

PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATOLICA DE CHILE ESCUELA DE INGENIERIA

ANÁLISIS NUMÉRICO Y EXPERIMENTAL DE INESTABILIDADES ELECTROCINÉTICAS EN MICROCANAL DE CONFIGURACIÓN CRUZADA

ESTEBAN EMANUEL GUERRERO ESCUDERO

Tesis para optar al grado de Magíster en Ciencias de la Ingeniería.

Profesor Supervisor:

AMADOR M. GUZMÁN CUEVAS

Santiago de Chile, (julio, 2018)

© 2018, Esteban Guerrero Escudero



PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATOLICA DE CHILE ESCUELA DE INGENIERIA

ANÁLISIS NUMÉRICO Y EXPERIMENTAL DE INESTABILIDADES ELECTROCINÉTICAS EN MICROCANAL DE CONFIGURACIÓN CRUZADA

ESTEBAN EMANUEL GUERRERO ESCUDERO

Tesis presentada a la Comisión integrada por los profesores:

AMADOR GUZMÁN

JORGE RAMOS

DIEGO VASCO

PABLO IRARRÁZAVAL

Para completar las exigencias del grado de Magíster en Ciencias de la Ingeniería.

Santiago de Chile, (julio, 2018)

A mi Mujer,

Susan Abarzúa Salvatierra

AGRADECIMIENTO

En primer lugar, deseo agradecer al Señor Jesucristo, por ser el Señor y Salvador de mi vida, y por ver su gran apoyo en todo lo referente a estos años de estudios en el magister.

Al pilar de mi vida, sin lugar a duda, mi familia. Agradezco a mi mujer Susan A., que estuvo en todos los momentos que la necesité, a mi mamá Maritza E., por contar con su apoyo incondicional, por mi papá Patricio G. R. que me ayudó y respaldó, por mi hermano Patricio G. E. y su Señora Ivonne Rojas, que siempre conté con sus palabras de aliento.

Asimismo, quiero expresar mi profundo agradecimiento por aquellos que estuvieron a mi lado en esta etapa de mi vida. Al Profesor Amador, que me aceptó como parte de su grupo de investigación, a Pauly E. por compartir todas las victorias y los fracasos que tuve, al resto del grupo como Francisco M., José L., Oscar A., Daming C., y los demás. En especial, a Dimitri Z. por abrir una verdadera ventana para realizar mi anhelado doctorado y a Pablo A. por tener la consideración de guiarme en el congreso y los escritos.

ÍNDICE GENERAL

Pág.

Dedicatoriaii
Agradecimientoiii
Índice Generaliv
Índice de Tablas viii
Índice de Figurasx
RESUMENxv
ABSTRACTxvi
1 Introducción1
1.1 Motivación1
1.2 Aplicaciones e interés del <i>Lab – on – chip</i> 1
1.3 Hipótesis
2 Propósitos del estudio4
2.1 Objetivos generales4
2.2 Objetivos específicos4
2.2.1 Validación Numérica4
2.2.2 Índice de mezclado4

	2.2	.3	Parámetro representativo del flujo	.4
	2.2	.4	Comparación entre experimento y simulación	.5
3	Ma	rco t	eórico de Flujo electrocinético	6
	3.1	Des	cripción del fenómeno en la escala del continuo	6
	3.2	Dol	ole capa eléctrica (EDL) y microcanal cruzado	.7
	3.3	Ecu	aciones gobernantes	11
	3.3	.1	Concentración de especie iónica y perfil de conductividad eléctrica	11
	3.3	.2	La ley de Ohm	12
	3.3	.3	Las ecuaciones de flujo laminar	13
	3.3	.4	Las ecuaciones gobernantes en su forma adimensional	13
4	Ca	racte	rización física y geométrica	16
5	Ma	teria	les y métodos en la experimentación	20
	5.1	Sol	uciones electrolíticas	20
	5.2	Ger	nerador de alto Voltaje	22
	5.3	Cár	nara CMOS para visualización	23
	5.4	Mic	croscopio invertido Olympus	24
	5.5	Lin	pieza de microcanal de Borosilicato XS3550	24
	5.6	Pue	sta en marcha del experimento	25

	5.7	Índice de mezclado experimental y numérico	26
6	Re	sultados y Discusión	28
	6.1	Simulaciones numéricas	28
	6.1	.1 Descripción del Método de Elementos Finitos	28
	6.1	.2 Grados de libertad (<i>gdl</i>) y número de elementos	30
	6.1	.3 Solución del sistema algebraico con MUMPS	33
	6.1	.4 Estabilización numérica en estudios dependientes del tiempo	33
	6.1	.5 Procedimiento de simulación	35
	6.2	Validación de los resultados numéricos	35
	6.3	Perfil de potencial eléctrico	38
	6.4	Perfil de velocidad	40
	6.5	Gradiente de conductividad eléctrica	42
	6.6	Resultados experimentales	45
	6.7	Comparación de estudios usando el índice de mezclado	46
	6.8	Número de Rayleigh Eléctrico	50
7	Co	nclusiones	55
	7.1	Conclusiones generales	55
	7.2	Líneas futuras de trabajo	56

Bib	liografía
Apé	éndice
A.	Calibración y mediciones con el generador HVS44864
B.	Código en Matlab para el índice de mezclado (<i>CoV</i>) experimental68
C.	Campo de presión en el flujo electrocinético71
D. mic	Comparación experimental de flujo electrocinético estable e inestable en el rocanal ns9574
E.	Protocolo de Limpieza del microcanal XS3550 75
F.	Detalle del procedimiento de simulación de EKF en Comsol77
G.	Resumen enviado para Presentación en Congreso APS-201779
H.	Recepción de Artículo enviado a la revista PHYSICS OF FLUIDS

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 4.1. Dimensiones geométricas de largo L, altura (h) y profundidad d para cada microcanal estudiado
Tabla 4.2. Valores de alto h y potencial ζ para los modelos de microcanal de Luo (Luo, 2009), <i>NS</i> 95 (Quintana, 2012) y <i>XS</i> 355019
Tabla 4.3. Longitudes Norte, Sur, Este y Oeste de los modelos de microcanal para ser usados en el software Comsol. 19
Tabla 5.1. Soluciones electrolíticas con KCl en base líquida. 20
Tabla 5.2. Soluciones electrolíticas con KCl en base sólida
Tabla 5.3. Mediciones de la conductividad eléctrica σ , <i>pH</i> y temperatura (° <i>C</i>) de cada solución electrolítica
Tabla 6.1. Número de elementos, grados de libertad (<i>gdl</i>) y tiempo de simulación para los modelos de Luo (resultado propio), <i>NS</i> 95 y <i>XS</i> 3550
Tabla 6.2. Valores del espesor de difusión δ y el ancho medio de la garganta h en el microcanal <i>NS</i> 95, según resultados experimentales y numéricos para flujos electrocinéticos estables (EKS) e inestables (EKI)
Tabla 6.3. Valores del espesor de difusión, δ , y el ancho medio de la garganta, h en el microcanal XS3550, según resultados experimentales y numéricos para flujos electrocinéticos estables (EKS) e inestables (EKI)
Tabla 6.4. Variación del <i>Rae</i> de 281 (EKS) a 1161 (EKI) asociado a un campo eléctrico aplicado <i>Ea</i> , para identificar los tipos de régimen en el microcanal <i>NS</i> 9552

Tabla 6.5. Variación del *Rae* de 186 (EKS) a 2660 (EKI) asociado a un campo eléctrico aplicado *Ea*, para identificar los tipos de régimen en el microcanal *XS*3550......52

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 3.1. Esquema del microcanal XS3550 aplicando potencial eléctrico (V) en tres
reservorios y un reservorio conectado a tierra. Imagen amplificada
Figura 3.2. Diagrama general para la descripción de un microcanal cruzado. Reservorios
denominados Norte (N), Sur (S), Este (E) y Oeste (W)8
Figura 3.3. Representación de EDL en interfaz sólido-líquido10
Figura 3.4. Simplificación de EDL en el dominio computacional11
Figura 3.5. El espesor de difusión δ y el ancho medio del flujo central h para la fórmula
del Rae, l mostrado en un resultado numérico de inestabilidad electrocinética (EKI) en el
microcanal NS95
Figura 4.1. Descripción de la doble capa eléctrica (EDL) en el flujo electrocinético (EKF)
dentro de un microcanal en base a silicio16
Figura 4.2. Dominio computacional. Se indican las condiciones de contorno para los
modelos de micromezcladores y la profundidad del microcanal18
Figura 5.1. Generador de alto voltaje de <i>LabSmith</i> 22
Figura 5.2. Cámara con tecnología CMOS para la visualización de EKF en microcanales.
Figura 5.3. Técnica de observación reflejada usando una lámpara de mercurio (luz verde)
en el experimento23
Figura 5.4. Microscopio invertido Olympus para amplificar la imagen del microcanal. 24

Figura 5.5. Microcanal XS3550 fabricado de Borosilicato25
Figura 5.6. Equipo para los experimentos de EKF. (1) Generador de alto voltaje. (2) Microscanal <i>XS</i> 3550. (3) Microscopio invertido. (4) cámara <i>CMOS</i> . (5) PC25
Figura 5.7. Experimento de EKF en el laboratorio de <i>Microfluidics</i> . (1) Generador de alto voltaje. (2) Microcanal <i>XS</i> 3550. (3) Microscopio invertido. (4) Cámara <i>CMOS</i> . (5) PC
Figura 6.1. Elemento triangular en dos dimensiones para la formulación del Método de Elementos Finitos
Figura 6.2. Sensibilidad de malla con el caso de Luo (resultado propio) entre el error cometido en la simulación y las iteraciones realizadas, según 4 mallas diferentes
Figura 6.3. Optimización del tiempo de simulación según 4 mallas con diferente número de elementos
Figura 6.4. Malla del modelo del microcanal de Luo (resultado propio) con 48.274 elementos
Figura 6.5. Malla del modelo del microcanal NS95 con 34.892 elementos
Figura 6.6. Malla del modelo de microcanal XS3550 con 44.862 elementos33
Figura 6.7. Comparación de conductividad eléctrica normalizada (adimensional) con conductividad alta (roja) y baja (azul) a 7 <i>ms</i> . Las Figuras corresponden a los resultados numéricos de (a) Luo (Luo, 2009) y (b) estudio actual

Figura 6.9. Velocidad axial $U(mm/s)$ para el microcanal de Luo (Luo, 2009) y estudio
actual, evaluado en el canal Este (línea segmentada) a 25 ms
Figura 6.10. Potencial eléctrico ϕ , V de la simulación propia en el modelo Luo (resultado
propio)
Figura 6.11. Potencial eléctrico ϕ , <i>V</i> de la simulación propia en el modelo <i>NS</i> 9539
Figura 6.12. Potencial eléctrico ϕ , <i>V</i> de la simulación propia en el modelo <i>XS</i> 355039
Figura 6.13. Resultado numérico de la velocidad promedio ($ u , mm/s$) del modelo Luo.
Tiempos (a) 0, (b) 25, (c) 500 y (d) 1000 <i>ms</i> 40
Figura 6.14. Resultado numérico de la velocidad promedio $(u , mm/s)$ del modelo
<i>NS</i> 95. (a) 0, (b) 7.2, (c) 37.4 y (d) 50 <i>ms</i> 41
Figura 6.15. Resultado numérico de la velocidad promedio $(u , mm/s)$ del modelo
<i>XS</i> 3550. Tiempo (a) 0, (b) 1.2, (c) 39.4 y (d) 100 <i>ms</i> 42
Figura 6.16. Conductividad normalizada (σ *) del modelo Luo entre (a) 0, (b) 25, (c) 500
y (d) 1000 ms43
Figura 6.17. Conductividad normalizada (σ *) del modelo <i>NS</i> 95 entre (a) 0, (b) 6.7, (c)
37.4 y (d) 50 <i>ms</i>
Figura 6.18. Conductividad normalizada (σ *) del modelo XS3550 entre (a) 0, (b) 1.2,
(c) 39.4 y (d) 100 <i>ms</i> 44
Figura 6.19. Experimentos de EKF en el microcanal XS3550, según campo eléctricos de
(a) 500, (b) 1000 y (c) 1500 <i>V/cm</i> 45
Figura 6.20. Conductividad normalizada (línea negra) y la intensidad de pixel (círculos
azules) en el microcanal NS95 a 10 μm del centro46

Figura 6.21. Conductividad normalizada (línea negra) y la intensidad de pixel (círculos
azules) en el microcanal XS3550 a 50 μm del centro47
Figura 6.22. El (CoV) en el resultado experimental y numérico para el microcanal NS95.
La conductividad eléctrica se evaluó en el resultado experimental de Quintana, (Quintana,
2012) y numérico a 6.7 <i>ms</i> en 10, 20, 30 y 40 µm en el canal Este
Figura 6.23. El índice experimental <i>CoVe</i> y numérico <i>CoVn</i> para el microcanal <i>XS</i> 3550.
La conductividad eléctrica se evaluó en resultados experimentales y numérico a 50, 75,
100 y 125 μm en el canal este
Figura 6.24. La comparación del CoV numérico en el microcanal XS3550 a 6, 10 y
34 ms. El CoVn se evaluó entre 50 y 300 μ m con 25 μ m de paso a lo largo del canal
Este
Figura 6.25. El promedio <i>CoV</i> para los microcanales <i>NS</i> 95 y <i>XS</i> 3550 evaluados en $x =$
h, 2h, 3h, 4h, considerando los resultados experimentales y numéricos en régimen estable
(Rae = 186, 281) e inestable $(Rae = 1161, 2660)$
Figura 6.26. El índice de mezcla numérico CoVn en diferentes Rae de los microcanales
NS95 y $XS3550$, en régimen estable $Rae = 186, 281, 500, 750, 1000$ e inestable $Rae =$
1161,1200,1700,2200,266054
Figura A.1. La interfaz del software "Sequencer"64
Figura A.2. Potencial eléctrico de CC con el generador calibrado65
Figura A.3. Corriente del generador calibrado

Figura C.1. Contorno de presión en el modelo de Luo. Tiempos (a) 0, (b) 25, (c) 500 y
(d) 1000 <i>ms</i> 71
Eigene C.2. Contains the matrix of the table to NG05 Times of (1) C (1) 7.2 (1) 27.4
Figura C.2. Contorno de presion en el modelo de NS95. Liempos (a) 0, (b) 7.2, (c) 37.4 y
(d) 50 <i>ms</i> 72
Figura C.3. Contorno de presión en el modelo de XS3550. Tiempos (a) 0, (b) 1.2, (c) 39.4
y (d) 100 <i>ms</i>
Figura C.4. Presión mínima en <i>kPa</i> para el modelo NS95 en el instante inicial73
Figura D.1. Imágenes experimentales de flujo (a) estable a $Ea = 783 V/cm$ y (b)
inestable a $Ea = 1620 V/cm$, reportadas por Quintana (Quintana, 2012) con $\gamma = 18.74$
Figura D.2. Índice experimental (CoV) entre flujo estable e inestable de las imágenes
experimentales reportadas por Quintana (Quintana, 2012)74
$\mathbf{F}_{i} = \mathbf{F}_{i} \mathbf{F}_{i}$
Figura E.1. Bomba de vacio Kioto modelo $50 - 660$
Figura E.2. Secuencia de imágenes en el proceso de limpieza del microcanal. (a) Inicio de
la succión desde el extremo Este. (b) Fin del procedimiento de succión desde el extremo
Este
Figura F.1. Mapa conceptual de los pasos para simular EKF en <i>Comsol Multiphysics</i> .

