que las velocidades máximas se presentan en el centro del canal, ya que el efecto estérico no es suficiente para impedir la injerencia de la velocidad de entrada sobre dicha región. Basándose en la magnitud de la velocidad del centro del canal (líneas continuas negras) las Figs. 4.9b y c disminuyen 32.38 % y 26.95 %, respectivamente, en comparación con la 4.9a. Por otro lado, al comparar las Fig. 4.4d-f con las Fig. 4.9d-f, se puede ver que en el primer conjunto de figuras las velocidades máximas se dan en la región de los contornos positivos cercanos a las paredes, mientras que el segundo grupo se presenta un comportamiento similar a lo descrito en la Fig. 4.9a-c, donde solamente en la Fig. 4.9d se presentan las magnitudes máximas en las cercanías de la pared, mientras que las dos restantes Figs. 4.9e y f predominan en las región central en $\bar{y} = 0.05$; para esta figura se tomó únicamente el perfil en $\bar{x} = 18.8$ donde se encuentra un contorno positivo. Tomando como referencia la velocidad mayor de la Fig. 4.9d en $\bar{x} = 18.3$ las velocidades de e y f, disminuyeron 31.57 % y 26.31 %, respectivamente. Otra comparación que se analiza se da entre las Figs. 4.4g-i y las presentadas en las Figs. 4.9g-i. Diferente al primer conjunto de figuras en la entrada del canal, aquí la magnitud de la velocidad contiguo a la pared inferior presenta un pico de menor amplitud debido a la predominancia de la velocidad de entrada y que lleva forma de flujo tapón como se ve en la línea roja en $\bar{x} = 0.02$. Además, esta velocidad evita que en la entrada se presenten velocidades negativas. Por su parte en las Figs. 4.9j-l muestra el caso antisimétrico y que es equivalente a las Figs. 4.4j-l. En estas figuras se muestra que debido a que existe un flujo de fluido provocado por la velocidad de entrada, la forma de la pendiente del perfil de velocidad en $\bar{x} = 3, 17$ sea cóncavo. En estas figuras el descenso de la magnitud de la velocidad mayor en el perfil posicionado en $\bar{x} = 3, 17$ es de 44.98 % para la Fig. 4.9k y de 38.22 % para la Fig. 4.9l, tomando como referencia la Fig. 4.9j. Todas las figuras de 4.9, presentan el mismo flujo volumétrico de $\bar{Q} = 1$ que depende de la magnitud del flujo de entrada.

La presión inducida adimensional como función de las coordenadas (\bar{x}, \bar{y}) , se muestran en la Fig. 4.10 y que corresponden a las Figs. 4.8a, d, g y j, en donde no se consideran los efectos estéri-

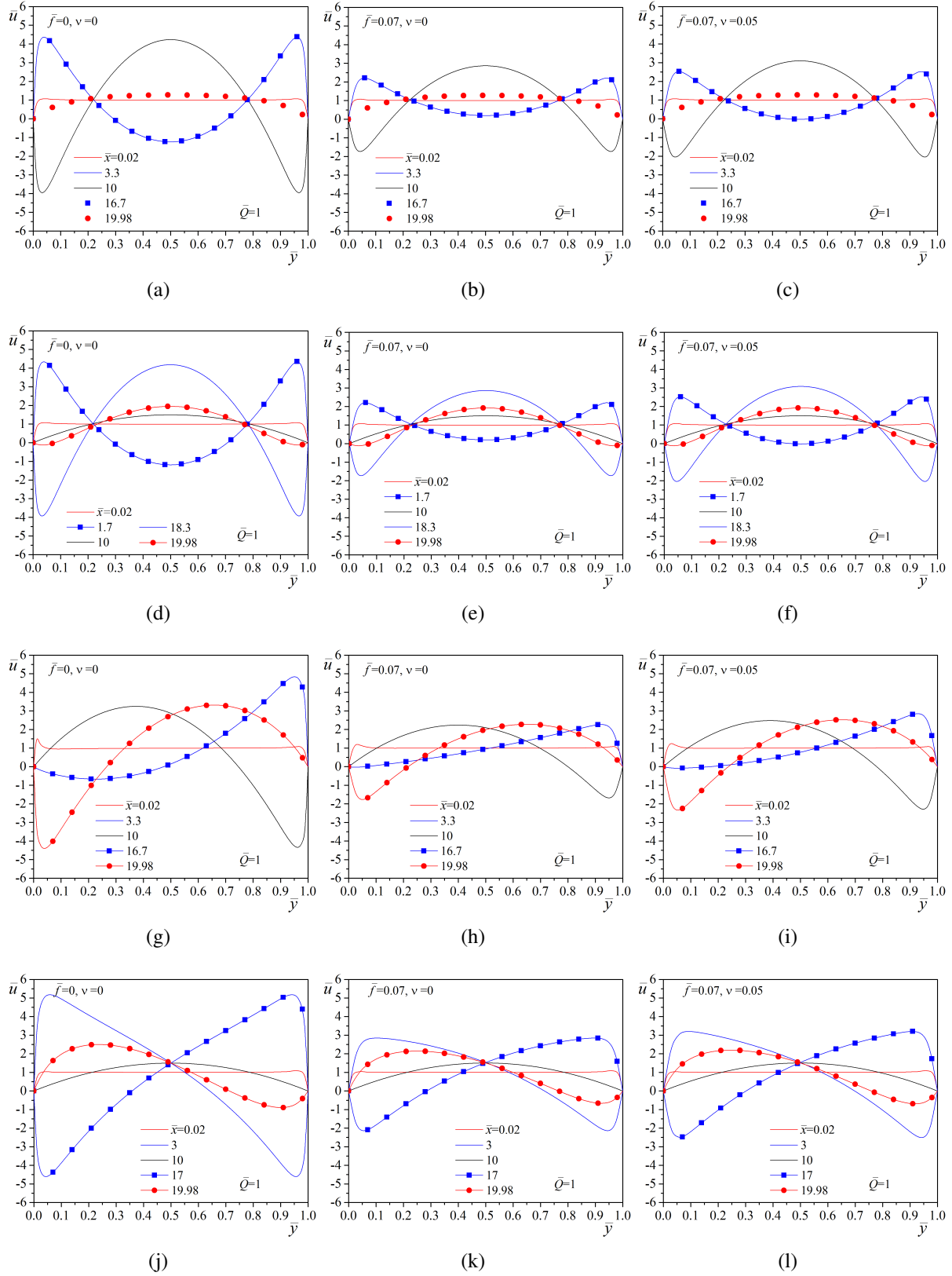


Figura 4.9: Perfiles de velocidad dimensional correspondientes a la Fig. 4.8 como función de la coordenada \bar{y} y para diferentes posiciones de \bar{x} ; a-c) $n = 3$, $\omega = 0$, d-f) $n = 6$, $\omega = 0$, g-i) $n = 3$, $\omega = 0.5\pi$ y j-l) $n = 10$, $\omega = \pi$.