RESUMEN

El fenómeno de flujo electrocinético (EKF) es estudiado experimental y numéricamente en tres diferentes micromezcladores en forma de cruz (microcanales que mezclan electrolitos) con diferentes dimensiones geométricas. Para la aproximación de EKF, se utiliza el método de elementos finitos en el software COMSOL Multiphysics 5.2. El tipo de régimen en EKF es estable e inestable, donde influye el alto y profundidad del microcanal, el campo eléctrico (E_a) y la razón de conductividad eléctrica (γ) . Para validar los resultados numéricos de Comsol, se usaron resultados numéricos de Luo (2009). Asimismo, se comparan simulaciones con mediciones experimentales en el microcanal NS95 hechas por Quintana (2012), y con experimentos en el microcanal XS3550realizados en este trabajo. Los resultados que se obtuvieron son el índice de mezclado (CoV), la velocidad del flujo, el potencial eléctrico, el gradiente de conductividad eléctrica, y el número de Rayleigh Eléctrico (Ra_e) en los micromezcladores NS95 y XS3550. Los resultados más relevantes del trabajo son identificar el tipo de régimen según el Ra_e y el CoV de cada microcanal para determinar la efectividad del dispositivo. El flujo estable se encontró a un $Ra_e = 281$ e inestable a $Ra_e = 1161$ en el microcanal NS95, en comparación al microcanal XS3550 donde el flujo estable se dio a $Ra_e = 186$ e inestable a $Ra_e = 2660$. A su vez, se descubrió que un Ra_e mayor a 1161 genera inestabilidad electrocinética (EKI). Posteriormente, se detalla que el EKI en el microcanal NS95 a E_a = 1620 V/cm obtuvo un $CoV_e = 2.01$ (experimental) y $CoV_n = 1.494$ (numérico) con un $\gamma = 18$, y el microcanal XS3550 a $E_a = 1500 V/cm$ obtuvo un $CoV_e = 0.28$ (experimental) y $CoV_n = 0.39$ (numérico) con un $\gamma = 21$. Así, se concluye que un micromezcladores cruzado promueve mayor mezcla en régimen EKI, al considerar el Ra_e que relaciona la razón de conductividades eléctricas y el campo eléctrico principalmente.

Palabras Claves: EKF, COMSOL, Microcanal cruzado, Índice de mezclado, Micromezclador, Potencial Zeta

ABSTRACT

The electrokinetic flow (EKF) phenomenon is studied experimentally and numerically in three different cross-shaped micromixing devices (microchannels that mix electrolytes) with different geometrical dimensions. The numerical EKF approach uses the finite element method applied through the COMSOL Multiphysics 5.2 software. Both stable and unstable regimes can be found in EKF, where the height and depth of the microchannel, the electric field (E_a) and the electrical conductivity ratio (γ) have influence on the type of regime. Numerical results from Luo (2009) were used to validate the numerical results obtained using Comsol. Similarly, simulations are compared with experimental measurements in the NS95 microchannel obtained by Quintana (2012), and with experiments performed in this work using the XS3550 microchannel. Results are obtained for the mixing index (CoV), flow velocity, electric potential, electrical conductivity gradient, and electric Rayleigh number (Ra_e) in the NS95 and XS3550 micromixing devices. This work identifies the type of regimen by the electric Rayleigh number, Ra_e , and the CoV of each microchannel in order to determine the effectiveness of the device. A stable flow is observed with $Ra_e = 281$ and an unstable regime with $Ra_e = 1161$ using the NS95 microchannel, compared to the stable flow with $Ra_e = 186$ and unstable with $Ra_e = 2660$ found in the XS3550 microchannel. Results obtained show that, for a Ra_e greater than 1161, electrokinetic instability (EKI) is generated. In addition, the EKI in the NS95 microchannel with $E_a = 1620 V/cm$ and $\gamma = 18$ results in $CoV_e = 2.01$ (experimental) and $CoV_n = 1.494$ (numerical), and the XS3550 microchannel with $E_a = 1500 V/cm$ and $\gamma = 21$ results in $CoV_e = 0.28$ (experimental) and $CoV_n = 0.39$ (numerical). This work concludes that a cross-shaped micromixing device promotes greater mixing in the EKI regime, characterized by the Ra_e , that relates the ratio of electrical conductivities and the electric field mainly.

Keywords: EKF, COMSOL, Cross-shaped microchannel, Mixing index, Micromixing, Zeta potential

1 INTRODUCCIÓN

1.1 Motivación

En el estudio de la mecánica de fluidos en la microescala hay dos ideas muy útiles, como son los *MEMS* (*Micro Electro – Mechanical System*) y μTAS (*Micro Total Analysis System*) (Huang, et al., 2006). Los *MEMS* son aquellos elementos que transforman las fuerzas eléctricas en fuerzas mecánicas o viceversa en la tecnología micrométrica, y los μTAS describen los sistemas autónomos provisto de todo lo necesario para el análisis químico de muestras.

A partir de estas dos ideas se promueve este estudio de investigación, relacionado con la descripción y reproducción del flujo electrocinético (EKF) en microcanales (Chen, 2011) (considerados *micromezcladores*, en este estudio) para que en el futuro se desarrollen, diseñen y fabriquen estos tipos de dispositivos, al haber un aumento en el uso de la micro y nanotecnología en nuestros días (Nguyen & Wereley, 2006).

Del mismo modo, estas ideas tienen lugar en un dispositivo conocido como Lab - on - Chip (laboratorio en un chip), donde es posible tener una combinación de sistemas mecánicos y eléctricos, junto con todas las funciones necesarias para el análisis de muestras líquidas o gaseosas (Morgan & Green, 2003).

1.2 Aplicaciones e interés del *Lab – on – chip*

El dispositivo denominado Lab - on - a - Chip para el análisis de líquidos ha sido estudiado por varios autores en las últimas décadas (Yuan, et al., 2017), (Chen, et al., 2005), (Patankar & Hu, 1998), (Clinton-Bailey, et al., 2017), cuyos principales objetivos son reducir el tamaño del dispositivo a la escala de micrones (μm) o nanómetros (nm), reducir los tiempos de ejecución a milisegundos (ms) (Foan, et al., 2018) e implementar equipos portátiles para realizar mediciones en cualquier lugar fuera del laboratorio con

una operación en paralelo, es decir, mediciones *in situ* según se requiera (Yuan, et al., 2017).

Una de las muchas aplicaciones del Lab - on - a - Chip es un micromezclador con dos o tres entradas y una salida de líquidos, como en un microcanal en forma de cruz (Chen, et al., 2005), (Jain & Nandakumar, 2013), el cual es el foco de este estudio. Este micromezclador utiliza electrolitos como sustancia de trabajo para poder ser impulsado por un campo eléctrico en el dispositivo.

En particular, el fenómeno electromecánico conocido como flujo electrocinético (EKF) se produce por el movimiento de un líquido (solución electrolítica) en un microcanal, al impulsar los iones de la solución, como se propone utilizar en el micromezclador (Patankar & Hu, 1998). El arrastre de los iones sobre el líquido se debe a dos motivos, primero por la doble capa eléctrica (EDL, por sus siglas en inglés) cerca de la pared y el campo eléctrico externo (Li, 2004), como se verá en el capítulo 3.2.

Por otra parte, el flujo electrocinético (EKF) permite distinguir dos tipos de régimen en la operación del micromezclador, como lo son el régimen estable o estabilidad de flujo electrocinético (EKS, por sus siglas en inglés) y el régimen inestable o inestabilidad en el flujo electrocinético (EKI, por sus siglas en inglés). En este sentido, el interés es conocer cuál de los dos tipos de flujos posee una mayor efectivad en el proceso de mezclado.

En cuanto a los estudios numéricos previos, han sido muy específicos utilizando geometrías modificadas para generar particularmente EKI (Huang, et al., 2006), (Yang & Pan, 2009), (Pan & Yang, 2009), como un microcanal en forma de T (Hyoung, et al., 2006) y una configuración en forma de Y (Almutairi, et al., 2009).

Además, se han simplificado las ecuaciones del modelo matemático (Oddy, et al., 2001) empleando el Método de Profundidad (Lin, et al., 2008), o bien, utilizando el Método de

Lattice Boltzmann (LBM) (Hlushkou, et al., 2004) y la linealización de ecuaciones gobernantes (Demekhin, et al., 2013).

Para efectos de impulsar el fluido se ha propuesto utilizar campo eléctrico de corriente continua en el micromezclador (Chen, et al., 2005), como también campo eléctrico de corriente alterna en el proceso de mezcla con EKF (Luo, et al., 2007).

De este modo, esta investigación abarcará el proceso de mezclado al interior de un microcanal cruzado al utilizar inestabilidad electrocinética (EKI) (Myers, et al., 1997). Para ello, se han formulado diferentes índices de mezcla con la intensidad de píxel de las imágenes experimentales (Luo, 2009) y con la conductividad eléctrica en los resultados numéricos (Lu, et al., 2002), (Zeng, et al., 2001), donde el índice de mezclado a utilizar será la fórmula de Lu para el análisis experimental y numérico, conocido como Coeficiente de Variación (*CoV*) (Lu, et al., 2002), y así, determinar la efectividad del micromezclador.

1.3 Hipótesis

Es posible modelar el comportamiento de flujo electrocinético con simulaciones computacionales, considerando condiciones de régimen estable e inestable en un micromezclador en forma de cruz.

Las inestabilidades electrocinéticas (EKI) darán lugar a una alta efectividad en el proceso de mezclado al ingresar tres soluciones electrolíticas en el dispositivo, una de alta conductividad eléctrica y dos de baja conductividad eléctrica.

2 PROPÓSITOS DEL ESTUDIO

2.1 Objetivos generales

El objetivo general de esta investigación es realizar simulaciones del comportamiento del flujo Electrocinético en un microcanal en forma de cruz a través del software *Comsol Multiphysics* 5.2, para obtener el potencial eléctrico, el campo de velocidad y el perfil de conductividad eléctrica normalizado, los cuales permitan ser comparados los régimen estable e inestable con experimentos en los microcanales *NS*95 y *XS*3550.

2.2 Objetivos específicos

2.2.1 Validación Numérica

Realizar un proceso de sensibilidad numérica para determinar que las simulaciones describan apropiadamente el comportamiento de EKF, siendo comparados con los que propone otro autor (Luo, 2009).

2.2.2 Índice de mezclado

Evaluar el nivel de mezclado y el gradiente de conductividad eléctrica, en forma numérica y experimental, entre dos electrólitos, para determinar y verificar la efectividad del proceso de mezclado.

2.2.3 Parámetro representativo del flujo

Determinar el número adimensional de *Rayleigh Eléctrico* en cada régimen diferenciando de estabilidad (EKS) o inestabilidad (EKI) de flujo electrocinético. Este valor permite comparar dimensiones geométricas, como también el campo eléctrico aplicado y la razón de conductividad eléctrica utilizada en los dos microcanales estudiados.

2.2.4 Comparación entre experimento y simulación

Desarrollar y aplicar una metodología para realizar experimentos de flujo electrocinético en el microcanal *XS*3550, para obtener flujo electrocinético estable e inestable.

Observar la inestabilidad electrocinética (EKI) en base a dos micromezcladores, como son los microcanales *NS*95 (Quintana, 2012) y *XS*3550.

3 MARCO TEÓRICO DE FLUJO ELECTROCINÉTICO

En esta sección se tratará el tema de la hipótesis del medio continuo en el desarrollo de las simulaciones numéricas, la definición de la doble capa eléctrica (EDL) en el microcanal cruzado y el uso de las ecuaciones gobernantes en la física del flujo electrocinético (EKF).

3.1 Descripción del fenómeno en la escala del continuo

En el estudio de la mecánica de fluidos, la hipótesis del medio continuo supone que todas las cantidades de interés, como la densidad, la velocidad y la presión, se definen en cualquier lugar del espacio y varían continuamente de un punto a otro dentro de un flujo (Nguyen & Wereley, 2006). Es decir, todas las cantidades o propiedades están bien definidas para trabajar con las ecuaciones que describen el flujo, y no existen discontinuidades o vacíos en la materia.

De este modo, una consulta pertinente viene a ser ¿Es válida la hipótesis del continuo en el dominio de la microescala? Evidentemente que si la respuesta es positiva debe existir un parámetro que apoye tal aseveración. Este parámetro se denomina el número adimensional *Knudsen*, que relaciona la trayectoria libre media (Λ , mean free path) de interacción entre moléculas, y la longitud característica (L_c) del sistema que se analiza, como se muestra en la ecuación (3.1) (Morgan & Green, 2003).

$$Kn = \frac{\Lambda}{L_c} \tag{3.1}$$

Según el número de *Knudsen* se establecen principalmente 4 tipos de medios en la mecánica de fluidos, los cuales son (Morgan & Green, 2003):

o $Kn < 10^{-3}$: La hipótesis del continuo es válida con condiciones de nodeslizamiento.

- $10^{-3} < Kn < 10^{-1}$: La hipótesis del continuo es válida sin condición de nodeslizamiento.
- $10^{-1} < Kn < 10^{1}$: Medio de transición, donde no se asegura validez o invalidez de la hipótesis del continuo.
- $Kn > 10^1$: Medio molecular libre que no obedece a la hipótesis del continuo.

Para estimar el valor mínimo de la longitud característica (en este caso, la altura del microcanal), se muestra la ecuación (3.1) para un líquido con una trayectoria libre media, $\Lambda = 2.5 \dot{A} = 2.5 \times 10^{-4} \mu m$ (Morgan & Green, 2003), y si se asume que el $Kn = 10^{-3}$, entonces la altura mínima del microcanal debe ser de 250 nm o mayor, para que sea válida la hipótesis del continuo y lo sean las respectivas ecuaciones que se presentarán en este trabajo.

Cabe mencionar que, los diferentes microcanales de Luo $(h = 60 \ \mu m)$, NS95 $(h = 10 \ \mu m)$ y XS3550 $(h = 50 \ \mu m)$, serán modelados correctamente al aseverar que la hipótesis del continuo se cumple y que se utilizarán de buena forma las ecuaciones gobernantes con condición de deslizamiento.

3.2 Doble capa eléctrica (EDL) y microcanal cruzado

El foco de este trabajo es en microcanales fabricados en base a silicio, los cuales promueven el movimiento de un fluido electrolítico, que contiene cationes y aniones, mediante un campo eléctrico de corriente continua (Ghosal, 2010).

El movimiento del fluido ocurre por dos efectos en el microcanal. El primero es el que ocurre por un efecto electroquímico entre la pared del microcanal y el electrolito, conocida como la doble capa eléctrica (EDL) (Hsua, et al., 2016), y el otro impulso en el fluido es el que produce el campo eléctrico que se aplica en los reservorios del microcanal en forma de cruz, como se muestra en la Figura 3.1 (Devasenathipathy & Santiago, 2005).



Figura 3.1. Esquema del microcanal XS3550 aplicando potencial eléctrico (*V*) en tres reservorios y un reservorio conectado a tierra. Imagen amplificada.

La Figura 3.2 muestra los cuatro reservorios del microcanal, Norte (N), Sur (S), Este (E) y Oeste (W), que será necesario tener presente para el posterior análisis de las ecuaciones, resultados y conclusiones.



Figura 3.2. Diagrama general para la descripción de un microcanal cruzado. Reservorios denominados Norte (N), Sur (S), Este (E) y Oeste (W).

De esta forma, cuando un electrolito está en contacto con una superficie sólida, se produce un efecto electroquímico espontáneo entre el líquido y la superficie, lo que resulta en una distribución de cargas. Para los microcanales fabricados de vidrio o sílice fundida (los microcanales *NS*95 y *XS*3550 son de Borosilicato), los grupos silanol de la superficie se deprotonizan en contacto con un electrolito. El grado de deprotonación depende del pH

local y de la concentración de iones de la solución. En el caso de interés, se forma la doble capa eléctrica (EDL) entre una superficie sólida cargada y una región cerca de la superficie que soporta un exceso neto de contraión.

De acuerdo con la teoría clásica, se considera que estos contraiones residen en dos regiones dentro de la EDL: la capa de *Stern* y la capa difusa de *Gouy – Chapman*. Los contraiones adsorbidos inmóviles e inmediatamente adyacentes a la pared forman la capa de *Stern*, mientras que la capa de *Gouy – Chapman* comprende la capa difusa y móvil que permite el movimiento tras la aplicación de un campo eléctrico externo. El plano de corte que separa las capas de *Stern* y *Gouy – Chapman* es la ubicación de la condición de fluido con deslizamiento. El potencial en este plano de corte se denomina potencial zeta, ζ , como se muestra en la Figura 3.3 (Devasenathipathy & Santiago, 2005).

Para el caso típico, la doble capa eléctrica (EDL) es la zona próxima a la pared del microcanal que a raíz del efecto químico se induce una carga negativa de iones que atraen a los iones positivos, como se representa en la Figura 3.3, al producir un gradiente de concentración entre cationes y aniones, dando lugar a una densidad de carga neta en el fluido (Kim, et al., 2002). Producto de la diferencia de concentración, se da lugar a un diferencial en el potencial interno $\psi(y)$ que varía exponencialmente en el eje normal a la pared (eje y).

Este efecto en la EDL es representado por un parámetro característico del flujo denominado potencial ζ que se mide en milivolt (*mV*) (Patankar & Hu, 1998). Este potencial cuantifica la relación de densidad de carga entre la pared y el electrolito, que depende de factores tales como el PH de la solución y la concentración electrolítica (Patankar & Hu, 1998).



Figura 3.3. Representación de EDL en interfaz sólido-líquido.

Así, al usar el potencial ζ es posible simplificar la EDL a una velocidad impuesta en los bordes para describir únicamente el flujo desarrollado en el microcanal (Kirby & Hasselbrink, 2004), i.e., utilizar la permitividad ϵ , el campo eléctrico \vec{E} y la viscosidad μ en la velocidad de flujo electro-osmótico \vec{u}_{EOF} (3.2) en el dominio computacional (líneas segmentadas), como se muestra en la Figura 3.4. De este modo, es posible mover el electrolítico por el potencial eléctrico externo aplicado en cada reservorio, ya que los iones mueven al fluido impulsados en la dirección del campo eléctrico (Patankar & Hu, 1998).

$$\vec{u}_{EOF} = -\zeta \frac{\epsilon \vec{E}}{\mu} \tag{3.2}$$



Figura 3.4. Simplificación de EDL en el dominio computacional

3.3 Ecuaciones gobernantes

Las ecuaciones que rigen el flujo electrocinético son de tres tipos: primero la ecuación de concentración de especie iónica dependiente del tiempo, que es simplificada a la ecuación de conductividad eléctrica, segundo la ley de Ohm del potencial electrostático que relaciona el potencial eléctrico con la conductividad eléctrica, y tercero las ecuaciones de flujo laminar dependientes del tiempo que describen la variación de la velocidad y presión.

3.3.1 Concentración de especie iónica y perfil de conductividad eléctrica

La ecuación de Nernst-Planck (NP) es la formulación general de concentración de especie iónica mediante la ley de difusión de Fick, extendida al movimiento de partículas cargadas (Maex, 2014). Esta ecuación fue establecida y corroborada experimentalmente por Nernst (Nernst, 1888), y teóricamente elaborada por Planck (Planck, 1890).

Se define la relación de Nernst-Einstein (3.3) mediante la temperatura absoluta *T*, la constante universal de gas *R* y la movilidad μ_{\pm} del catión (+) y el anión (-).

$$D_{\pm} = RT\mu_{\pm} \tag{3.3}$$

Luego las ecuaciones de concentración de especie iónica (3.4) y (3.5) relacionan la concentración iónica c_{\pm} , la difusividad iónica D_{\pm} , el campo de velocidad \vec{v} y el campo eléctrico \vec{E} por:

$$\frac{\partial c_+}{\partial t} + \nabla \cdot (c_+ \vec{v}) = D_+ \nabla^2 c_+ - z_+ \mu_+ F \nabla (c_+ \vec{E})$$
(3.4)

$$\frac{\partial c_{-}}{\partial t} + \nabla \cdot (c_{-}\vec{v}) = D_{-}\nabla^{2}c_{-} - z_{-}\mu_{-}F\nabla(c_{-}\vec{E})$$
(3.5)

Las ecuaciones (3.4) y (3.5) son para las especies de cationes (+) y aniones (-), de acuerdo con las ecuaciones de NP. Si la sustancia de trabajo es un fluido monovalente $(z_+|=|z_-|=1)$, de especies iónicas binarias, es decir, cloruro de potasio (KCl) formado por el anión cloruro (Cl^-) y el catión potasio (K^+) de concentración similar $c_+ \approx c_- \approx c$, entonces se obtiene una conductividad eléctrica reducida σ , (3.6).

$$\sigma = F^2(\mu_+ + \mu_-)c \tag{3.6}$$

Así, las dos ecuaciones de NP se transforman en la ecuación de la conductividad eléctrica (3.7), donde la difusividad efectiva D_{eff} (3.8), relaciona la difusión del ión potasio D_{K^+} y el ión cloruro D_{Cl^-} en agua (Posner & Santiago, 2006).

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} + \nabla \cdot (\sigma \vec{v}) = D_{eff} \nabla^2 \sigma \tag{3.7}$$

$$D_{eff} = \frac{2D_{K} + D_{Cl}}{D_{K} + D_{Cl}}$$
(3.8)

3.3.2 La ley de Ohm

La expresión (3.9), conocida como ley de Ohm [33] se aplica a un medio eléctrico por tener una solución iónica (*KCl*), donde σ es la conductividad eléctrica y \vec{E} es el campo eléctrico externo que obedece a la Ley de Gauss ($E = -\nabla \phi$, donde ϕ es el potencial eléctrico externo) (Santos & Storey, 2008).

$$\nabla \cdot \left(\sigma \vec{E}\right) = 0 \tag{3.9}$$

Al resolver la ecuación (3.9) se conocerá el campo eléctrico \vec{E} para ser usado en la velocidad electro-osmótica (\vec{u}_{EOF}), junto con la permitividad ϵ , viscosidad μ y potencial ζ , como condición de contorno en la ecuación de flujo laminar.

3.3.3 Las ecuaciones de flujo laminar

Para acoplar la conductividad y el potencial eléctrico a la dinámica del fluido, se considera la ecuación modificada de Navier-Stokes (3.11), junto con la ecuación de continuidad (3.10) para un fluido Newtoniano e incompresible (Oddy & Santiago, 2005).

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \tag{3.10}$$

$$\rho\left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v}\nabla) \cdot \vec{v}\right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \vec{v} + f_e$$
(3.11)

Donde ρ es la densidad, μ es la viscosidad y p es la presión del fluido, mientras que f_e es la fuerza eléctrica definida en la ecuación (3.12), que muestra la relación entre el gradiente de conductividad ($\nabla \sigma$) y el campo eléctrico \vec{E} , suponiendo un proceso isotérmico (Posner & Santiago, 2006):

$$f_e = \left(\epsilon \frac{\nabla \sigma}{\sigma} \cdot \vec{E}\right) \vec{E} \tag{3.12}$$

3.3.4 Las ecuaciones gobernantes en su forma adimensional

En resumen, las ecuaciones gobernantes para el estudio numérico de EKF son: el perfil de conductividad eléctrica (3.13), la ley de Ohm (3.14), el balance de masa (3.15), y la ecuación modificada de Navier-Stokes o conservación de momentum (3.16).

$$\frac{\partial\sigma}{\partial t} + \nabla \cdot (\sigma \vec{v}) = D_{eff} \nabla^2 \sigma \tag{3.13}$$

$$\nabla \cdot \left(\sigma \vec{E}\right) = 0 \tag{3.14}$$

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \tag{3.15}$$

$$\rho\left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v}\nabla) \cdot \vec{v}\right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \vec{v} + \left(\epsilon \frac{\nabla \sigma}{\sigma} \cdot \vec{E}\right) \vec{E}$$
(3.16)

Adicionalmente, para identificar el tipo de régimen en el flujo electrocinético, se propone el Rayleigh eléctrico Ra_e [3], al expresar la ecuación de conductividad eléctrica (3.13) en su forma adimensional, ecuación (3.17).

$$\frac{\partial \sigma^*}{\partial t^*} + \nabla \cdot \left(\sigma^* \overrightarrow{v^*}\right) = \frac{1}{Ra_e} \nabla^2 \sigma^*$$
(3.17)

Donde la conductividad eléctrica σ se escala con la conductividad eléctrica alta (σ_H) y baja (σ_L), para obtener la conductividad normalizada σ^* , (3.18), y la velocidad adimensional \vec{v}^* , (3.19), que se escala con la velocidad del flujo \vec{v} y la velocidad electro-osmótica (EOF) \vec{u}_{EOF} (Li, et al., 2016).

$$\sigma^* = \frac{\sigma - \sigma_L}{\sigma_H - \sigma_L} \tag{3.18}$$

$$\vec{v}^* = \frac{\vec{v}}{\vec{u}_{EOF}} \tag{3.19}$$

El Ra_e está determinado por el espesor de difusión δ y el ancho medio del flujo central \check{h} , ambos se muestran en la Figura 3.5. Al considerar que el dominio en forma de cruz está delimitado por las entradas Oeste, Norte y Sur, y por la salida Este (ver Figura 3.2), entonces la relación de conductividad γ , (3.20), representa la relación entre la conductividad Oeste (σ_W) sobre la conductividad Sur (σ_S) y el campo eléctrico externo aplicado E_a , (3.21), representa el cociente entre la diferencia de voltaje Sur (ϕ_S) y Este (ϕ_E) con la suma de las longitudes Sur (L_S) y Este (L_E).

$$\gamma = \frac{\sigma_W}{\sigma_S} \tag{3.20}$$

$$E_a = \frac{\phi_S - \phi_E}{L_S + L_E} \tag{3.21}$$

Luego, la formulación del Rayleigh eléctrico Ra_e está dada por la ecuación (3.22). Para más detalles, ver Chen et al. (Posner & Santiago, 2006).

$$Ra_{e} = \frac{\epsilon E_{a}^{2} d^{2}}{\mu D_{eff}} \frac{(\gamma - 1)}{\gamma} \left(1 - \exp\left(-\left(\frac{\tilde{h}}{\delta}\right)^{2}\right) - \exp\left(-\left(\frac{w - \tilde{h}}{\delta}\right)^{2}\right) \right)$$
(3.22)



Figura 3.5. El espesor de difusión δ y el ancho medio del flujo central \check{h} para la fórmula del $Ra_{e,l}$ mostrado en un resultado numérico de inestabilidad electrocinética (EKI) en el microcanal *NS*95.

Las propiedades constantes del fluido necesarias para la formulación del Ra_e son la viscosidad ($\mu = 1 \times 10^{-3} Pa \cdot s$), aproximadamente la del agua, la difusividad efectiva $\left(D_{eff} = 2 \times 10^{-9} \frac{m^2}{s}\right)$ del *KCl* en agua y la permitividad ($\varepsilon = 78.3$).

4 CARACTERIZACIÓN FÍSICA Y GEOMÉTRICA

El área de *microf luidics* es la ciencia de fluidos en escalas espaciales entre uno y cien micrones (μm), donde se involucran estructuras de ingeniería para manipular fluidos en escalas que son microscópicas, pero mucho más grandes que las dimensiones atómicas, por lo que los sistemas se pueden tratar en la aproximación continua, como se revisó previamente (3.1 Descripción del fenómeno en la escala del continuo).

En relación con el tema específico, el flujo Electrocinético (EKF) es causado por el movimiento electro-osmótico descubierto experimentalmente por Reus en 1808 (Reuss, 1808), donde el movimiento de una solución iónica es en respuesta a un campo eléctrico aplicado en un canal (Devasenathipathy & Santiago, 2005).

El movimiento de esta solución iónica (electrolito) dentro de un microcanal se debe principalmente al efecto de pared del grupo silanol que resulta en la Doble Capa Eléctrica (EDL), descrita por la longitud de Debye (Figura 4.1).



Figura 4.1. Descripción de la doble capa eléctrica (EDL) en el flujo electrocinético (EKF) dentro de un microcanal en base a silicio.

Esta longitud de Debye λ_D descrita por la ecuación (4.1), se compone por la capa de *Stern* y la capa difusa con un plano intermedio denominado plano de arrastre.

$$\lambda_D = \left(\frac{\epsilon RT}{F^2 \sum_i z_i^2 c_{i,\infty}}\right)^{\frac{1}{2}}$$
(4.1)

Donde ϵ es la permitividad, R la constante universal de los gases, T la temperatura absoluta, F la constante de Faraday, z_i el número de valencia de cada componente y $c_{i,\infty}$ la concentración del electrolito fuera de la EDL.

Por ejemplo, una solución 0.01 *mM* de *KCl* tiene una $\lambda_D = 97.93 nm$ y va disminuyendo a medida que se aumenta la concentración, por lo tanto, como la altura $h = 10 \ \mu m$ es la más baja en este estudio, se desprende que la longitud de Debye es mucho más pequeña que el alto del microcanal ($\lambda_D \ll h$). Así, la EDL se puede simplificar con una condición de deslizamiento (velocidad Electro-osmótica) por medio del potencial ζ (Oddy, et al., 2001).