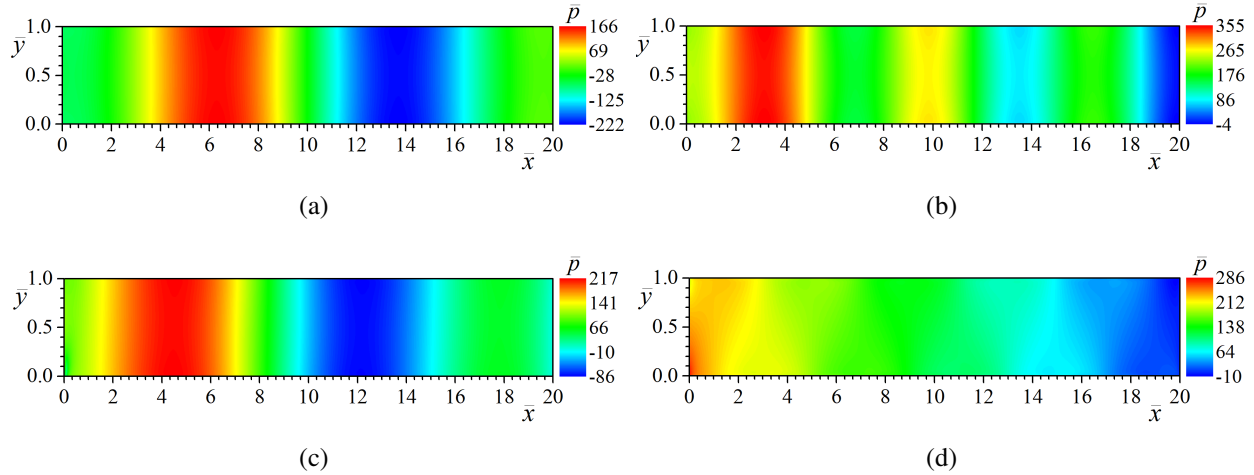


Figura 4.10: Presión inducida adimensional como función de las coordenadas (\bar{x}, \bar{y}) , con $\xi = 0.05$, $\bar{\zeta}_{1,2} = 6$, $\bar{\kappa} = 50$, $\bar{f} = 0$ y $\nu = 0$; a) $n = 3$, $\omega = 0$, b) $n = 6$, $\omega = 0$, c) $n = 3$, $\omega = 0.5\pi$, y d) $n = 10$, $\omega = \pi$.

cos y viscoeléctricos. Contrario a los casos observados en la Fig. 4.5, en estas figuras se puede observar que la velocidad impuesta en la entrada produce una presión diferente de cero en dicha región. En la Fig. 4.10a, la magnitud de la presión positiva es menor que cuando se tienen condiciones de entrada y salida con presión cero, debido a que existe una competencia entre la presión que trae el fluido de entrada y la generada por las fuerzas electroosmóticas en las paredes. Por tal razón se necesita una magnitud mayor en la presión negativa para que exista un equilibrio de presiones y a la salida se obtenga presión cero. Por su parte, para el caso de ondas pares que se muestra en la Fig. 4.10b, la presión tiene un incremento en la región central donde convergen las líneas de corriente de la Fig. 4.8d entre $\bar{x} = 2 - \bar{x} = 4$ y disminuye hacia la salida del canal debido a las obstrucciones generados por las recirculaciones. La Fig. 4.10c tiene un comportamiento similar a la Fig. 4.10c con una inclinación de la distribución de presión, ya que en la entrada de la pared inferior se encuentra cargado con un potencial zeta máximo y el fluido de entrada es atraído hacia dicha región. Además, en la Fig. 4.10d cuando se presentan distribuciones de potencial zeta antisimétricas, se puede ver que las presiones más fuertes se presentan en la entrada del canal en la esquina de la pared inferior, ya que en esa región existe una competencia entre flujo inverso y la entrada de flujo impuesto. En la Fig. 4.11 se muestra los perfiles de presión adimensional como función del eje longitudinal \bar{x} para una posición del eje transversal en $\bar{y} = 0.5$ y que corresponden a las distribuciones de velocidad de la Fig. 4.8. En este sentido, en ausencia de los efectos viscoeléctricos y estéricos (líneas negras) la presión en la entrada es menor que cuando estos se consideran (líneas azules y rojas). Lo anterior se debe a que al aumentar la viscosidad del fluido, las recirculaciones que se generan en las cercanías de la entrada se debilitan o desaparecen como se explicó anteriormente y esto favorece a que la presión que trae la velocidad de entrada tenga una mayor influencia sobre el flujo. Como se observa en la línea negra de la Fig. 4.11a, la presión negativa que se genera por las fuerzas electroosmóticas es mayor que la presión entrante generado por la velocidad impuesta. Al aumentar la viscosidad las presiones electroosmóticas disminuyen por lo que la presión de entrada tiene mayor influencia manifestándose en presiones positivas en la entrada (ver líneas azules y rojas). Cuando el número de ondas se incrementa a $n = 6$, Fig. 4.11b, en la entrada se mantiene presión positiva debido a que las recirculaciones de las velocidades des-

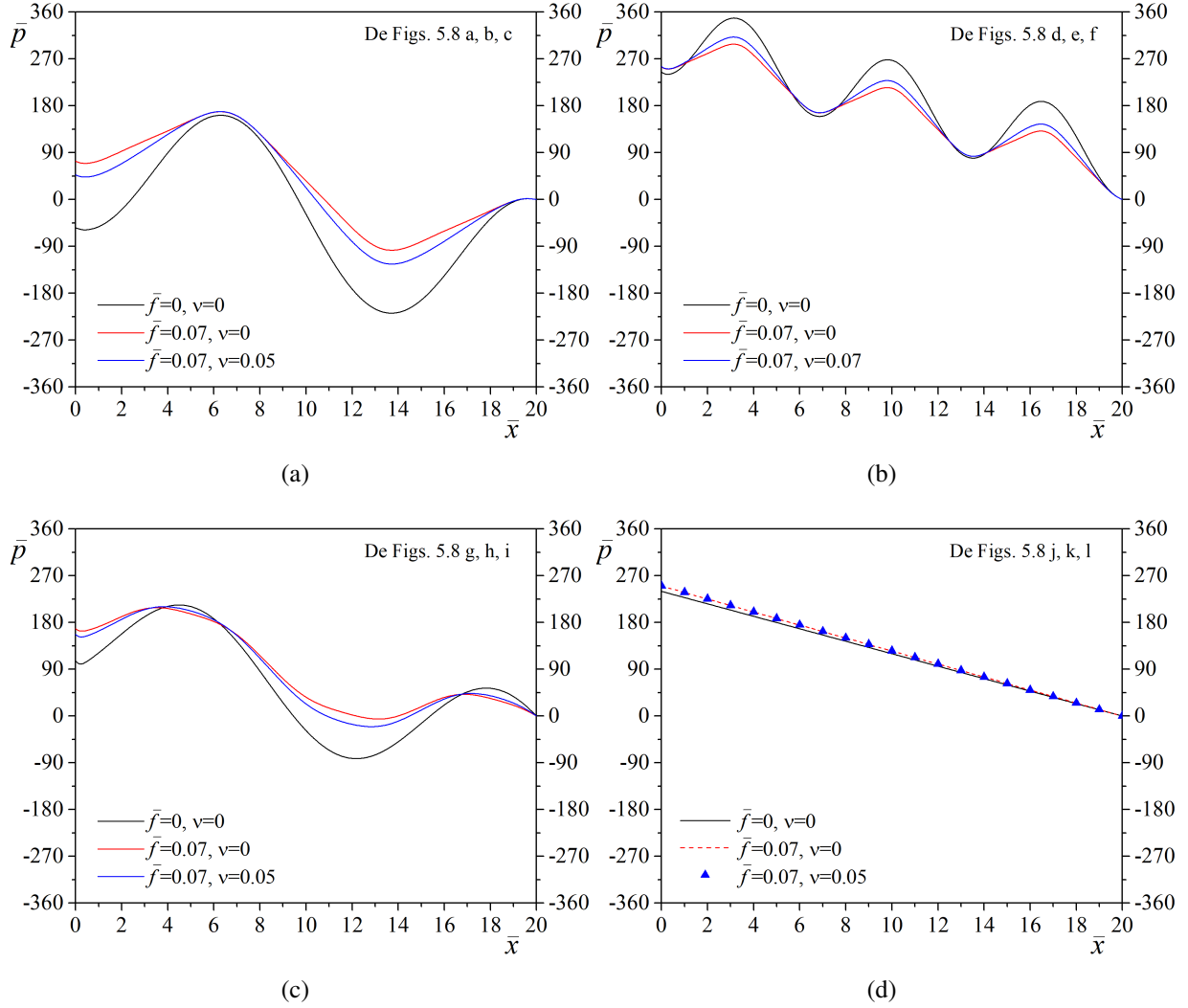


Figura 4.11: Perfiles de presión inducida adimensional como función del eje \bar{x} , con $\xi = 0.05$, $\bar{\zeta}_{1,2} = 6$, $\bar{\kappa} = 50$, y diferentes valores de \bar{f} , ν ; a) $n = 3$, $\omega = 0$, b) $n = 6$, $\omega = 0$, c) $n = 3$, $\omega = 0.5\pi$, d) $n = 10$, $\omega = \pi$.

vanecen las presiones inducidas hasta llegar a cero en la salida. En la Fig. 4.11c, las presiones en la entrada son positivos debido a que el flujo presenta menos oposición en el eje longitudinal. Finalmente, la presión para un caso antisimétrico presenta una distribución lineal como se observa en la Fig. 4.11d.