Teniendo presente lo anterior, en las simulaciones de EKF, se considera un microcanal en forma de cruz en un modelo bidimensional como se muestra en la Figura 4.2. El origen del eje x - y está ubicado en el centro del microcanal y la longitud característica de cada dispositivo es la altura *h*. Los bordes Norte y Sur son entradas de baja conductividad (σ_L), $\sigma_N = \sigma_S$, el borde Oeste es de alta conductividad (σ_H), σ_W , y el borde Este es una condición abierta para entrada o salida de flujo. Además, los reservorios tienen presión cero, porque el movimiento del fluido es inducido solo por aplicar un campo eléctrico y no por un gradiente de presión, como se muestra en la Figura 4.2.



Figura 4.2. Dominio computacional. Se indican las condiciones de contorno para los modelos de micromezcladores y la profundidad del microcanal.

Cada microcanal cruzado, Figura 4.2, posee en las paredes (líneas rojas) aislación eléctrica $(\nabla \phi \cdot \hat{n} = 0)$ y velocidad electro-osmótica (\vec{u}_{EOF}) , y se ingresa como condición de contorno la conductividad eléctrica (σ), el potencial eléctrico (ϕ) y la presión (p) en cada reservorio.

Las simulaciones mediante el Método de Elementos Finitos se llevaron a cabo con el software *Comsol Multiphysics* 5.2, donde las dimensiones del modelo de cada caso se expresan en la Tabla 4.1, sobre el largo de entrada (L_{in}) , el largo de salida (L_{out}) , el alto (h) y la profundidad (d), que se indican en la Figura 4.2.

Tabla 4.1. Dimensiones geométricas de largo (L), altura (h) y profundidad (d) paracada microcanal estudiado.

Modelo	L _{in} , μm	L _{out} , μm	h,µm	d, µm
Luo (Luo, 2009)	350	1000	60	10
NS95 (propuesto)	70	150	10	12
XS3550	250	750	50	20

La Tabla 4.2 muestra los diferentes potenciales ζ utilizados para el microcanal de Luo $(h = 60 \ \mu m)$, el microcanal *NS*95 $(h = 10 \ \mu m)$ y el microcanal *XS*3550 $(h = 50 \ \mu m)$. El primer caso utiliza el valor propuesto por Luo (Luo, 2009), el segundo se obtuvo de Zeng (Zeng, et al., 2001), y el tercer caso se propuso para el estudio numérico en COMSOL considerando la convergencia en el estado estacionario.

Tabla 4.2. Valores de alto (h) y potencial ζ para los modelos de microcanal de Luo (Luo, 2009), *NS*95 (Quintana, 2012) y *XS*3550.

Modelo	$h, \mu m$	ζ, mV
Luo (Luo, 2009)	60	-75
NS95 (Quintana, 2012)	10	-100
XS3550	50	-150

Las longitudes correspondientes a los canales norte (L_N) , sur (L_S) , oeste (L_W) y este (L_E) para cada simulación se muestran en la Tabla 4.3, donde la longitud importante es el canal Este como el lugar principal del proceso de mezcla. Cabe mencionar que las longitudes de los microcanales *NS*95 y *XS*3550 están definidas por este estudio, pero para el caso de Luo (Luo, 2009) se utilizaron las longitudes de su trabajo.

Tabla 4.3. Longitudes Norte, Sur, Este y Oeste de los modelos de microcanal para serusados en el software Comsol.

Dispositivo	$L_N(\mu m)$	$L_{S}(\mu m)$	$L_W(\mu m)$	$L_E(\mu m)$
Luo (Luo, 2009)	350	350	350	1000
NS95	70	70	70	145
XS3550	300	300	300	1000
5 MATERIALES Y MÉTODOS EN LA EXPERIMENTACIÓN

En esta sección, se detallan los procedimientos realizados para preparar las soluciones de electrolitos. Los montajes del generador de alto voltaje, la cámara CMOS, el microscopio invertido, la limpieza del microcanal antes y después de su uso y la configuración del experimento en el laboratorio con todos sus componentes.

En la última subsección, se entregan los índices de mezclado que serán utilizados para cuantificar la efectividad de cada micromezclador entre los microcanales NS95 y XS3550.

5.1 Soluciones electrolíticas

Para llevar a cabo el estudio del fenómeno de flujo electrocinético (EKF) en un microcanal, se deben preparar soluciones electrolíticas de *KCl* (cloruro de potasio) con diferentes concentraciones. Las soluciones se prepararon con agua desionizada más una concentración de 10 *mM* de HEPES (agente amortiguador y neutralizador de pH en la solución) (Posner & Santiago, 2006) y la concentración de *KCl*. Se varío de 0.1 a 4 *mM* de *KCl* en base líquida (Tabla 5.1) y de 8 a 800 *mM* de *KCl* en base sólida (Tabla 5.2), las cuales se prepararon para tener un mayor rango de soluciones para experimentos de EKF en microcanales.

La Tabla 5.1 muestra la concentración de *KCl* C_{KCl} (*mM*), el volumen de la solución \forall , (*ml*), la masa calculada m_{cal} , (*g*) para la concentración requerida, y el volumen total usado \forall_t , (*ml*).

 C_{KCl}, mM \forall , ml \forall_t, ml m_{cal}, g C_{KCl}, mM \forall , ml m_{cal}, g \forall_t, ml 0.8 0.0089 40 150 0.1 150 5 0.0011 1 150 0.0112 50 10 0.0022 0.2 150

Tabla 5.1. Soluciones electrolíticas con KCl en base líquida.

0.4	150	0.0045	20	2	150	0.0224	100
0.6	150	0.0067	30	4	150	0.0447	200

La Tabla 5.2 muestra la concentración de *KCl* C_{KCl} (*mM*), el volumen de la solución \forall (*ml*), la masa calculada m_{cal} (*g*) para la concentración requerida, y la masa total efectivamente usada m_t (*g*).

C_{KCl}, mM	∀,ml	m _{cal} , g	m_t, g	C_{KCl}, mM	∀,ml	m _{cal} , g	m _t , g
8	200	0.119	0.119	40	200	0.596	0.597
10	200	0.149	0.149	80	100	0.596	0.596
15	200	0.224	0.224	100	150	1.118	1.118
20	200	0.298	0.298	200	100	1.491	1.491
25	200	0.373	0.373	300	100	2.237	2.237
30	200	0.447	0.447	800	50	2.982	2.982

Tabla 5.2. Soluciones electrolíticas con KCl en base sólida.

Cuando todas las soluciones se prepararon, se procede a medir el pH (Hanna Instruments, Serie P21), la conductividad eléctrica y la temperatura (Hanna Instruments, Clarckson EC215).

La Tabla 5.3 muestra los resultados de las mediciones, los valores de conductividad eléctrica, pH y temperatura para cada una de las concentraciones de KCl (mM). Para la medición de la conductividad, se espera alrededor de 2 minutos o hasta un valor estable en el equipo, y para el pH el tiempo fue de 5 minutos o hasta un valor estable.

Tabla 5.3. Mediciones de la conductividad eléctrica σ , *pH* y temperatura (°*C*) de cada solución electrolítica.

$C_{KCl} [mM]$	σ,μS/cm	рН	<i>Т</i> , °С	$C_{KCl} [mM]$	σ,μS/cm	рН	<i>Т</i> , °С
0.1	17.0	5.33	15.0	15	1262	5.34	15.4

0.2	24.2	5.29	15.2	20	1514	5.36	15.4
0.4	41.6	5.29	15.3	25	1709	5.36	15.4
0.6	54.8	5.30	15.0	30	1834	5.36	15.4
0.8	56.6	5.32	14.8	40	2200	5.38	15.6
1.0	61.3	5.30	15.0	80	4700	5.25	15.7
2.0	148.7	5.32	14.9	100	5460	5.39	15.5
4.0	296.0	5.27	15.4	200	9660	5.36	15.4
8.0	890.0	5.30	15.3	300	15760	5.34	15.9
10.0	929.0	5.32	15.5	800	34900	5.52	15.9

Las dos soluciones utilizadas para los experimentos propuestos en el microcanal XS3550 son 0.1 y 15 mM de KCl, con una conductividad eléctrica baja $\sigma_L = 17 \ (\mu S/cm)$ y alta $\sigma_H = 1262 \ (\mu S/cm)$, respectivamente. Estas soluciones se seleccionaron, puesto que la relación de conductividad eléctrica γ , (3.20), es similar entre los microcanales, donde en el microcanal NS95 la razón es $\gamma = 18$ y en el microcanal XS3550 la razón es $\gamma = 21$.

5.2 Generador de alto Voltaje

El equipo que suministra el potencial eléctrico en los reservorios del microcanal es el Generador de Alto Voltaje HVS448 de *LabSmith* como se muestra en la Figura 5.1, que posee un voltaje máximo de salida de +3000 V, un máximo diferencial de voltaje de 6000 V, una corriente máxima de salida de +3.2 mA, una corriente máxima por canal de +2.4 mA, y poseen una resolución de voltaje y corriente igual a 100 mV y 300 nA, respectivamente.



Figura 5.1. Generador de alto voltaje de LabSmith

La calibración de los canales de suministro de corriente continua (CC) se realizó de acuerdo con el manual. Para obtener más información, consultar apéndice A. Calibración y mediciones con el generador HVS448.

5.3 Cámara CMOS para visualización

Para los experimentos de EKF, se utilizó una cámara *CMOS* para observar el flujo dentro del microcanal (Figura 5.2) a través de la técnica de observación reflejada usando una lámpara de mercurio (Figura 5.3).



Figura 5.2. Cámara con tecnología CMOS para la visualización de EKF en microcanales.



Figura 5.3. Técnica de observación reflejada usando una lámpara de mercurio (luz verde) en el experimento.

Los sensores de la cámara *CMOS* son capaces de captar velocidades muy altas con altas resoluciones 1240 *frame per second (fps)* para obtener una mejor resolución temporal y mayor detalle en la imagen (research, 2013).

5.4 Microscopio invertido Olympus

El microscopio invertido Olympus utilizado en los experimentos se presenta en la Figura 5.4, donde se muestra adicionalmente una lámpara para ajustar el foco 40x que se usó en los experimentos.

Después del posicionamiento del microcanal, el flujo se captura con la cámara *CMOS* cuando el generador HVS se enciende para aplicar el potencial eléctrico en cada reservorio del microcanal.



Figura 5.4. Microscopio invertido Olympus para amplificar la imagen del microcanal.

5.5 Limpieza de microcanal de Borosilicato XS3550

Antes de cada experimento, es necesario limpiar el microcanal *XS*3550 (Figura 5.5) de Borosilicato de partículas o cualquier daño producido durante un experimento o proceso de limpieza previo. Para mayor detalle ver en el apéndice E. Protocolo de Limpieza del microcanal *XS*3550.



Figura 5.5. Microcanal XS3550 fabricado de Borosilicato.

5.6 Puesta en marcha del experimento

La configuración experimental para observar EKF fue realizada en el microcanal XS3550. El experimento se lleva a cabo con dos soluciones electrolíticas acuosas con dos concentraciones de *KCl* (0.1 *y* 15 *mM*).

La Figura 5.6 muestra los principales equipos en la experimentación del flujo electrocinético en microcanales, que fueron detallados anteriormente.



Figura 5.6. Equipo para los experimentos de EKF. (1) Generador de alto voltaje. (2) Microcanal *XS*3550. (3) Microscopio invertido. (4) cámara *CMOS*. (5) PC.

El experimento, Figura 5.7, comienza al aplicar un potencial eléctrico por el generador de alto voltaje (1) para producir un campo eléctrico (E_a) sobre la solución iónica en los reservorios del microcanal XS3550 (2), y así el microscopio invertido Olympus (3) tiene la cámara *CMOS* (4) para visualizar el comportamiento del flujo en el computador (5).



Figura 5.7. Experimento de EKF en el laboratorio de *Microfluidics*. (1) Generador de alto voltaje. (2) Microcanal *XS*3550. (3) Microscopio invertido. (4) Cámara *CMOS*. (5) PC.

5.7 Índice de mezclado experimental y numérico

Para comparar dos micromezcladores con diferentes condiciones operativas como el campo eléctrico E_a , el alto del canal h o la razón de conductividad γ , se utilizará el coeficiente de variación (*CoV*) como índice de mezclado (Lu, et al., 2002). Este índice (*CoV*) será evaluado a partir de las imágenes experimentales y de los resultados numéricos.

El índice experimental CoV_e (5.1) se determina mediante la intensidad de píxel (I^p) de cada punto k en la imagen experimental, con el número total de píxeles (N) y la intensidad de píxel promedio (\overline{I}^p).

$$CoV_e = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} \left(\frac{I_k^p - \bar{I}^p}{I_k^p}\right)^2}$$
(5.1)

Se menciona que el tratamiento de imágenes que se realizó para obtener el índice fue mediante un código en Matlab que entrega el valor de cada pixel en un rango de 0 a 1. Para más información, este código se muestra en el Apéndice B. Código en Matlab para el índice de mezclado (*CoV*) experimental.

Al mismo tiempo, el índice numérico CoV_n (5.2) requiere de la simulación computacional, la conductividad eléctrica (σ) del punto k, el número total de evaluación (N) y el promedio de conductividad ($\bar{\sigma}$).

$$CoV_n = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} \left(\frac{\sigma_k - \bar{\sigma}}{\sigma_k}\right)^2}$$
(5.2)

Estos valores serán necesarios para conocer cuán efectivo es el proceso de mezclado aguas abajo del microcanal, esto es, en el canal Este, por lo que todas las evaluaciones serán hechas para analizar si las inestabilidades electrocinéticas (EKI) promueven mayor mezclado entre los 2 casos estudiados, los microcanales NS95 y XS3550.

6 RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Los resultados de la investigación son la descripción de las aproximaciones de EKF por el método de elementos finitos (FEM), la validación de resultados numéricos en flujo inestable con los obtenidos por Luo (Luo, 2009), y el análisis de las simulaciones realizadas en este trabajo de los modelos de Luo (resultado propio), *NS*95 y *XS*3550.

A su vez, en esta sección se presentará el análisis de los índices de mezclado de cada micromezclador y el número de Rayleigh eléctrico (Ra_e), considerando los flujos estable e inestable en los microcanales *NS*95 y *XS*3550.

6.1 Simulaciones numéricas

Esta sección describe los aspectos del método de elementos finitos (FEM) para simulaciones numéricas con el software *Comsol Multiphysics*, considerando la formulación básica del método, el tipo de elemento que se utiliza en las simulaciones, los grados de libertad, la estabilización numérica y el procedimiento para simular EKF en estado transiente.

6.1.1 Descripción del Método de Elementos Finitos

La descripción del problema físico mediante un modelo matemático requiere ciertas suposiciones que juntas conducen a las ecuaciones diferenciales gobernantes que son la base del modelo matemático (Bathe, 2016).

El método de elementos finitos es una técnica numérica para resolver aquellos problemas matemáticos que se describen mediante ecuaciones diferenciales parciales. Las funciones de aproximación en elementos finitos se determinan en términos de valores nodales de un campo físico (Nikishkov, 2004).

El elemento finito utilizado es la formulación de elementos triangulares, el cual fue el primer elemento finito propuesto para problemas continuos debido a su simple formulación en comparación con otros elementos (Bathe, 2016).

En la Figura 6.1 se muestra un elemento triangular en el sistema de coordenadas xy. Al tener tres nodos el elemento, la aproximación lineal de las velocidades u y v se expresan en la ecuación (6.1), donde se tiene las funciones de interpolación nodal N_i , con i = 1,2,3.



Figura 6.1. Elemento triangular en dos dimensiones para la formulación del Método de Elementos Finitos.

$$u(x, y) = N_1 u_1 + N_2 u_2 + N_3 u_3$$

$$v(x, y) = N_1 v_1 + N_2 v_2 + N_3 v_3$$

$$N_i = \alpha_i + \beta_i x + \gamma_i y$$
(6.1)

Con las funciones de interpolación evaluadas en los puntos (x_i, y_i) se obtiene la expresión (6.2), y los valores de las funciones Nodales N_i , (6.3), con las variables auxiliares a, b, c y d, junto con el denominador Δ (Nikishkov, 2004).

$$u(x_{i}, y_{i}) = u_{i}, \quad i = 1, 2, 3$$

$$v(x_{i}, y_{i}) = v_{i}, \quad i = 1, 2, 3$$

$$N_{i} = (a_{i} + b_{i}x + c_{i}y)/(2\Delta)$$

$$a_{i} = x_{i+1}y_{i+2} - x_{i+2}y_{i+1}$$

$$b_{i} = y_{i+1} - y_{i+2}$$

$$c_{i} = x_{i+2} - x_{i+1}$$
(6.3)

$$\Delta = (x_2y_3 + x_3y_1 + x_1y_2 - x_2y_1 - x_3y_2 - x_1y_3)/2$$

6.1.2 Grados de libertad (gdl) y número de elementos

FEM discretiza un modelo físico por elementos pequeños, pero de tamaño finito. La física de cada elemento se describe aproximadamente por un número finito de grados de libertad (gdl), a los cuales se asigna un conjunto de ecuaciones características (describiendo propiedades físicas, condiciones de frontera y velocidades impuestas). Este conjunto de ecuaciones se resuelve simultáneamente para predecir el comportamiento del fenómeno en estudio (COMSOL, -). Esta investigación tiene las variables de conductividad eléctrica $\sigma(x, y, t)$, potencial eléctrico $\phi(x, y)$, campo de velocidad u(x, y, t) y v(x, y, t), y campo de presión p(x, y, t), en función de la posición (x, y) y el tiempo (t).

Las tres geometrías diferentes estudiadas tienen diferente número de elementos, *gdl* (entregadas por el software Comsol) y el tiempo de simulación de casos transiente, como se muestra en la Tabla 6.1.

Tabla 6.1. Número de elementos, grados de libertad (*gdl*) y tiempo de simulación para los modelos de Luo (resultado propio), *NS*95 y *XS*3550.

Modelo	# Elementos	Gdl	Tiempo, s
Luo	48.274	411.486	34.500
Quintana (NS95)	34.892	302.977	15.180
Propuesto (XS3550)	44.862	228.488	172.800

El número de elementos triangulares utilizados en cada simulación se obtuvo con un análisis previo de sensibilidad de malla (convergencia) y simulaciones de optimización en el tiempo de cálculo. Los *gdl* se optimizaron en la simulación de Comsol utilizando el tiempo real de cálculo.

Por ejemplo, en el caso del modelo de Luo (resultado propio), en la Figura 6.2, se muestra la sensibilidad de malla al utilizar 4 mallas en una simulación estacionario de EKF,

considerando las mallas 1, 2, 3 y 4 de 3.170 elementos (28.768 *gdl*), 11.894 elementos (10.4740 *gdl*), 48.274 elementos (411.486 *gdl*) y 190.020 elementos (162.9719 *gdl*), respectivamente. La tolerancia en cada simulación es 10^{-7} , por ello sólo la malla 1 realizó 9 iteraciones, ya que las mallas 2, 3 y 4 alcanzaron la cota de error en 8 iteraciones.

Para la optimización del tiempo, Figura 6.3, se usaron las mismas mallas evaluando el tiempo que se demoró el problema en calcular el estudio estacionario.

Entonces, de acuerdo con el resultado entregado por la malla 3 con 48.274 elementos y 411.486 *gdl* equivalente a un tamaño máximo de elemento igual a 2,5 μm (usado en el número de *Peclet* posteriormente), se logró tener un error menor que la cota de 10^{-7} y su tiempo de simulación fue 100 (*s*) en un estudio estacionario, el cual es aceptable considerando que el tiempo en el caso transiente será mayor como se aprecia en la Tabla 6.1.



Figura 6.2. Sensibilidad de malla con el caso de Luo (resultado propio) entre el error cometido en la simulación y las iteraciones realizadas, según 4 mallas diferentes.



Figura 6.3. Optimización del tiempo de simulación según 4 mallas con diferente número de elementos.

Los micromezcladores se estudiaron según tres tipos de microcanal cruzado, donde cada uno tiene una distribución de elemento de malla estructurada, la cual es generada en Comsol. Las distribuciones de elementos se diferencian por tener 48.274 elementos el modelo de Luo (resultado propio) Figura 6.4, 34.892 elementos el modelo del microcanal *NS*95 Figura 6.5, y 44.862 elementos el modelo del microcanal *XS*3550 Figura 6.6.



Figura 6.4. Malla del modelo del microcanal de Luo (resultado propio) con 48.274 elementos.



Figura 6.5. Malla del modelo del microcanal NS95 con 34.892 elementos.



Figura 6.6. Malla del modelo de microcanal XS3550 con 44.862 elementos.

6.1.3 Solución del sistema algebraico con MUMPS

El algoritmo de solución MUMPS (*Multifrontal Massively Parallel Sparse*) funciona en sistemas generales de la forma Ax = b. Este procedimiento utiliza a su vez varios algoritmos de ordenamiento para permutar las columnas y de ese modo minimizar el uso de valores ceros en la matriz *A*, lo cual lo convierte en un optimizador del tiempo de cálculo (COMSOL, -).

6.1.4 Estabilización numérica en estudios dependientes del tiempo

La estabilidad numérica es la propagación del error en el algoritmo que se utiliza. Esta propagación de error o estabilidad numérica se logra controlar en Comsol según el análisis de la ecuación adimensional de convección-difusión temporal (6.4) (La expresión usada

en la sección 3.3.1 Concentración de especie iónica y perfil de conductividad eléctrica es la misma en su forma adimensional).

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \beta \cdot \nabla u = \frac{1}{Pe} \nabla \cdot (c \nabla u) + F$$
(6.4)

Donde se define el vector de velocidad β , el coeficiente de difusión c, el escalar transportado u, el número de *Peclet Pe* y el término fuente F.

Al discretizar (6.4) utilizando el método de elementos finitos, el problema numérico se vuelve inestable o gran propagación del error para un número de *Peclet (Pe)* mucho mayor que uno, (6.5), donde h es el tamaño máximo del elemento de malla (Zienkiewicz, et al., 2005).

$$Pe = \frac{\|\beta\|h}{2c} \tag{6.5}$$

El número de *Peclet* (6.5) es una relación de los efectos convectivos en comparación con los efectos difusivos, es decir, un número de *Peclet* alto indica que los efectos convectivos dominan sobre los efectos difusivos.

Después de resolver los modelos de Luo (resultado propio), *NS*95 y *XS*3550, se obtuvo que las velocidades medias $||\beta||$ son 15.3, 38.3 y 50 *mm/s*. Los tamaños máximos de elementos (*h*) son 2.5, 0.5 y 3 μ *m*, respectivamente. Considerando el coeficiente de difusión efectiva (*c*) 2 × 10⁻⁹ *m*²/*s* del *KCl*, los números de *Peclet* para el caso de Luo (resultado propio), *NS*95 y *XS*3550 son 9.56, 4.78 y 37.5, respectivamente.

Así, si bien *Pe* es mayor que 1 en los 3 microcanales, no es lo suficiente para que no se cumpla $Pe \gg 1$ y se asegura la estabilidad numérica en cada simulación.

6.1.5 Procedimiento de simulación

Para comprender el proceso de simulación numérica de EKF mediante *Comsol*, es necesario entender previamente cuál es el potencial de referencia en las simulaciones. El potencial eléctrico de referencia (ϕ_{ref}) se obtiene de la expresión (6.6), con el campo eléctrico externo (E_a), ecuación (3.21) descrita en la subsección 3.3.4.

$$E_a = \frac{\phi_{ref} - \phi_E}{L_S + L_E} \to \phi_{ref} = E_a \cdot (L_S + L_E) + \phi_E \tag{6.6}$$

El proceso de simulación se lleva a cabo en dos pasos. La primera etapa es realizar un estudio estacionario con una pequeña variación del ϕ_{ref} en los potenciales eléctrico del Norte (ϕ_n) y Sur (ϕ_s) para promover un estado en desequilibrio.

Luego, la segunda etapa del proceso de simulación es realizar un estudio transiente con los potenciales eléctricos de referencia en cada reservorio, utilizando como condición inicial el estado en desequilibrio del estado estacionario obtenido anteriormente.

Al terminar las dos etapas del proceso de simulación, es posible observar, dependiendo del caso, las estabilidades o inestabilidades en el flujo electrocinético en el micromezclador según resultados numéricos con el software Comsol.

6.2 Validación de los resultados numéricos

Para validar la simulación de EKF se comparan los resultados obtenidos por Luo (Luo, 2009) con los resultados numéricos para una configuración cruzada de un microcanal de altura $h = 60 \ \mu m$, donde los parámetros característicos en el estudio dependiente del tiempo son la relación de conductividad $\gamma = 3.5$, potencial $\zeta = -75 \ mV$ y campo eléctrico aplicado $E_a = 778 \ V/cm$. Asumiendo estos valores para las simulaciones, los resultados muestran una comparación entre el modelo de Luo (Luo, 2009) y el estudio actual a los 7 y 100 (*ms*).

Las Figuras 6.7 y 6.8 muestran una comparación de la conductividad eléctrica normalizada σ^* , (6.7), utilizando la alta conductividad σ_H , la baja conductividad σ_L y la conductividad puntual σ . La comparación se muestra en dos instantes diferentes, a 7 *ms* cuando comienza la inestabilidad electrocinética (EKI), Figura 6.7, y a 100 *ms* cuando EKI está desarrollada, Figura 6.8.



Figura 6.7. Comparación de conductividad eléctrica normalizada (adimensional) con conductividad alta (roja) y baja (azul) a 7 *ms*. Las Figuras corresponden a los resultados numéricos de (a) Luo (Luo, 2009) y (b) estudio actual.

En este primer caso de comparación cuando la inestabilidad está comenzando se observa que, en el centro del microcanal se asemeja la garganta de la conductividad alta (en rojo) entre ambos resultados, más el desdoblamiento de la garganta al comienzo del canal Este.



36

Figura 6.8. Comparación de conductividad eléctrica normalizada (adimensional) con conductividad alta (roja) y baja (azul) a 100 *ms*. Las Figuras corresponden a los resultados numéricos de (a) Luo (Luo, 2009) y (b) estudio actual.

Consecuentemente en el caso cuando EKI ya se ha desarrollado en el microcanal, Figura 6.8, se logra apreciar que el flujo desordenado se da lugar en ambos resultados numéricos, donde se observa en el canal Este que hay posiciones sólo con conductividad eléctrica (en azul) y mezcla entre ambas soluciones (en color amarillo y celeste).

Asimismo, la validación numérica comprende la comparación de la velocidad entre el estudio de Luo (Luo, 2009) y el obtenido en este trabajo. La Figura 6.9 presenta la velocidad axial a 25 *ms* por Luo (Luo, 2009) y la obtenida mediante simulación con Comsol, evaluada a 50 μm en el canal Este. La comparación permite la validación de la implementación numérica que se utilizará en los casos posteriores.



Figura 6.9. Velocidad axial U(mm/s) para el microcanal de Luo (Luo, 2009) y estudio actual, evaluado en el canal Este (línea segmentada) a 25 ms.

En la Figura 6.9, el perfil de velocidad axial tiene un error cuadrático medio de 4,5% en comparación con el perfil de velocidad de Luo (Luo, 2009), por lo tanto, los resultados

obtenidos en la conductividad eléctrica normalizada y la velocidad axial obtenidos mediante Comsol son validados.

6.3 Perfil de potencial eléctrico

El potencial eléctrico, según los campos eléctricos que se indican, corresponde a los micromezcladores que presentan inestabilidad electrocinéticas en el flujo (EKI) para las simulaciones numéricas de los modelos de Luo (resultado propio) en la Figura 6.10, *NS*95 en la Figura 6.11 y *XS*3550 en la Figura 6.12, mostrando el potencial electro en el dominio completo, donde la unidad del potencial eléctrico (ϕ) es volts (*V*).



Figura 6.10. Potencial eléctrico (ϕ , V) de la simulación propia en el modelo Luo (resultado propio).

El valor máximo del potencial eléctrico en el microcanal de Luo (resultado propio) fue de 105.03 V en el reservorio Norte, Oeste y Sur, y se observa la disminución del potencial en la dirección del canal Este, puesto que es cero el potencial eléctrico en este reservorio ($\phi_e = 0$), según la condición de contorno.



Figura 6.11. Potencial eléctrico (ϕ , V) de la simulación propia en el modelo NS95.

De forma similar, el NS95 y XS3550, tienen el potencial eléctrico máximo en los reservorios Norte, Sur y Oeste equivalente a 35.64 V y 195 V, respectivamente, con potencial eléctrico cero en el canal Este.

Esos valores de voltaje máximo en cada reservorio indican que es posible obtener EKI a un bajo potencial eléctrico, según las dimensiones entregadas de cada microcanal. Esta observación implica que la efectividad del microcanal se logra obtener mediante la aplicación de un campo eléctrico menor, según sea el caso.



Figura 6.12. Potencial eléctrico (ϕ , *V*) de la simulación propia en el modelo *XS*3550.

El campo eléctrico aplicado (E_a), (3.21), para los microcanales Luo (resultado propio), NS95 y XS3550 fue 778, 1620 y 1500 V/cm, respectivamente y cada dispositivo tiene un bajo potencial eléctrico para mover el electrolito, por lo tanto, eventualmente se podría generar EKF con un batería común en una diseño a futuro del Lab – on – a – Chip.

6.4 Perfil de velocidad

El perfil de velocidad que se muestra en esta sección es la magnitud de la velocidad en los microcanales $\|\vec{u}\|$, esto es, la velocidad promedio entre la axial u y la velocidad normal v (mm/s).