4.3. Transporte de masa de un soluto eléctricamente neutro

Teniendo en cuenta la hidrodinámica del flujo electroosmótico en el micromezclador electrocinético, en esta sección, se analiza las distribuciones de concentración de un soluto eléctricamente neutro que se introduce al mezclador en la entrada del dominio de estudio. Para un análisis detallado se discuten los resultados del índice de mezcla, tomando en cuenta los parámetros mas representativos en este tipo de fenómenos.

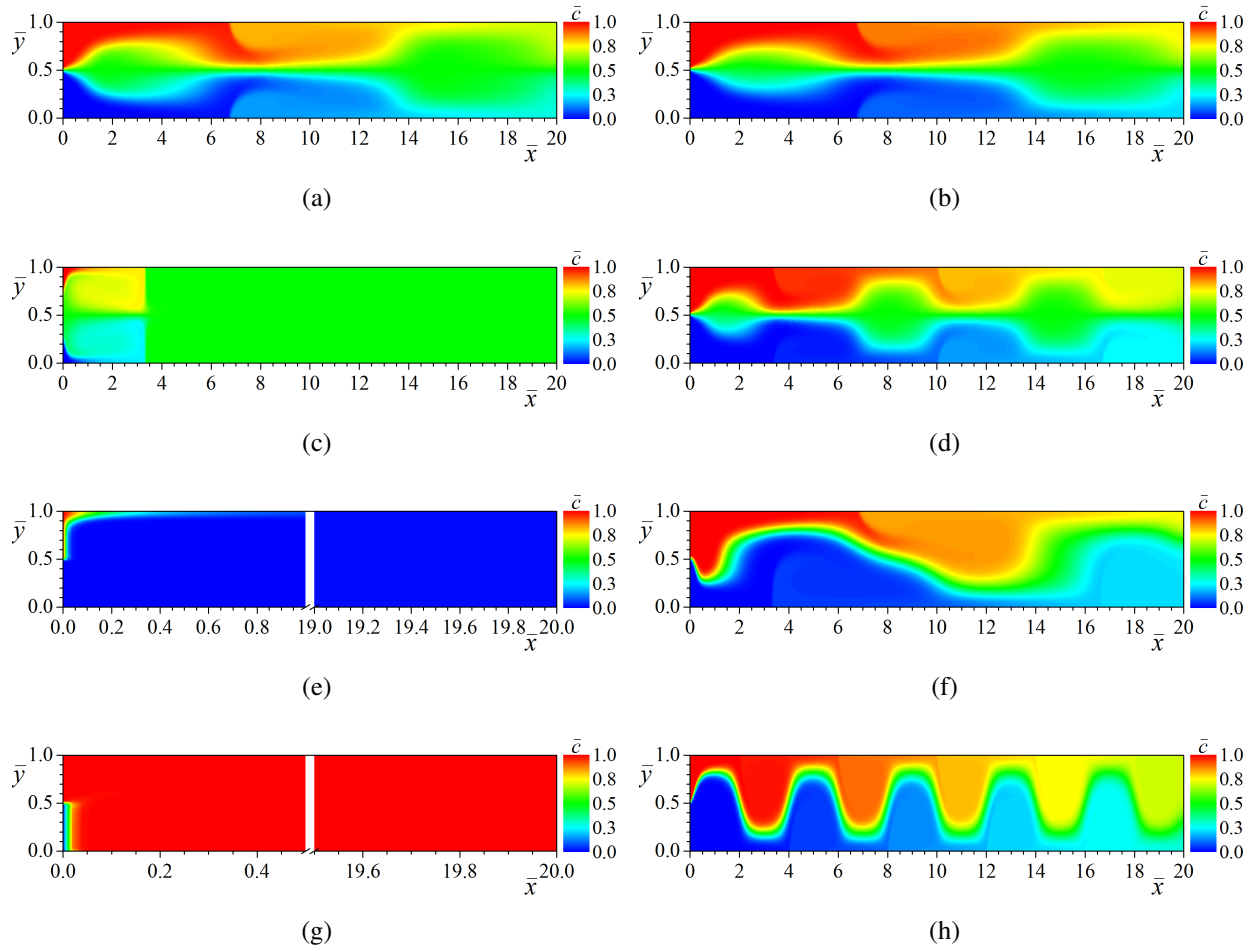


Figura 4.12: Distribución de la concentración adimensional como función de las coordenadas (\bar{x}, \bar{y}) , correspondientes a la Fig. 4.3 (figuras del lado izquierdo (a, c, e, g)) y Fig. 4.8 (figuras del lado derecho (b, d, f, h)); cuando $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0.05$ y $Pe_D = 500$.

En la Fig. 4.12, se muestran las distribuciones de concentración adimensional como función de las coordenadas (\bar{x}, \bar{y}) , con $\bar{\kappa} = 50$, $\bar{\zeta}_{1,2} = 6$, $\bar{f} = 0.07$, $nu = 0.05$ y $Pe = 500$. Las figuras del lado izquierdo (a, c, e, g), representan a las velocidades correspondientes de las Figs. 4.3 con condición de entrada y salida $p = 0$ (Caso I), mientras que las figuras del lado derecho (b, d, f, h) a las equivalentes de las Figs. 4.8 (Caso II), considerando una velocidad de entrada \bar{u}_{in} . Como se puede ver, la corriente especificada por el color rojo tiene una concentración adimensional de $\bar{c}_{\bar{x}=0} = 1$ e ingresa en el mezclador a través de la mitad de la entrada superior, mientras que la corriente especificada por el color azul con una concentración $\bar{c}_{\bar{x}=0} = 0$ ingresa desde la mitad inferior del dispositivo. La mezcla ideal en este dispositivo se alcanza cuando $\bar{c} = 0.5$ y se representa por el color verde. En las Figs. 4.12a y b, se puede observar que la distribución de la concentración es similar para ambos casos, esto se debe a que el número de onda impar produce un comportamiento similar de las distribuciones de velocidad. Aquí, las concentraciones representadas en color rojo y azul siguen una distribución simétrica en el eje axial \bar{x} y se puede notar que la longitud de mezcla no es suficiente para lograr una mezcla homogénea idónea, debido a que la velocidad axial que se genera por las fuerzas electrosmóticas, es suficientemente fuerte para arrastrar al soluto hasta