Los resultados de la simulación en la parte hidrodinámica, se tiene la velocidad promedio (magnitud) de cada microcanal para los instantes indicados. En la Figura 6.13 se muestra para el modelo de Luo (resultado propio), en la Figura 6.14 para el modelo del microcanal *NS*95 y en la Figura 6.15 para el modelo del microcanal *XS*3550.

El resultado interesante de esta sección es el orden de velocidad máxima alcanzada en los micromezcladores y el lugar donde se alcanzan estas magnitudes en el microcanal, ya que al menos se logra estimar numéricamente la velocidad con la que se mueve el fluido dentro del microcanal. En la configuración de Luo, el promedio de velocidad máxima fue de 15.3 mm/s entre los tiempos 0, 25, 500 y 1000 ms.



Figura 6.13. Resultado numérico de la velocidad promedio ($\|\vec{u}\|, mm/s$) del modelo Luo. Tiempos (a) 0, (b) 25, (c) 500 y (d) 1000 ms.

Para el modelo del NS95, el promedio de las velocidades máximas fue de 38.3 mm/s, el cual fue estimado como promedio entre los tiempos 0, 7.2, 37.4 y 50 ms. Este valor de la velocidad da cuenta que sigue el orden de magnitud que el modelo anterior.



Figura 6.14. Resultado numérico de la velocidad promedio ($\|\vec{u}\|, mm/s$) del modelo *NS*95. (a) 0, (b) 7.2, (c) 37.4 y (d) 50 *ms*.

Para el modelo XS3550, el promedio de la velocidad máxima fue de 50 mm/s, entre los tiempos 0, 1.2, 39.4 y 100 ms, el cual presenta la velocidad más alta entre los 3 micromezcladores.





Figura 6.15. Resultado numérico de la velocidad promedio ($\|\vec{u}\|, mm/s$) del modelo *XS*3550. Tiempo (a) 0, (b) 1.2, (c) 39.4 y (d) 100 ms.

Los diferentes tiempos en los cuales se han indicado para cada modelo de microcanal obedecen a la regla de comparar los tiempos para velocidad y el gradiente de conductividad eléctrica en el mismo micromezclador.

6.5 Gradiente de conductividad eléctrica

En la descripción numérica de inestabilidad electrocinética (EKI) se tienen altos gradientes de conductividad eléctrica entre soluciones electrolíticas, los cuales se manifiestan en la parte central del microcanal cruzado.

Este comportamiento del gradiente de conductividad se visualiza en términos de la conductividad normalizada σ^* (6.7), donde los valores oscilan entre 0 y 1. El valor 1 (rojo) es equivalente a la conductividad alta (σ_H) y el valor 0 (azul) es la conductividad baja (σ_L). Esta visualización permite comparar con la intensidad de píxel de las imágenes experimentales, que se mostrarán posteriormente en el mismo rango.

Para el caso del microcanal de Luo, Figura 6.16, en la simulación se observan los altos gradientes de conductividad eléctrica que producen en el flujo inestable (EKI) desde los 25 *ms* con una marcada inestabilidad y mezcla entre la baja y alta conductividad eléctrica.



Figura 6.16. Conductividad normalizada (σ^*) del modelo Luo entre (a) 0, (b) 25, (c) 500 y (d) 1000 ms.

En el mismo sentido, para el caso del microcanal *NS*95, Figura 6.17, se muestra un flujo inestable a los 6.7 *ms*, el cual se compara posteriormente con resultados experimentales propuestos por Quintana (Quintana, 2012).

En los 4 tiempos seleccionados para conocer el gradiente de conductividad eléctrica se observa que la conductividad eléctrica luego de los 6.7 *ms* en el canal Este se presenta de baja conductividad eléctrica (en azul) y conductividad eléctrica mezclada del orden de 0.4 (en celeste) lo cual indica que la inestabilidad promueve mayor mezcla entre ambos fluidos.





Figura 6.17. Conductividad normalizada (σ^*) del modelo *NS*95 entre (a) 0, (b) 6.7, (c) 37.4 y (d) 50 *ms*.

Finalmente, el caso del microcanal *XS*3550 (Figura 6.18) obtenido para comparar con los propios experimentos llevados a cabo en el laboratorio de *Microfluidics*, donde a 1.2 *ms* se observa que hay inestabilidad electrocinética en el micromezclador.



Figura 6.18. Conductividad normalizada (σ^*) del modelo XS3550 entre (a) 0, (b) 1.2, (c) 39.4 y (d) 100 ms.

6.6 Resultados experimentales

Los resultados experimentales realizados en el microcanal XS3550 son para tres campos eléctricos diferentes $E_a = 500$, 1000 y 1500 V/cm, con una relación de conductividad $\gamma = 21$, con una conductividad eléctrica baja $\sigma_L = 17 (\mu S/cm)$ y alta $\sigma_H = 1262 (\mu S/cm)$.

La Figura 6.19 muestra el comportamiento del flujo en los experimentos de EKF, donde el color blanco corresponde a la conductividad alta (σ_H) y el color negro a la conductividad baja (σ_L) dentro del microcanal.



Figura 6.19. Experimentos de EKF en el microcanal XS3550, según campo eléctricos de (a) 500, (b) 1000 y (c) 1500 V/cm.

Se debe destacar que a 500 V/cm se observa un flujo estable, a 1000 V/cm el flujo no presenta diferencias, pero a 1500 V/cm se observa la inestabilidad electrocinética, pudiendo ser comparada con resultados numéricos obtenidos mediante Comsol.

Además, una importante observación es que, para el microcanal *NS*95 ($h = 10 \ \mu m$), un campo eléctrico $E_a = 1620 \ V/cm$ genera inestabilidades con una razón de conductividad $\gamma = 18$ reportado por Quintana (Quintana, 2012), sin embargo usando el microcanal *XS*3550 ($h = 50 \ \mu m$) con una razón de conductividad similar $\gamma = 21$, se descubrió que a 1500 V/cm se obtiene EKI, es decir, a un menor campo eléctrico se obtuvo un régimen inestable en un microcanal cruzado. Esta aseveración respaldada por resultados numéricos y experimentales implica que es posible obtener EKI a un menor campo eléctrico.

6.7 Comparación de estudios usando el índice de mezclado

Otra parte de este estudio es comparar los experimentos con la predicción numérica. Estas comparaciones son entre los microcanales *NS*95 y *XS*3550 considerando el perfil de conductividad eléctrica en el canal Este y el índice de mezclado (*CoV*).

El comportamiento del flujo en el microcanal *NS*95 se muestra en la Figura 6.20 al evaluar la intensidad del pixel (experimento, círculos azules) y la conductividad normalizada (simulación, línea negra). Esta comparación se realizó en el canal Este a $h = 10 \ \mu m$ del centro, denotada por una línea negra vertical segmentada en el micromezclador.



Figura 6.20. Conductividad normalizada (línea negra) y la intensidad de pixel (círculos azules) en el microcanal NS95 a 10 μm del centro.

La misma comparación anterior se realiza en el microcanal *XS*3550, Figura 6.21. La curva del experimento (estrellas azules) se compara con la conductividad eléctrica normalizada (línea negra).



Figura 6.21. Conductividad normalizada (línea negra) y la intensidad de pixel (círculos azules) en el microcanal XS3550 a 50 μm del centro.

En resumen de la comparación de conductividades eléctrica, el microcanal *NS*95 se comparó entre la imagen experimental de Quintana (Quintana, 2012) con la simulación numérica a 6.7 *ms*, Figura 6.20, y el microcanal *XS*3550 se comparó entre el resultado experimental y la simulación numérica a 1.2 *ms* presentados en la Figura 6.21.

Por otro lado, el micromezclador será efectivo en la medida que cumpla su función de que, a la salida, o en el proceso de mezcla sea uniforme la conductividad eléctrica al tener un índice (*CoV*) igual o menor al 5% para aplicaciones industriales en micromezcladores (Lu, et al., 2002).

Los resultados del *CoV* en el microcanal *NS*95, Figura 6.22, son evaluado en $y = 10, 20, 30, 40 \ \mu m$ en el canal Este, usando las ecuaciones del índice numérico CoV_n (5.1) e índice experimental CoV_e (5.2). Así, los índices son $CoV_n = 1.494$ (numérico) y $CoV_e =$

2.01 (experimento) en $y = 10 \ \mu m$, y disminuye a $CoV_n = 0.199$ (numérico) en contraste con $CoV_e = 1.38$ (experimento) en $y = 40 \ \mu m$.

Si bien en $y = 40 \ \mu m$ existe la mayor diferencia entre los índices experimental y numérico, es posible apreciar que ambos indican la misma tendencia de disminuir aguas abajo del canal Este, lo cual es favorable en el proceso de mezcla.



Figura 6.22. El (*CoV*) en el resultado experimental y numérico para el microcanal *NS*95. La conductividad eléctrica se evaluó en el resultado experimental de Quintana (Quintana, 2012) y numérico a 6.7 *ms* en 10, 20, 30 y 40 μ *m* en el canal Este.

Asimismo, el índice de mezcla experimental (CoV_e) para el microcanal XS3550 se compara con el índice de mezcla numérico (CoV_n) de la simulación a 1.1 ms en la zona central y aguas abajo por el canal Este, según la Figura 6.23, evaluados en $y = 50, 75, 100 \text{ y} 125 \mu m$.



Figura 6.23. El índice experimental (CoV_e) y numérico (CoV_n) para el microcanal XS3550. La conductividad eléctrica se evaluó en resultados experimentales y numérico a 50, 75, 100 y 125 μm en el canal este.

La Figura 6.23 muestra que la tendencia del índice de mezcla es similar entre el experimental (CoV_e) y numérico (CoV_n), salvo en la posición $x = 75 \ \mu m$, ya que los valores difieren de 1.598 (experimental) a 0.258 (numérico).

Adicionalmente, el CoV_n para $E_a = 1500 V/cm$ en los tiempos 6 (círculos), 20 (cuadrado) y 34 *ms* (triángulos) se evalúa entre 50 y 300 μm en el eje x del microcanal, como se muestra en la Figura 6.24.



Figura 6.24. La comparación del *CoV* numérico en el microcanal *XS*3550 a 6, 10 y 34 *ms*. El *CoV_n* se evaluó entre 50 y 300 μ m con 25 μ m de paso a lo largo del canal Este.

El resultado del índice de mezclado, muestra que en la posición $x = 75 \ \mu m$, los índices fueron $CoV_n = 1.46$ a 6 ms, $CoV_n = 0.46$ a 20 ms y $CoV_n = 0.19$ a 34 ms, y a su vez, en la posición $x = 275 \ \mu m$ los resultados fueron $CoV_n = 0.26$, $CoV_n = 0.15$ y $CoV_n =$ 0.11 para los mismos tiempos. Estas dos evaluaciones, indican que la tendencia nuevamente es a disminuir, según el tiempo que esté el proceso de mezcla y la longitud que se considere del canal Este, lo que concluye un efectivo proceso de mezclado en el tiempo y aguas abajo en el canal Este.

6.8 Número de Rayleigh Eléctrico

Los casos numéricos y experimentales en este estudio se utilizan para obtener el número de Rayleigh eléctrico (Ra_e) en los microcanales NS95 y XS3550, al caracterizar valores

de estabilidad electrocinética (EKS) e inestabilidad electrocinética (EKI), y para estimar los tipos de régimen en futuros experimentos o simulaciones.

Para calcular el Ra_e , se presentan los siguientes pasos. Primero, obtener el espesor de difusión, δ , y el ancho medio de la garganta, \tilde{h} , como se muestra en la Tabla 6.2 para el microcanal *NS*95 y la Tabla 6.3 para el microcanal *XS*3550.

Tabla 6.2. Valores del espesor de difusión δ y el ancho medio de la garganta \tilde{h} en el microcanal *NS*95, según resultados experimentales y numéricos para flujos electrocinéticos estables (EKS) e inestables (EKI).

	EKS, $E_a = 78$	83 V/cm	EKI, $E_a = 1620 V/cm$		
	Experimento	Numérico	Experimento	Numérico	
ĥ, μm	1.90	2.13	2.00	2.28	
δ,μт	0.67	1.19	1.17	1.30	

Tabla 6.3. Valores del espesor de difusión, δ , y el ancho medio de la garganta, \tilde{h} en el microcanal *XS*3550, según resultados experimentales y numéricos para flujos electrocinéticos estables (EKS) e inestables (EKI).

	EKS, $E_a = 50$	00 V/cm	EKI, $E_a = 1500 V/cm$		
	Experimento	Numérico	Experimento	Numérico	
ĥ, μm	16.94	12.22	17.24	16.07	
δ,μm	9.68	9.26	5.52	5.36	

Una vez que se obtienen el δ y \tilde{h} , el Ra_e se determina con la permitividad ε , campo eléctrico aplicado E_a , la profundidad del microcanal d, la difusión efectiva D_{eff} del *KCl*, la viscosidad absoluta μ y la relación de conductividad γ , ecuación (3.22).

Los resultados para la estabilidad (EKS) son $Ra_e = 281$ para el microcanal *NS*95 y $Ra_e = 186$ para el microcanal *XS*3550, así como la inestabilidad (EKI) son $Ra_e = 1161$ para el microcanal *NS*95 y $Ra_e = 2660$ para el microcanal *XS*3550.

Luego, al realizar una variación de Ra_e en el microcanal *NS*95 de 281, 500, 750, 1000 y 1161, se presentan en la Tabla 6.4 los resultados del tipo de régimen. Donde se sabe que $Ra_e = 281$ es régimen estable (EKS) y $Ra_e = 1161$ es régimen inestable (EKI), ambas obtenidas a través de forma experimental y numérica.

Tabla 6.4. Variación del Ra_e de 281 (EKS) a 1161 (EKI) asociado a un campo eléctrico aplicado (E_a), para identificar los tipos de régimen en el microcanal *NS*95.

Ra _e	$E_a, V/cm$	Régimen
281	783	EKS
500	1032	EKS
750	1264	EKS
1000	1450	EKS
1161	1620	EKI

Para el microcanal XS3550, la variación del Ra_e fue 186, 1200, 1700, 2200 y 2660, que se muestran los resultados numéricos en la Tabla 6.5, donde EKS y EKI se obtuvieron en 186 y 2660, respectivamente.

Tabla 6.5. Variación del Ra_e de 186 (EKS) a 2660 (EKI) asociado a un campo eléctrico aplicado (E_a), para identificar los tipos de régimen en el microcanal XS3550.

ſ	Ra _e	$E_a, V/cm$	Régimen
	186	500	EKS
	1200	780	EKI
	1700	1032	EKI
	2200	1234	EKI
	2660	1500	EKI

Los resultados de los diferentes casos del Ra_e mostrados en las Tablas 6.4 y 6.5 mostraron que la inestabilidad electrocinética en microcanales cruzados se produce al $Ra_e = 1161$, porque a valores más bajos en el microcanal NS95 y XS3550 era estable, y para valores más altos se obtiene siempre un régimen inestable en los microcanales. A su vez, al considerar la relación del índice de mezcla (*CoV*) en función del número Ra_e en el flujo estable e inestable, se obtiene la Figura 6.25, donde el coeficiente de variación promedio (*CoV*) se observa en 4 posiciones en el eje y = h, 2h, 3h y 4h entre los microcanales *NS*95 ($h = 10\mu m$) y *XS*3550 ($h = 50 \mu m$).

La Figura 6.25 muestra el aumento del *CoV* exclusivamente en el microcanal *NS*95 debido a que si el número Ra_e aumenta, también aumenta el *CoV*. La evaluación del *CoV*_e experimental es 1.23 ($Ra_e = 281$) y 1.64 ($Ra_e = 1161$), y el índice numérico *CoV*_n es 0.21 ($Ra_e = 281$) y 1.23 ($Ra_e = 1161$).

El microcanal XS3550 tiene un comportamiento diferente en el índice de mezcla según el Ra_e , debido a que el índice experimental (CoV_e) es aproximadamente constante de 0.24 ($Ra_e = 186$) a 0.31 ($Ra_e = 2660$), y el índice numérico (CoV_n) disminuye de 3.58 ($Ra_e = 186$) a 2.93 ($Ra_e = 2660$), lo cual comprueba la idea que la inestabilidad promueve mayor mezclado en el microcanal cruzado.



Figura 6.25. El promedio \overline{CoV} para los microcanales NS95 y XS3550 evaluados en x = h, 2h, 3h, 4h, considerando los resultados experimentales y numéricos en régimen estable ($Ra_e = 186, 281$) e inestable ($Ra_e = 1161, 2660$).

La influencia del tipo de régimen de EKF se muestran en la Figura 6.26, que representa el índice numérico CoV_n en función el Ra_e en los microcanales NS95 y XS3550, los cuales para tener las mismas condiciones, se evaluaron en el mismo tiempo (t = 20 ms) y en la misma posición (x = 2.5h).



Figura 6.26. El índice de mezcla numérico (CoV_n) en diferentes Ra_e de los microcanales NS95 y XS3550, en régimen estable ($Ra_e = 186, 281, 500, 750, 1000$) e inestable ($Ra_e = 1161, 1200, 1700, 2200, 2660$).

Finalmente, se encontró que el microcanal XS3550 tiene el máximo $CoV_n = 3.22$ a un $Ra_e = 1200$ y mínimo $CoV_n = 0.16$ a un $Ra_e = 1700$, y el microcanal NS95 tiene un máximo $CoV_n = 0.33$ a un $Ra_e = 1161$ y mínimo $CoV_n = 0.08$ a un $Ra_e = 281$.

7 CONCLUSIONES

El flujo electrocinético (EKF) en microcanales en forma de cruz fue investigado al realizar experimentos y simulaciones numéricas en sistemas denominados micromezcladores. Se logró obtener dos tipos de régimen que caracterizan el comportamiento de EKF, el régimen estable de flujo electrocinético (EKS) y el régimen inestable de flujo electrocinético (EKS) y el régimen inestable de flujo electrocinético (EKI). Este segundo régimen, se tuvo presente en todos los análisis, ya que se postuló que, al tener inestabilidad en un micromezclador, el proceso de mezclado será efectivo logrando menor valor en el índice de mezclado (*CoV*).

7.1 Conclusiones generales

Se logró simular la inestabilidad electrocinética (EKI) con éxito mediante el software Comsol Multiphysics en 3 microcanales diferentes en forma de cruz, incluidos el microcanal de Luo (resultado propio), *NS*95 y *XS*3550. Además, fue posible reproducir el fenómeno EKI experimentalmente en el microcanal *XS*3550, donde se reprodujo un régimen estable e inestable en condiciones de flujo laminar (a bajas velocidades).

En primer lugar, se debe mencionar que estos resultados de simulaciones numéricas permiten establecer una metodología para simulaciones de EKF, ya que el foco de interés fue la transición del régimen estable al inestable.

El grupo de simulación para la validación se encontró que cualitativamente el perfil normalizado de conductividad eléctrica entregado por Comsol se comportaba igual al de Luo (Luo, 2009), según se comparó a 7 y 100 *ms*. Además, se comparó cuantitativamente la velocidad axial a 25 *ms* entre ambas simulaciones, al encontrar un error cuadrático medio de 4,5% en un microcanal cruzado $h = 60 \ \mu m$ (microcanal de Luo), con lo cual se verificó que la herramienta numérica servía para ser comparada con casos experimentales como siguiente paso.
En cuanto al uso de modelos de los microcanales NS95 ($h = 10 \ \mu m$) y XS3550 ($h = 50 \ \mu m$), se encontró que el potencial eléctrico tiene un comportamiento decreciente hacia el reservorio Este ($\phi_E = 0$), que las máximas velocidades se observaron en el centro del microcanal hacia abajo y que el alto gradiente de conductividad eléctrica ocurre rápidamente iniciado el proceso de mezclado, al considerar los 6.7 *ms* en el microcanal *NS*95 y 1.2 *ms* en el microcanal *XS*3550.

Del mismo modo, los experimentos que se realizaron en el microcanal XS3550 dieron lugar a la observación de EKS a 500 y a 1000 V/cm, y a la observación del EKI a 1500 V/cm, según se muestra en la Figura 6.19. Estos experimentos se usaron para comparar el perfil de conductividad en una sección del canal Este, al establecer el índice de mezclado *CoV*, y definir el *Ra_e* según cada régimen de EKF.

Lo más importante de la sección experimental de este trabajo, es que se logró obtener EKI a un menor campo eléctrico que lo reportado por Quintana (Quintana, 2012) de 1620 V/cm se logró bajar a 1500 V/cm, y que fue posible simular numéricamente y comparar bajo las mismas condiciones de operación que en el experimento.

Finalmente, se hace mención que las hipótesis planteadas en este trabajo fueron demostradas verdaderas tanto para simular el EKF con simulaciones computacionales en un estudio transiente, y que la inestabilidad electrocinética (EKI) favorece el proceso de mezclado según el índice de mezclado (*CoV*).

7.2 Líneas futuras de trabajo

Las líneas futuras para EKF en el área de Microfluidics son propuestas a continuación:

Considerar variable el potencial ζ en la velocidad Electro-osmótica \vec{u}_{EOF} usando una función lineal o logarítmica en las condiciones de deslizamiento, según la concentración y el *pH* de la solución electrolítica.

- Considerar en el dominio computacional, la doble capa eléctrica (EDL) al estar relacionados la densidad de carga y el potencial ζ.
- Investigar más geometrías de microcanales que favorezcan el proceso de mezclado, como formas en T o Y, aperturas o estrechamiento en el canal de salida (Este) y configuración en estrella.
- Estudiar la influencia de la superficie del microcanal sobre la solución electrolítica con simulaciones computacionales, al considerar el efecto electroquímico de la pared y el efecto joule por el proceso electro térmico (Ver Calibración y mediciones con el generador HVS448, en el nivel de potencia eléctrica suministrada P = VI).
- → Utilizar más relaciones de conductividad en el norte (γ_N) y en el oeste (γ_W), y diferentes campos eléctricos entre los reservorios $\left(\beta_N = \frac{\phi_N E_a}{L_N + L_E}, \beta_W = \frac{\phi_W E_a}{L_W + L_E}\right)$, es decir, un estudio de parametrización de variables.
- Utilizar más equipos experimentales para cuantificar el flujo. Por ejemplo, usar técnicas de detección de partículas o mediciones de velocidades.
- Construir un prototipo con todos los componentes para analizar muestras líquidas, incluyendo microcanal, batería, sistema de succión para limpieza e interfaz de resultados.

BIBLIOGRAFÍA

Almutairi, A. Z., Glawdel, T., Ren, L. C. & Johnson, A. D., 2009. A Y-channel design for improving zeta potential and surface conductivity measurements using the current monitoring method. *Microfluid Nanofluid*, Volumen 6, p. 241–251.

Bathe, K.-J., 2016. Finite Element Procedures. Watertown, MA : s.n.

Chaparro, H., 2012. *Caracterización experimental de inestabilidades electrocinéticas para flujo electroosmótico en micro-canal convergente-divergente*. Universidad de Santiago de Chile, Santiago, Chile.: Tesis de maestría inédita.

Chen, C., 2011. *Electrokinetics and Electrohydrodynamics in microsystems, Chapter 6. University of Seville, Spain.* s.l.:s.n.

Chen, C., Lin, H., Lele, S. & Santiago, J., 2005. Convective and absolute electrokinetic instability with conductivity gradients. *J. Fluid Mech.*, Volumen 524, p. 263–303.

Clinton-Bailey, G. y otros, 2017. A Lab-on-Chip Analyzer for in Situ Measurement of Soluble Reactive Phosphate: Improved Phosphate Blue Assay and Application to Fluvial Monitoring. *ENVIRONMENTAL SCIENCE & TECHNOLOGY*, pp. 9989-9995, vol 51.

COMSOL, -. Comsol Reference Manual. s.l.:s.n.

Demekhin, E., Nikitin, N. & Shelistov, V., 2013. Direct numerical simulation of electrokinetic instability and transition to chaotic motion. *Physics of Fluids*, Volumen 25.

Devasenathipathy, S. & Santiago, J., 2005. *Microscale Diagnostic technique*. Chapter 3. Electrokinetic Flow Diagnostics: s.n.

Foan, L. y otros, 2018. Development of a new phase for lab-on-a-chip extraction of polycyclic aromatic hydrocarbons from water. *SENSORS AND ACTUATORS B-CHEMICAL*, Volumen 255, pp. 1039-1047.

Ghosal, S., 2010. Mathematical Modeling of Electrokinetic Effects in Micro and Nano Fluidics. *Microfluidics and Microfabrication*, p. Chapter 2..

Hlushkou, D., Kandhai, D. & Tallarek, U., 2004. Coupled lattice-Boltzmann and finitedifference simulation of electroosmosis in microfluidic channels. *International Journal For Numerical Methods in Fluids*, Volumen 46, p. 507–532.

Hsua, W., Daigujib, H. & Dunstana, D., 2016. Electrokinetics of the silica and aqueous electrolyte solution interface: Viscoelectric effects. *Advances in Colloid and Interface Science*, Volumen 234, p. 108–131.

Huang, M. y otros, 2006. Application of electrokinetic instability flow for enhanced. *Biomed Microdevices*, Volumen 8, pp. 309-315.

Hyoung, K., Park, J., Kang, I. & Huh, K., 2006. Initial growth of electrohydrodynamic instability of two-layered. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Volumen 49, p. 4577–4583.

Jain, M. & Nandakumar, K., 2013. Optimal patterning of heterogeneous surface charge for improved electrokinetic micromixing. *Computers and Chemical Engineering*, Volumen 49, pp. 18-24.

Kim, M., Beskok, A. & Kihm, K., 2002. Electro-osmosis-driven micro-channel flows: A comparative study of microscopic particle image velocimetry measurements and numerical simulations. *Experiments in Fluids*, Volumen 33, p. 170–180.

Kim, M. J., Beskok, A. & Kihm, K. D., 2002. Electro-osmosis-driven micro-channel flows: A comparative study of microscopic particle image velocimetry measurements and numerical simulations. *Experiments in Fluids 33 170–180*.

Kirby, B. & Hasselbrink, E., 2004. Zeta potential of microfluidic substrates: 2. Data for polymers. *Electrophoresis*, Volumen 25, p. 203–213.

Li, D., 2004. Electrokinetics in Microfluidics. s.l.:Vol 2, pp 10..

Lin, H., Storey, B. & Santiago, J. G., 2008. A Depth-Averaged Electrokinetic Flow Model for. *J. Fluid Mech.*, Volumen 608, p. 43–70.

Li, Q., Delorme, Y. & Frankel, S., 2016. Parametric numerical study of electrokinetic instability in cross-shaped microchannels. *Microfluid Nanofluid*, p. 20:29.

Lu, L., Suk, K. & Liu, C., 2002. A magnetic microstirrer and array for microfluidic mixing. *Journal of microelectromechanical systems, vol. 11, no. 5.*

Luo, W., 2009. Effect of ionic concentration on electrokinetic instability in a cross-shaped microchannel. *Microfluidics and Nanofluidics Journal*, 6:189–202.

Luo, W., Yarn, K. & Hsu, S., 2007. Analysis of Electrokinetic Mixing Using AC Electric Field and Patchwise Surface Heterogeneities. *Japanese Journal of Applied Physics*, 46(4A), p. 1608–1616.

Maex, R., 2014. Nernst-Planck Equation. *Encyclopedia of Computational Neuroscience*. *New York, USA*.

Morgan, H. & Green, N., 2003. *AC Electrokinetics: Colloids and Nanoparticles*. Baldock, Hertfordshire, England: RESEARCH STUDIES PRESS LTD.

Myers, K., Bakker, A. & Ryan, D., 1997. Avoid Agitation by Selecting Static Mixers. *Chemical Engineering Progress, Vol. 93, No. 6, page 28-38*.

Nernst, W., 1888. Zur Kinetik der in Lösung be findlichen Körper. Zeitschr f Phys Chem 2:613 – 637.

Nguyen, N. & Wereley, S., 2006 . *Fundamentals and Applications of Microfluidics*. 2nd ed, pp 15 ed. Boston y Londres: ARTECH HOUSE, INC.

Nikishkov, G., 2004. *Introduction to the Finite Element Method.* s.l.:Lecture notes. University of Aizu, Aizu-Wakamatsu 965-8580, Japan.

Oddy, M. & Santiago, J., 2005. Multiple-species model for electrokinetic instability. *Phys. Fluids 17, 064108.*

Oddy, M., Santiago, J. G. & Mikkelsen, J. C., 2001. Electrokinetic Instability Micromixing. *Anal. Chem.*, Volumen 73, pp. 5822-5832.

Pan, Y. & Yang, R., 2009. An investigation of the effects of inlet channel geometry on electrokinetic instabilities. *Biomed Microdevices*, Volumen 11, p. 9–16.

Patankar, N. & Hu, H., 1998. Numerical Simulation of Electroosmotic Flow. *Anal. Chem.*, pp. 1870-1881.

Patankar, N. & Hu, H., 1998. Numerical Simulation of Electroosmotic Flow. *Anal. Chem.*, Volumen 70, pp. 1870-1881.

Planck, M., 1890. U ber die Erregung von Elektricität und Wärme in Elektrolyten. *Wied Ann Phys 39:161 – 186*.

Posner, J. & Santiago, J., 2006. Convective instability of electrokinetic flows in a cross-shaped microchannel. *J. Fluid Mech. vol. 555, pp. 1–42.*

Quintana, A., 2012. Experimental characterization of electrokinetic instability frequencies (EKI) in a slotted microchannel plane. (Master thesis). Universidad of Santiago, Chile: s.n.

research, V., 2013. *Phantom high speed*. [En línea] Available at: <u>https://www.phantomhighspeed.com/Blog/how-do-high-speed-cameras-</u> and-camera-sensors-work Reuss, F., 1808. Sur un nouvel effet de l''electricit'e. *Naturalistes de Moscu*, Volumen 2, p. 327:337.