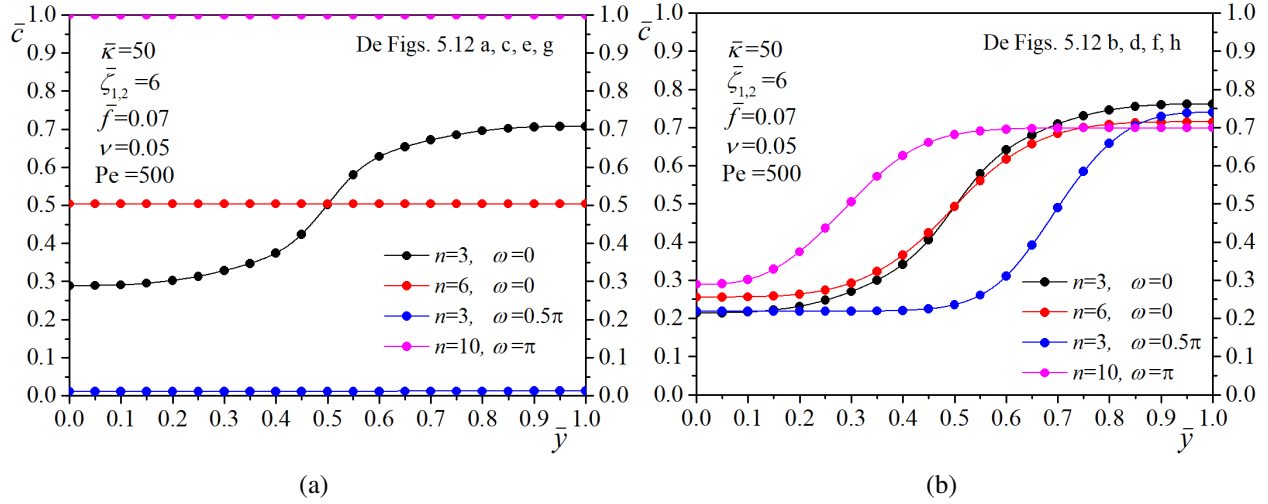


Figura 4.13: Perfiles de concentración como función del eje transversal \bar{y} , correspondientes a la Fig. 4.12 con $\bar{\kappa} = 50$, $\bar{\zeta}_{1,2} = 6$, $\bar{f} = 0.07$, $\nu = 0.05$ y $Pe_D = 500$. a) Caso I, b) Caso II.

la salida del dominio. Para el caso de las Figs. 4.12c y d, las distribuciones de concentración son totalmente distintos. En la primera figura se puede observar que se alcanza una mezcla homogénea en un cuarto de la región del canal, debido a que en este caso existe un estancamiento de flujo provocado por las recirculaciones descritas previamente. Por esta razón, todo el movimiento del fluido se aprovecha para mezclar el soluto. Por otro lado, en la siguiente figura se produce movimiento del fluido en la dirección axial provocado por la velocidad de entrada, que genera un arrastre del soluto de manera simétrica a lo largo del mezclador ocasionando que la concentración no llegue a ser homogénea en la salida del canal. Diferente a lo descrito anteriormente, en las Figs. 4.12e y f, se presentan los casos para número de ondas impar y ángulo de desfase. Se puede observar en la Fig. 4.12e que la concentración con color azul que se introduce en la mitad inferior del mezclador predomina en el dispositivo. Con ayuda de las líneas de corriente de la Fig. 4.3i se puede observar que en la mitad inferior de la entrada, se produce el movimiento del flujo en dirección axial, que más adelante es atraída hacia la mitad superior con una regresión de flujo fuera del dominio. Estos movimientos ocasionan que el soluto que entra en la parte inferior arrastre hacia afuera el soluto de la parte superior, evitando que entre en su totalidad al dispositivo. Estos movimientos suceden en una región muy pequeña del dispositivo. Al tener presente una velocidad de entrada en el dispositivo, este evita la regresión de flujo fuera del dominio en la entrada, como se puede ver con la ayuda de la Fig. 4.8i. Por esta razón, en la Fig. 4.12f el soluto se mueve con dirección del eje \bar{x} positivo, sin embargo, el arrastre que produce la velocidad hace que no se alcance una mezcla homogénea en la salida del canal. En la Fig. 4.12g con número de onda par, sucede lo contrario que en la Fig. 4.12e. Aquí, la concentración predominante es la que entra en la mitad superior del canal, debido a que el fluido entra por dicha región y comienza a recircular con sentido a las manecillas del reloj, evitando la entrada de fluido en la parte inferior del canal, como se puede observar con ayuda de la Fig. 4.3l. Por lo anterior, la fuerza con la que entra el soluto indicado en color azul, no es suficiente para vencer las recirculaciones generados en la entrada. En la Fig. 4.12h, también se observa que el soluto es arrastrado por la velocidad de entrada, siendo este último, suficientemente fuerte para disminuir la influencia de las fuerzas electrosmóticas sobre el fluido y evitar una mez-

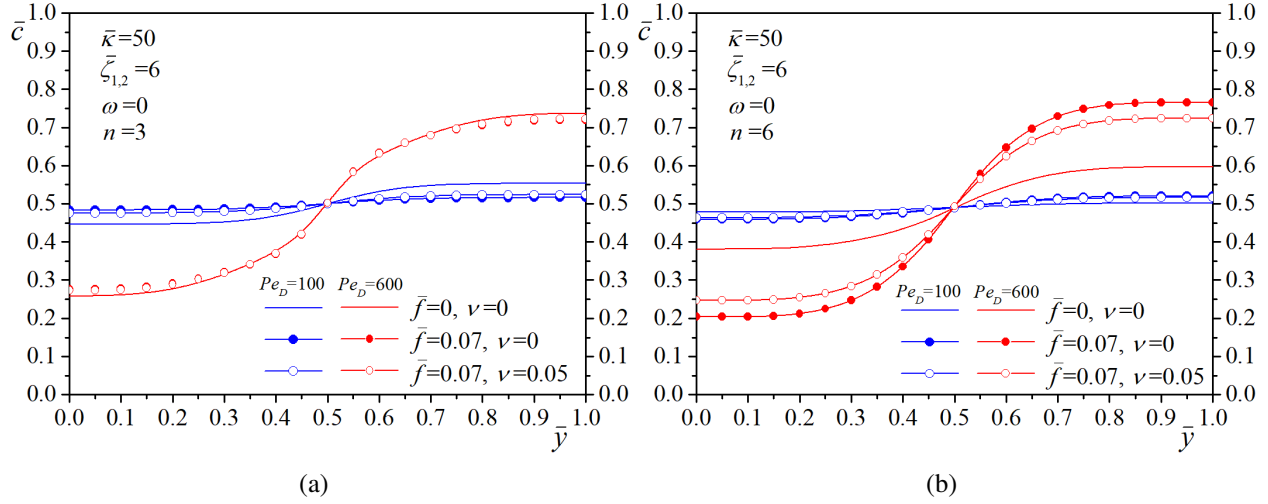


Figura 4.14: Perfiles de concentración como función del eje transversal \bar{y} , con $\bar{\kappa} = 50$, $\bar{\zeta}_{1,2} = 6$, $\omega = 0$ y diferentes valores de \bar{f} , ν , n y Pe_D . a) Caso I, b) Caso II.

cla homogénea a la salida del canal. En estas figuras, es evidente que cuando se tienen número de ondas impar y ángulo de desfase cero para el Caso I y cualquier combinación de los parámetros para el Caso II, las distribuciones de concentración están acordes a las líneas de corriente del flujo. En la Fig. 4.13, se muestran los perfiles de concentración a la salida del canal y que corresponden a la Fig. 4.12; el inciso a) representa al caso I (figuras del lado izquierdo) y el b) al caso II (figuras del lado derecho). En este sentido, en la Fig. 4.13a se puede ver que en la salida del canal cuando $n = 3$ (línea negra con símbolos), no se presenta una distribución uniforme ya que el fluido arrastra al soluto, como se explicó con anterioridad. Por otro lado, para el caso de $n = 6$ (línea roja con símbolos) se consigue una distribución uniforme de la concentración con un valor constante de 0.5, consiguiendo una mezcla idónea. En la siguiente línea con $n = 3$ y ángulo de desfase $\omega = 0.5\pi$ (línea azul con símbolos), no existe mezcla ya que únicamente entra al mezclador el soluto de la mitad inferior, por lo que el valor de la concentración se mantiene constante y con un valor cercano a cero. En la línea con $n = 10$ y $\omega = \pi$, también la concentración se mantiene constante, pero con un valor cercano a la unidad correspondiente a la concentración de entrada de la mitad superior del canal. Para el caso de la Fig. 4.13b, cuando se tiene una velocidad de entrada, ambos solutos que entran al canal siguen un movimiento axial debido a que no existe una regresión de flujo inmediato a la entrada del dispositivo. Se puede observar que para el caso de $n = 6$ la pendiente del perfil disminuye lo que indica una mejora en la mezcla. Por su parte la Fig. 4.14a y b, muestran los perfiles de concentración a la salida del canal de los casos I y II respectivamente, para diferentes valores del número de Péclet Pe_D . En la Fig. 4.14a, se puede observar que las variaciones en la concentración debido a los efectos estéricos y viscoeléctricos son menores que cuando se tienen condiciones de entrada de la velocidad como en el de la Fig. 4.14b. Esto se debe a que en el caso I las recirculaciones solo se ven afectados por las fuerzas electrosmóticas y los efectos estéricos y viscoeléctricos actúan de manera proporcional. En el segundo caso, el incremento de la viscosidad se opone a la fuerza de arrastre de la velocidad de entrada y por lo tanto las concentraciones en ausencia de los efectos interfaciales en comparación con la consideración de ellas, se ven más pronunciadas. En ambos casos el decremento del número de Péclet, favorece el mezclado.

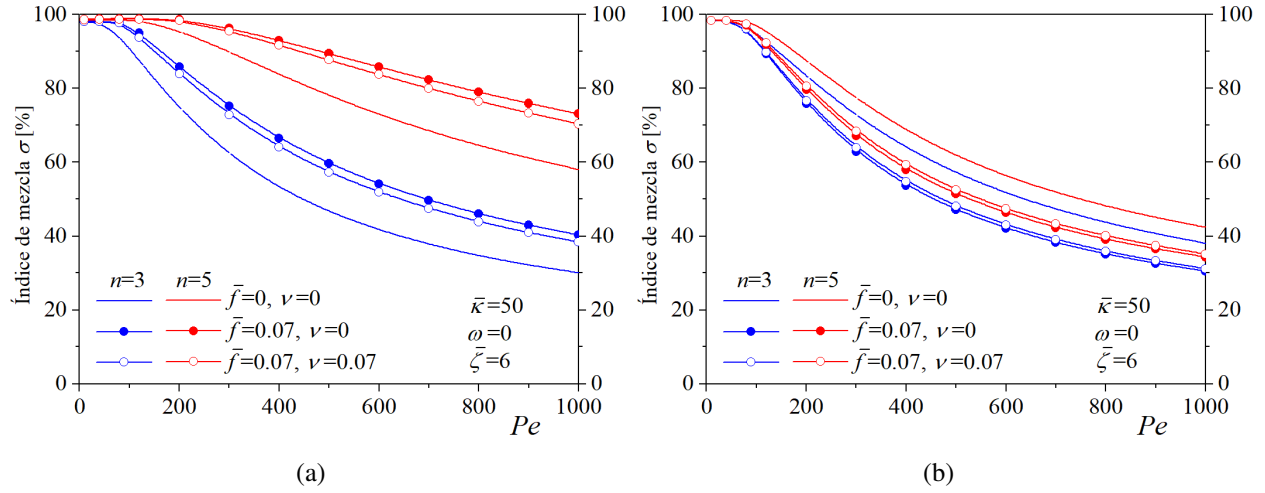


Figura 4.15: Índice de mezcla como función del número de Péclet Pe_D con $\bar{\kappa} = 50$, $\bar{\zeta}_{1,2} = 6$, $\bar{\omega} = 0$, y diferentes valores de \bar{f} , ν y n . a) Caso I, b) Caso II.

La Fig. 4.15, muestra el índice de mezcla como función del número de Péclet, con $\bar{\kappa} = 50$, $\bar{\zeta} = 6$, $\bar{\omega} = 0$ y dos números de onda $n = 3, 5$. En la Fig. 4.15a, que representa al caso I, se pueden analizar los siguientes puntos: primero, el incremento del número de onda (siempre y cuando sean impares), mejora la eficiencia de mezclado. Segundo, considerando únicamente el efecto viscoeléctrico (líneas azules o rojas solidas) la mezcla se mejora considerablemente debido a que al incrementar la viscosidad del fluido la velocidad disminuye haciendo que las fuerzas electroosmóticas generen recirculaciones mas grandes. Tercero, el incremento del número de Péclet disminuye la eficiencia de mezclado debido a que la velocidad de advección y difusión se incrementan ocasionando que el soluto atraviese la zona de mezclado más rápido, situación que ocasiona que las fuerzas electroosmóticas tengan poca influencia sobre las recirculaciones. En la Fig. 4.15a el primer y tercer punto del análisis anterior son similares. Sin embargo, difiere en el punto número dos. Aquí, la eficiencia es mejor cuando los efectos estéricos y viscoeléctricos están ausentes. Esto se debe a que, al incrementar la viscosidad, las velocidades electroosmóticas disminuyan y por consecuencia las recirculaciones se dan en menor medida. Por lo anterior la velocidad de entrada, arrastra las recirculaciones por lo que la mezcla no se lleva a cabo de manera óptima.

Capítulo 5

Conclusiones

Se analiza la influencia de la combinación de los efectos estéricos y viscoeléctricos sobre la hidrodinámica del flujo electroosmótico, concentración y eficiencia de mezcla en un micromezclador electrocinético, en donde se considera un fluido newtoniano. Los efectos antes mencionados aparecen cuando se asumen altas concentraciones iónicas de la solución del electrolito y valores arbitrarios de los potenciales zeta en las paredes del microcanal. La modulación de los potenciales zeta a través del ángulo de fase, número de onda y amplitud, producen varios tipos de recirculaciones en el flujo electroosmótico, que pueden dar como resultado un flujo volumétrico neto o incluso un estancamiento de flujo, así como la reducción o mejora de la eficiencia de mezclado. En este trabajo de investigación se determinó que la fuerza de las recirculaciones está directamente relacionada con la magnitud del potencial zeta; sin embargo, esta fuerza se ve disminuida por el aumento de dicho potencial de pared. Cuando se incrementan los potenciales zeta, los gradientes del potencial eléctrico en las cercanías de las paredes del canal también aumentan produciendo que la viscosidad del fluido sea mayor. Lo anterior, hace que el flujo presente una mayor resistencia al movimiento y por lo tanto la fuerza electroosmótica se hace insuficiente para arrastrar al fluido en dirección axial y generando recirculaciones más débiles. También, la consideración del tamaño finito de iones en una solución electrolítica a través del efecto estérico, actúa para reducir las cargas excesivas en el EDL y, como consecuencia, también disminuye el efecto viscoeléctrico. De manera general, se analizaron dos casos en los cuales se toman en cuenta la presión de entrada y salida adimensional igual a cero y una velocidad de entrada en el micromezclador. En el primer caso, se determinó que el flujo volumétrico es cero para números de onda par y disminuye con el aumento del número de onda impar. También, la eficiencia de mezclado actúa de manera contraria al flujo volumétrico, ya que obtiene su valor máximo con número de ondas par y se mejora a mayor número de onda impar. Con la presencia de ángulos de desfase, dentro del dispositivo no se lleva a cabo la mezcla ya que, en las inmediaciones de la entrada, existen regresiones de flujo que ocasionan que el soluto entre por la parte inferior del canal e inmediatamente salga por la parte de la mitad superior, o viceversa. Para el caso dos, se pudo determinar que el flujo volumétrico es constante y depende de la velocidad de entrada. Aquí, con cualquier combinación de los números de onda y ángulo de desfase se lleva a cabo la mezcla del soluto y se mejora con el aumento dicho parámetro. Para ambos casos, la eficiencia de mezclado disminuye con el incremento del número de Péclet, por lo que se necesitan mayores longitudes de mezcla para obtener eficiencias mejoradas. Por lo tanto, esta investigación es una herramienta teórica sobre los estudios hidrodinámicos y de transporte de masa en fenómenos electrocinéticos, para el diseño de micromezcladores en los

que los efectos viscoeléctricos y estéricos deben considerarse.

Finalmente, para ampliar el conocimiento sobre el tema que se aborda aquí, se tienen en cuenta los siguientes trabajos a futuro

- Desarrollar el modelo transitorio de los fenómenos de estudio.
- Incluir modelos reológicos de modelos no newtonianos.
- Realizar el análisis de la concentración, considerando solutos cargados eléctricamente mediante la inclusión de la ecuación de Nernst-Planck modificado.

Referencias

- [1] Y. Liu, E. Smela, N. M. Nelson, y P. Abshire. Cell-lab on a chip: a CMOS-based microsystem for culturing and monitoring cells. *Engineering in Medicine and Biology Society 26th Annual International Conference of the IEEE*, 1:2534–2537, 2004.
- [2] J. Sun y X. Jiang. *Microfluidic Devices for Biomedical Applications*. Woodhead Publishing Series in Biomaterials, 2013.
- [3] C.-C. Chang y R.-J. Yang. Electrokinetic mixing in microfluidic systems. *Microfluid Nano-fluid*, 3:501–525, 2007.
- [4] L. Capretto, W. Cheng, M. Hill, y X. Zhang. *Microfluidics Technologies and Applications*. Springer, 2011.
- [5] N.-T. Nguyen. *Micromixers, Second Edition: Fundamentals, Design and Fabrication (Micro and Nano Technologies)*. William Andrew, 2011.
- [6] A. O. El Moctar, N. Aubry, y J. Batton. Electro-hydrodynamic micro-fluidic mixer. *Lab On A Chip*, 3:273–280, 2003.
- [7] H.A. Stone, A.D. Stroock, y A. Ajdari. Engineering flows in small devices microfluidics toward a lab-on-a-chip. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 36:381–411, 2004.
- [8] D. Mark, S. Haeberle, G. Roth, F. v. Stetten, y R. Zengerle. Microfluidic lab-on-a-chip platforms: requirements, characteristics and applications. *Chem. Soc. Rev.*, 39:1153–1182, 2010.
- [9] Y. Temiz, R. D. Lovchik, G. V. Kaigala, y E. Delamarche. Lab-on-a-chip devices: How to close and plug the lab? *Microelectron. Eng.*, 132:156–175, 2015.
- [10] T. Iwasaki y J.-I. Yoshida. Free radical polymerization in microreactors. significant improvement in molecular weight distribution control. *Macromolecules*, 38:1159–1163, 2005.
- [11] S. J. Haswell, R. J. Middleton, B. O’Sullivan, V. Skelton, P. Wattsa, y P. Styring. The application of micro reactors to synthetic chemistry. *Chemical Communications*, 5:391–398, 2001.
- [12] M. Micheletti y G. J. Lye. Microscale bioprocess optimisation. *Current Opinion in Biotechnology*, 17:611–618, 2006.

- [13] S. Zeng, C.-H. Chen, J. C. Mikkelsen Jr., y J. G. Santiago. Fabrication and characterization of electroosmotic micropumps. *Sens. Actuator B-Chem*, 79:107–114, 2001.
- [14] J. H. Masliyah y S. Bhattacharjee. *Electrokinetic and Colloid Transport Phenomena*. Wiley-InterScience, 2006.
- [15] B. J. Kirby. *Micro- and Nanoscale Fluid Mechanics. Transport in Microfluidic Devices*. Cambridge University Press, 2010.
- [16] S. Yu, T.-J. Jeon, y S. M. Kim. Active micromixer using electrokinetic effects in the micro/nanochannel junction. *Chemical Engineering Journal*, 197:289–294, 2012.
- [17] Y.T. Chew, H.M. Xia, y C. Shu. Fluid micromixing technology and its applications for biological and chemical processes. In *3rd Kuala Lumpur International Conference on Biomedical Engineering 2006*, pages 16–20, 2006.
- [18] V. Hessel, H. Löwe, y F. Schönfeld. Micromixers—a review on passive and active mixing principles. *Chemical Engineering Science*, 60:2479–2501, 2005.
- [19] N.-T. Nguyen. *Microfluidic Technologies for Miniaturized Analysis Systems*. Springer, 2007.
- [20] E. A. Mansur, YE Mingxing, W. Yundong, y D. Youyuan. A state-of-the-art review of mixing in microfluidic mixers. *Chinese J. Chem. Eng.*, 16:503–516, 2008.
- [21] X. Yu y H.H. Bau. Complex magnetohydrodynamic low-reynolds-number flow. *Phys. Rev. E*, 68:016312, 2003.
- [22] S. Datta, S. Ghosal, y N. A. Patankar. Electroosmotic flow in a rectangular channel with variable wall zeta-potential: Comparison of numerical simulation with asymptotic theory. *Electrophoresis*, 27:611–619, 2006.
- [23] A. Ajdari. Generation of transverse fluid currents and forces by an electric field: Electroosmosis on charge-modulated and undulated surfaces. *Physical review E*, 53, 1996.
- [24] S. Wall. The history of electrokinetic phenomena. *Curr. Opin. Colloid Interface Sci.*, 15:119–124, 2010.
- [25] G. Karniadakis, A. Beskok, y N. Aluru. *Microflows and Nanoflows. Fundamentals and Simulation*. Springer, 2005.
- [26] Q. Chang. *Colloid and Interface Chemistry for Water Quality Control*. Academic Press, 2016.
- [27] Y. Picó. *Chemical Analysis of Food: Techniques and Applications*. Academic Press, 2012.
- [28] S.-J. Park y M.-K. Seo. *Interface Science and Technology*. Elsevier, 2011.
- [29] A. A. Yazdi, A. Sadeghi, y M. H. Saidi. Electrokinetic mixing at high zeta potentials: Ionic size effects on cross stream diffusion. *Journal of Colloid and Interface Science*, 442:8–14, 2015.

- [30] J. J. Bikerman. Structure and capacity of the electrical double layer. *Philos. Mag.*, 33:384–397, 1942.
- [31] A.S. Khair y T.M. Squires. Ion steric effects on electrophoresis of a colloidal particle. *J. Fluid. Mech.*, 640:343–356, 2009.
- [32] I. Borukhov, D. Andelman, y H.Orland. Adsorption of large ions from an electrolyte solution: a modified poisson-boltzmann equation. *Electrochim. Acta*, 46:221–229, 2000.
- [33] A. Garai y S. Chakraborty. Steric effect and slip-modulated energy transfer in narrow fluidic channels with finite aspect ratios. *Electrophoresis*, 31:843–849, 2010.
- [34] J. Lyklema y J. Th. G. Overbeek. On the interpretation of electrokinetic potentials. *J. Colloid Sci.*, 16:501–512, 1961.
- [35] J. Lyklema. On the slip process in electrokinetics. *Colloids Surf. A*, 92:41–49, 1994.
- [36] E.N.D. Andrade y C. Dodd. The effect of an electric field on the viscosity of liquids. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 187:296–237, 1946.
- [37] E.N.D. Andrade y C. Dodd. The effect of an electric field on the viscosity of liquids 2. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 204:449–464, 1951.
- [38] R.J. Hunter y J.V. Leyendekkers. Viscoelectric coefficient for water. *J. Chem. Soc. Faraday Trans. I*, 74:450–505, 1978.
- [39] D. Burgreen. Electrokinetic flow in capillary elements. Technical report, United Nuclear Corp. White Plains N. Y., 1963.
- [40] C. Yang y D. Li. Electrokinetic effects on pressure-driven liquid flows in rectangular microchannels. *J. Colloid Interface Sci.*, 194:95–107, 1997.
- [41] C. Yang, C. B. Ng, y V. Chan. Transient analysis of electroosmotic flow in a slit microchannel. *J. Colloid Interface Sci.*, 248:524–527, 2002.
- [42] Y. Aboelkassem. Numerical simulation of electroosmotic complex flow patterns in a microchannel. *Comput. Fluids*, 52:104–115, 2011.
- [43] P. R. Waghmare y S. K. Mitra. Modeling of combined electroosmotic and capillary flow in microchannels. *Anal. Chim. Acta*, 663:117–126, 2010.
- [44] A. Miller, A. Villegas, y F. J. Diez. Characterization of the startup transient electrokinetic flow in rectangular channels of arbitrary dimensions, zeta potential distribution, and time-varying pressure gradient. *Electrophoresis*, 36:692–702, 2015.
- [45] C. Qi y C.-O. Ng. Electroosmotic flow of a power-law fluid in a slit microchannel with gradually varying channel height and wall potential. *Eur. J. Mech. B/Fluids*, 52:160–168, 2015.

- [46] J. Escandón, E. Jiménez, C. Hernández, O. Bautista, y F. Méndez. Transient electroosmotic flow of Maxwell fluids in a slit microchannel with asymmetric zeta potentials. *Eur. J. Mech. B/Fluid*, 53:180–189, 2015.
- [47] S. Wang y M. Zhao. Analytical solution of the transient electro-osmotic flow of a generalized fractional Maxwell fluid in a straight pipe with a circular cross-section. *Eur. J. Mech. B/Fluid*, 54:82–86, 2015.
- [48] L. Martínez, O. Bautista, J. Escandón, y F. Méndez. Electroosmotic flow of a Phan-Thien-Tanner fluid in a wavy-wall microchannel. *Colloids Surf. A*, 498:7–19, 2016.
- [49] P. Kaushik y S. Chakraborty. Startup electroosmotic flow of a viscoelastic fluid characterized by Oldroyd-b model in a rectangular microchannel with symmetric and asymmetric wall zeta potentials. *J. Non-Newton Fluid Mech.*, 247:41–52, 2017.
- [50] J. S. H. Lee, C. L. Ren, y D. Li. Effects of surface heterogeneity on flow circulation in electroosmotic flow in microchannels. *Anal. Chim. Acta*, 530:273–282, 2005.
- [51] M. Mondal, R. P. Misra, y S. De. Combined electroosmotic and pressure driven flow in a microchannel at high zeta potential and overlapping electrical double layer. *Int. J. Therm. Sci.*, 86:48–59, 2014.
- [52] R. Peng y D. Li. Effects of ionic concentration gradient on electroosmotic flow mixing in a microchannel. *J. Colloid Interface Sci.*, 440:126–132, 2015.
- [53] V. Hoshyargar, A. Khorami, S. N. Ashrafizadeh, y A. Sadeghi. Solute dispersion by electroosmotic flow through soft microchannels. *Sens. Actuator B-Chem.*, 255:3585–3600, 2018.
- [54] J. Y. Min, D. Kimb, y S. J. Kim. A novel approach to analysis of electroosmotic pumping through rectangular-shaped microchannels. *Sens. Actuator B-Chem.*, 120:305–312, 2006.
- [55] C. Wang, T. N. Wong, C. Yang, y K. T. Ooi. Characterization of electroosmotic flow in rectangular microchannels. *Int. J. Heat Mass Transf.*, 50:3115–3121, 2007.
- [56] S. Y. Deng, Y. J. Jian, Y. H. Bi, L. Chang, H. J. Wang, y Q. S. Liu. Unsteady electroosmotic flow of power-law fluid in a rectangular microchannel. *Mech. Res. Commun.*, 39:9–14, 2012.
- [57] A. Sadeghi, M. Azari, y S. Chakraborty. H2 forced convection in rectangular microchannels under a mixed electroosmotic and pressure-driven flow. *Int. J. Therm. Sci.*, 122:162–171, 2017.
- [58] W.-H. Koh y J. L. Anderson. Electroosmosis and electrolyte conductance in charged microcapillaries. *AICHE J.*, 21:1176–1188, 1975.
- [59] Y. Kang, C. Yang, y X. Huang. Electroosmotic flow in a capillary annulus with high zeta potentials. *J. Colloid Interface Sci.*, 253:285–294, 2002.
- [60] Y. Kang, C. Yang, y X. Huang. Dynamic aspects of electroosmotic flow in a cylindrical microcapillary. *Int. J. Eng. Sci.*, 40:2203–2221, 2002.

- [61] G. Rojas, J. Arcos, M. Peralta, F. Méndez, y O. Bautista. Pulsatile electroosmotic flow in a microcapillary with the slip boundary condition. *Colloids Surf. A*, 513:57–65, 2017.
- [62] C. Yang y D. Li. Analysis of electrokinetic effects on the liquid flow in rectangular microchannels. *Colloids Surf. A*, 143:339–353, 1998.
- [63] L. Chang, Y. Jian, M. Buren, Q. Liu, y Y. Sun. Electroosmotic flow through a microtube with sinusoidal roughness. *J. Mol. Liq.*, 220:258–264, 2016.
- [64] J. Su, Y. Jian, y L. Chang. Thermally fully developed electroosmotic flow through a rectangular microchannel. *Int. J. Heat Mass Transf.*, 55:6285–6290, 2012.
- [65] D. Li. Electro-viscous effects on pressure-driven liquid flow in microchannels. *Colloids Surf. A*, 195:35–57, 2001.
- [66] M. S. Kilic, M. Z. Bazant, y A. Ajdari. Steric effects in the dynamics of electrolytes at large applied voltages. I. Double-layer charging. *Phys. Rev. E*, 75:021502, 2007.
- [67] C. Y. Soong, P. W. Hwang, y J. C. Wang. Analysis of pressure-driven electrokinetic flows in hydrophobic microchannels with slip-dependent zeta potential. *Microfluid. Nanofluid.*, 9:211–223, 2010.
- [68] A. A. Yazdi, A. Sadeghi, y M. H. Saidi. Electrokinetic mixing at high zeta potentials: Ionic size effects on cross stream diffusion. *J. Colloid Interface Sci.*, 442:8–14, 2015.
- [69] G. Trotta, A. Volpe, A. Ancona, y I. Fassi. Flexible micro manufacturing platform for the fabrication of PMMA microfluidic devices. *J. Manuf. Process*, 35:107–117, 2018.
- [70] X. Chen y L. Zhang. Review in manufacturing methods of nanochannels of bio-nanofluidic chips. *Sens. Actuator B-Chem.*, 254:648–659, 2018.
- [71] M. H. Matin y H. Ohshima. Combined electroosmotically and pressure driven flow in soft nanofluidics. *J. Colloid Interface Sci.*, 460:361–369, 2015.
- [72] M. H. Matin y H. Ohshima. Thermal transport characteristics of combined electroosmotic and pressure driven flow in soft nanofluidics. *J. Colloid Interface Sci.*, 476:167–176, 2016.
- [73] S. Bhattacharyya y A. K. Nayak. Combined effect of surface roughness and heterogeneity of wall potential on electroosmosis in microfluidic/nanofluidic channels. *J. Fluids Eng.*, 132:041103, 2010.
- [74] A. K. Nayak. Analysis of mixing for electroosmotic flow in micro/nano channels with heterogeneous surface potential. *Int. J. Heat Mass Transf.*, 75:135–144, 2014.
- [75] Y. Chen, Z. Ni, G. Wang, D. Xu, y D. Li. Electroosmotic flow in nanotubes with high surface charge densities. *Nano Lett.*, 8:42–48, 2008.
- [76] K. Shirono, N. Tatsumi, y H. Daiguji. Molecular simulation of ion transport in silica nanopores. *J. Phys. Chem. B*, 113:1041–1047, 2009.

- [77] J. Smiatek y F. Schmid. Mesoscopic simulations of electroosmotic flow and electrophoresis in nanochannels. *Comput. Phys. Commun.*, 182:1941–1944, 2011.
- [78] J. B. Freund. Electro-osmosis in a nanometer-scale channel studied by atomistic simulation. *J. Chem. Phys.*, 116:2194–2200, 2002.
- [79] R. Qiao y N. R. Aluru. Ion concentrations and velocity profiles in nanochannel electroosmotic flows. *J. Chem. Phys.*, 118:4692–4701, 2003.
- [80] S. G. Kandlikar y W. J. Grande. Evolution of microchannel flow passages-thermohydraulic performance and fabrication technology. *Heat Transfer Eng.*, 24:3–17, 2003.
- [81] W.-L. Hsu, H. Daiguji, D. E. Dunstan, M. R. Davidson, y D. J. E. Harvie. Electrokinetics of the silica and aqueous electrolyte solution interface: Viscoelectric effects. *Adv. Colloid Interface Sci.*, 243:108–131, 2016.
- [82] J. M. Desentis, F. Méndez, y O. Bautista. Viscoelectric effect on electroosmotic flow in a cylindrical microcapillary. *Fluid Dyn. Res.*, 48:035503, 2016.
- [83] W.-L. Hsu, D. J. E. Harvie, M. R. Davidson, D. E. Dunstan, J. Hwang, y H. Daiguji. Viscoelectric effects in nanochannel electrokinetics. *J. Phys. Chem. C*, 121:20517–20523, 2017.
- [84] E. Jimenez, J. Escandón, F. Méndez, y O. Bautista. Combined viscoelectric and steric effects on the electroosmotic flow in a microchannel under induced high zeta potentials. *Colloids Surf. A*, 531:221–233, 2017.
- [85] A. Bandopadhyay y S. Chakraborty. Steric-effect induced alterations in streaming potential and energy transfer efficiency of non-Newtonian fluids in narrow confinements. *Langmuir*, 27:12243–12252, 2011.
- [86] I. Borukhov, D. Andelman, y H. Orland. Steric effects in electrolytes: A modified Poisson-Boltzmann equation. *Phys. Rev. Lett.*, 79:435–438, 1997.
- [87] A. Bandopadhyay y S. Chakraborty. Ionic size dependent electroosmosis in ion-selective microchannels and nanochannels. *Electrophoresis*, 34:2193–2198, 2013.
- [88] R. Dey, T. Ghonge, y S. Chakraborty. Steric-effect-induced alteration of thermal transport phenomenon for mixed electroosmotic and pressure driven flows through narrow confinements. *Int. J. Heat Mass Transf.*, 56:251–262, 2013.
- [89] B. D. Storey, L. R. Edwards, M. S. Kilic, y M. Z. Bazant. Steric effects on ac electro-osmosis in dilute electrolytes. *Phys. Rev. E*, 77:036317, 2008.
- [90] S. Bhattacharyya y A. K. Nayak. Electroosmotic flow in micro/nanochannels with surface potential heterogeneity: An analysis through the Nernst-Planck model with convection effect. *Colloids Surf. A*, 339:167–177, 2009.
- [91] A. K. Nayak, A. Haque, A. Banerjee, y B. Weigand. Flow mixing and electric potential effect of binary fluids in micro/nano channels. *Colloids Surf. A*, 512:145–157, 2017.

- [92] K. Chao, B. Chen, y J. Wu. Numerical analysis of field-modulated electroosmotic flows in microchannels with arbitrary numbers and configurations of discrete electrodes. *Biomed Microdevices*, 12:959–966, 2010.
- [93] C.-C. Cho, C.-J. Ho, y Chaó-K. Chen. Enhanced micromixing of electroosmotic flows using aperiodic time-varying zeta potentials. *Chem. Eng. J.*, 163:180–187, 2010.
- [94] H.-Y. Wu y C.-H. Liu. A novel electrokinetic micromixer. *Sens. Actuator A-Phys.*, 118:107–115, 2005.
- [95] J.-L. Lin, K.-H. Lee, y G.-B. Lee. Active mixing inside microchannels utilizing dynamic variation of gradient zeta potentials. *Electrophoresis*, 26:4605–4615, 2005.
- [96] S. E. Yalcin, A. Sharma, S. Qian, S. W. Joo, y O. Baysal. On-demand particle enrichment in a microfluidic channel by a locally controlled floating electrode. *Sens. Actuators B-Chem.*, 153:277–283, 2011.
- [97] C.-Y. Lee, G.-B. Lee, L.-M. Fu, K.-H. Lee, y R.-J. Yang. Electrokinetically driven active micro-mixers utilizing zeta potential variation induced by field effect. *J. Micromech. Microeng.*, 14:1390–1398, 2004.
- [98] S. Ebrahimi, A. Hasanzadeh-Barforoushi, A. Nejat, y F. Kowsary. Numerical study of mixing and heat transfer in mixed electroosmotic/pressure driven flow through T-shaped microchannels. *Int. J. Heat Mass Transf.*, 75:565–580, 2014.
- [99] T.-Y. Lin y C.-L. Chen. Analysis of electroosmotic flow with periodic electric and pressure fields via the lattice Poisson-Boltzmann method. *Appl. Math. Model.*, 37:2816–2829, 2013.
- [100] F. Tian, B. Li, y D. Y. Kwok. Tradeoff between mixing and transport for electroosmotic flow in heterogeneous microchannels with nonuniform surface potentials. *Langmuir*, 21:1126–1131, 2005.
- [101] U. Ghosh, S. Mandal, y S. Chakraborty. Electroosmosis over charge-modulated surfaces with finite electrical double layer thicknesses: Asymptotic and numerical investigations. *Phys. Rev. Fluids*, 2:064203, 2017.
- [102] H.-H. Wei. Shear-modulated electroosmotic flow on a patterned charged surface. *J. Colloid Interface Sci.*, 284:742–752, 2005.
- [103] C.-C. Chang y R.-J. Yang. Chaotic mixing in a microchannel utilizing periodically switching electro-osmotic recirculating rolls. *Phys. Rev. E*, 77:056311, 2008.
- [104] U. Ghosh y S. Chakraborty. Patterned-wettability-induced alteration of electro-osmosis over charge-modulated surfaces in narrow confinements. *Phys. Rev. E*, 85:046304, 2012.
- [105] R. F. Probstein. *Physicochemical Hydrodynamics: An Introduction*. Wiley-Interscience, second edition, 2003.

- [106] M. Z. Bazant, M. S. Kilic, B. D. Storey, y A. Ajdari. Towards an understanding of induced-charge electrokinetics at large applied voltages in concentrated solutions. *Adv. Colloid Interface Sci.*, 152:48–88, 2009.
- [107] M. S. Kilic, M. Z. Bazant, y A. Ajdari. Steric effects in the dynamics of electrolytes at large applied voltages: I. double-layer charging. *Phys. Rev.*, 75:xx, 2007.
- [108] M. S. Kilic, M. Z. Bazant, y A. Ajdari. Steric effects in the dynamics of electrolytes at large applied voltages: II. modified poisson-nernst-planck equations. *Phys. Rev.*, 75:xx, 2007.
- [109] A. A. Yazdi, A. Sadeghi, y M. H. Saidi. Steric effects on electrokinetic flow of non-linear biofluids. *Colloids Surf. A*, 484:394–401, 2015.
- [110] M. Hadigol, R. Nosrati, A. Nourbakhsh, y M. Raisee. Numerical study of electroosmotic micromixing of non-newtonian fluids. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 166:965–971, 2011.
- [111] C. Yang, D. Li, y J. H. Masliyah. Modeling forced liquid convection in rectangular microchannels with electrokinetic effects. *Int. J. Heat Mass Transf.*, 41:4229–4249, 1998.