Santos, J. & Storey, B., 2008. Instability of electro-osmotic channel flow with streamwise conductivity gradients. *PHYSICAL REVIEW E*, Volumen 78, p. 046316.

Yang, Y. & Pan, R., 2009. An investigation of the effects of inlet channel geometry on electrokinetic instabilities. *Biomed Microdevices*, Volumen 11, p. 9–16.

Yuan, Q., Islam, N. & Wu, J., 2017. AC electrokinetics based capture of yeast cells from ultra-fast through-flow for sensitive detection. *MICRO & NANO LETTERS*, 12(11), pp. 901-906.

Zeng, S., Chen, C., Mikkelsen, J. & Santiago, J., 2001. Fabrication and characterization of electroosmotic micropumps. *Sensor and actuators B* 79 107-114.

Zienkiewicz, O., Taylor, R. & Nithiarasu, P., 2005. *The Finite Element Method for Fluid Dynamics*. s.l.:Butterworth-Heinemann.

APÉNDICE

A. CALIBRACIÓN Y MEDICIONES CON EL GENERADOR HVS448

Los pasos para la calibración del generador son:

- 1. Apague el HSV448 y desconecte todos los elementos de las salidas de alta tensión.
- 2. Active la conexión usando el dispositivo de 50 Ω .
- 3. Conecte el HSV448 a la computadora y encienda la computadora.
- 4. Ejecute el software "Sequencer". La interfaz del software se muestra en la Figura



Figura A.1. La interfaz del software "Sequencer".

- 5. En el software, ingrese al modo En línea y presione el botón de alta tensión.
- 6. En el software, seleccione la opción Acciones \rightarrow Calibración \rightarrow Recalibrar.

7. Cuando todas las opciones estén listas, elija Acciones \rightarrow Calibración \rightarrow Guardar.

Con la calibración corregida se procede a la medición de la tensión en el canal, donde el resultado fue el potencial eléctrico (*V*) y el amperaje en microamperios (μA). La Figura A.2 muestra la curva de medición del potencial eléctrico y la tiene Figura A.3 muestra el amperaje para un intervalo de 350 *s*.



Figura A.2. Potencial eléctrico de CC con el generador calibrado.



Figura A.3. Corriente del generador calibrado.

En la subsección de estudios numéricos, se explicó el proceder para las simulaciones, donde el primer paso se modificó el voltaje en cada depósito para las condiciones iniciales y el segundo paso se utilizó en el estudio dependiente del tiempo una tensión de referencia para el campo eléctrico necesario.

La base de este procedimiento es la variación en los voltajes que el generador y cualquier equipo de corriente continua, que es constante aproximadamente en el tiempo, pero en el caso real da lugar a pequeñas fluctuaciones como se observa en la medición del canal H para el voltaje más alto que el HVS448 puede entregar, cómo se muestra en la Figura A.4entre 100 y 130 milisegundos, porque el voltaje de referencia es de 3000 V y el valor mínimo y máximo son 2998.37 y 3001.58 V, respectivamente.



Figura A.4. Fluctuaciones del potencial eléctrico en un canal del generador.

B. CÓDIGO EN MATLAB PARA EL ÍNDICE DE MEZCLADO (CoV) EXPERIMENTAL

Se presenta el código para calcular el perfil de conductividad y el CoV utilizado en este estudio para comparar los resultados. El primer código es XS3550.

```
% Imaging treatment for unstable cases
%(Ea = 1500 V/cm) with gamma = 21
clear
clc
% Load the original image of experiment
Inestable=imread('Inestable_imagen.jpg'); % Image of unstable flow
% From 8-bit gray to double-precision rational numbers
Double_I=im2double(Inestable);
% Gray scale conversion
I_gris=rgb2gray(Double_I);
% View image in Matlab
figure(1)
imshow(Inestable)
% Evaluate the pixel position from 123 column unto 491 column for matrix
% with a step equals to 2
[m,n]=size(I_gris);
posx_ini=123; posx_fin=491; muestra=(posx_fin-posx_ini)/2; paso=2;
Pix_E=zeros(m,muestra); Pix_I=zeros(m,muestra);
for i=1:muestra+1
  for j=1:m
     Pix_E(j,i)=E_gris(j,posx_ini); Pix_I(j,i)=I_gris(j,posx_ini);
   end
  posx_ini=posx_ini+2;
end
% Compute the CoV for data
CoV_E=zeros(muestra+1,1);CoV_I=zeros(muestra+1,1);
for i=1:muestra+1
   Sum_E=0.0; Sum_I=0.0; %Values for sum
    I_prom=mean(Pix_I(:,i)); %Unstable average to i column
   for j=1:m
     aux_i=((Pix_I(j,i)-I_prom)/I_prom)^2;
      Sum_I=Sum_I+aux_i;
    end
    % Compute of CoV in percentage
    CoV_E(i,1)=le2*(Sum_E/m)^0.5; CoV_I(i,1)=le2*(Sum_I/m)^0.5;
end
% Plotting the result
figure(3)
y_vector=1:-2/(m-1):-1;
```

```
x_vector=1:2/178:700/178;
plot(x_vector,CoV_E, '+k',x_vector,CoV_I, 'or')
legend('Flujo Estable', 'FlujoK
Inestable', 'Location', 'southwest', 'Orientation', 'horizontal')
xlabel('Distancia x, um', 'FontName', 'Arial', 'FontSize', 14)
ylabel('CoV, %', 'FontName', 'Arial', 'FontSize', 14)
titulo='Coeficiente de Variacion (CoV) entre flujo Inestable';
title(titulo, 'FontName', 'Arial', 'FontSize', 12)
grid on
print('CoV_Inestable', '-djpeg')
```

El segundo código es para el análisis NS95 para calcular el CoV y comparar el perfil de conductividad entre los resultados numéricos y experimentales.

```
%Imaging treatment for stable (Ea = 783 V/cm) and
% unstable (Ea = 1620 V/cm) cases con gamma = 18
clear
clc
% Load the original image of experiment
Estable=imread('Ea_783_Gama_18.jpg'); %Stable flow image
Inestable=imread('Ea_1620_Gama_18.jpg'); %Unstable flow image
% From 8-bit gray to double-precision rational numbers
Double_E=im2double(Estable);
Double_I=im2double(Inestable);
%Gray scale conversion
E_gris=rgb2gray(Double_E);
I_gris=rgb2gray(Double_I);
% View image in Matlab
figure(1)
imshow(E_gris)
figure(2)
imshow(I_gris)
% Evaluate the pixel position from 178 column unto 700 column for matrix
% with a step equals to 2
[m,n]=size(E_gris);
posx_ini=178; posx_fin=700; muestra=(posx_fin-posx_ini)/2; paso=2;
Pix_E=zeros(m,muestra); Pix_I=zeros(m,muestra);
for i=1:muestra+1
   for j=1:m
     Pix_E(j,i)=E_gris(j,posx_ini); Pix_I(j,i)=I_gris(j,posx_ini);
   end
   posx_ini=posx_ini+2;
end
```

```
% Compute the CoV for data
CoV_E=zeros(muestra+1,1);CoV_I=zeros(muestra+1,1);
for i=1:muestra+1
Sum_E=0.0; Sum_I=0.0; %Values for sum
E_prom=mean(Pix_E(:,i)); %Stable average to i column
I_prom=mean(Pix_I(:,i)); %Unstable average to i column
for j=1:m
    aux_e=((Pix_E(j,1)-E_prom)/E_prom)^2;
    aux_i=((Pix_I(j,1)-I_prom)/I_prom)^2;
    Sum_E=Sum_E+aux_e; Sum_I=Sum_I+aux_i;
end
```

```
% Compute of CoV
CoV_E(i,1)=1e2*(Sum_E/m)^0.5; CoV_I(i,1)=1e2*(Sum_I/m)^0.5;
CoV_E(i,1)=1e2*(1-(Sum_E/m)^0.5); CoV_I(i,1)=1e2*(1-(Sum_I/m)^0.5);
end
```

```
% Plotting the result
```

```
figure(3)
y_vector=1:-2/(m-1):-1;
x_vector=1:2/178:700/178;
plot(x_vector,CoV_E, '+k',x_vector,CoV_I, 'or')
legend('Flujo Estable', 'Flujo
'
Inestable', 'Location', 'southwest', 'Orientation', 'horizontal')
xlabel('Distancia x, um', 'FontName', 'Arial', 'FontSize', 14)
ylabel('CoV, %', 'FontName', 'Arial', 'FontSize', 14)
titulo='Coeficiente de Variacion (CoV) entre flujo Estable e Inestable';
title(titulo, 'FontName', 'Arial', 'FontSize', 12)
grid on
print('CoV Estable Inestable', '-djpeg')
```

C. CAMPO DE PRESIÓN EN EL FLUJO ELECTROCINÉTICO

La propuesta para mostrar el contorno de presión en un EKF es una prueba de que el gradiente no es predominante en EKF. Las Figuras C.1, C.2 y C.3 muestran el gradiente de presión presente en los modelos de Luo, NS95 y XS3550, respectivamente.



Figura C.1. Contorno de presión en el modelo de Luo. Tiempos (a) 0, (b) 25, (c) 500 y (d) 1000 *ms*.







Figura C.2. Contorno de presión en el modelo de NS95. Tiempos (a) 0, (b) 7.2, (c) 37.4

y (d) 50 ms.



Figura C.3. Contorno de presión en el modelo de XS3550. Tiempos (a) 0, (b) 1.2, (c) 39.4 y (d) 100 ms.

Todos los resultados de presión se expresan en Pascal (Pa) excepto en la Figura C.2, porque como la condición inicial (a) tuvo una presión mínima extrema, el resultado está en kilo Pascal (kPa). La presión mínima en el modelo NS95 en el momento inicial se muestra en la Figura D.4, donde la presión máxima en el canal sur es igual a 2452.74 Pa.



Figura C.4. Presión mínima en (kPa) para el modelo NS95 en el instante inicial.

D. COMPARACIÓN EXPERIMENTAL DE FLUJO ELECTROCINÉTICO ESTABLE E INESTABLE EN EL MICROCANAL NS95

Para comparar en imágenes experimentales, se comparan la estabilidad electrocinética (EKS) y la inestabilidad (EKI) usando la Figura D.1.



Figura D.1. Imágenes experimentales de flujo (a) estable a $E_a = 783 V/cm$ y (b) inestable a $E_a = 1620 V/cm$, reportadas por Quintana (Quintana, 2012) con $\gamma = 18$.

El resultado de la comparación se da en la Figura D.2 con un código de Matlab, donde parece que la inestabilidad produce una curva que disminuye con las oscilaciones, mientras que en el caso estable hay una línea constante en la disminución que induce una disminución menor en el índice de mezcla.



Figura D.2. Índice experimental (*CoV*) entre flujo estable e inestable de las imágenes experimentales reportadas por Quintana (Quintana, 2012).

E. PROTOCOLO DE LIMPIEZA DEL MICROCANAL XS3550

Considerar el esquema del microcanal que se muestra en la Figura 3.2 sobre el Norte (N), Sur (S), Este (E) y Oeste (W) como los extremos del microcanal. Luego, para el microcanal XS3550, se utilizó un volumen de referencia de 3 μ L en cada reservorio, con referencia de volumen para limpieza en el microcanal NS – 95 utilizado por Quintana (Quintana, 2012) y Chaparro (Chaparro, 2012), con un tiempo de succión de 5 minutos.

En los extremos Norte, Sur y Oeste, una solución de hidróxido de sodio en agua desionizada 3 μ L (*NaOH* 100 *mM*) se succiona desde el extremo Este con una bomba de vacío (Figura E.1), que proporciona una presión de succión entre 50 - 60 *mmHg*.



Figura E.1. Bomba de vacío Kioto modelo SU – 660.

Después de la succión de todos los reservorios, como se muestra en la Figura E.2 (secuencia de imágenes observada con la cámara *CMOS*), se encuentra si hay partículas que interrumpen los canales, que son posibles efectos negativos en los experimentos.



Figura E.2. Secuencia de imágenes en el proceso de limpieza del microcanal. (a) Inicio de la succión desde el extremo Este. (b) Fin del procedimiento de succión desde el extremo Este.

El procedimiento de limpieza consta de 5 etapas:

- Colocar 3 μL de agua desionizada en el Norte, Sur y Oeste, para succionar durante 5 minutos desde el reservorio Este.
- 2. Colocar 3 μ L de *NaOH* 100 *mM* como en el caso anterior Norte, Sur y Oeste, para ser succionados de la misma manera por el Este.
- 3. Colocar nuevamente agua desionizada en los reservorios Norte, Sur y Oeste para remover completamente la solución de *NaOH* al succionar desde el Este.
- 4. Luego, depositar $3 \mu L$ de la solución electrolítica de baja conductividad (σ_L) 1 *mM KCl*, para succionar desde el Este durante 5 minutos.
- 5. Finalmente, la baja conductividad (σ_L) se cambia para una nueva solución en todos los reservorios y se deja reposar durante 10 minutos para su posterior succión. Los volúmenes utilizados son 1,5 μL en el Norte, Sur y Oeste, y 4 μL en el Este.

F. DETALLE DEL PROCEDIMIENTO DE SIMULACIÓN DE EKF EN COMSOL

Se presenta un mapa conceptual, Figura F.1, como resumen de las etapas en la simulación numérica de EKF en Comsol.



Figura F.1. Mapa conceptual de los pasos para simular EKF en Comsol Multiphysics.

Primero, se definen las propiedades de flujo tales como densidad, viscosidad, coeficiente de difusión, entre otros, y dimensiones geométricas como alto h y longitudes del microcanal cruzado. Segundo, se crea el modelo del microcanal en 2 dimensiones, y la malla del microcanal, según el tamaño máximo de elemento que se mencionó en la estabilidad numérica. Tercero, se usan los módulos de cada física sobre concentración de especie, electroestática y flujo laminar, y se configuran las condiciones de contorno en el

microcanal, como velocidad de flujo electro-osmótico, aislación eléctrica y presión cero en los reservorios. Cuarto, se calcula el estudio estacionario con la variación del potencial eléctrico de referencia. Quinto, se realiza el estudio transiente con el potencial eléctrico de referencia en los reservorios del norte, sur y oeste. Sexto, se analizan los resultados de conductividad eléctrica, potencial eléctrico y el campo de velocidad en todo el microcanal, como se verá en las siguientes secciones.

G. RESUMEN ENVIADO PARA PRESENTACIÓN EN CONGRESO APS-2017

Log #DFD17-2017-000202

Abstract Submitted for the DFD17 Meeting of The American Physical Society

Sorting Category: 11.4 (C)

Determination and characterization by numerical simulations of flow mixing due to electrokinetic instabilities in cross-shaped microchannels.¹ ESTEBAN GUERRERO, DAMING CHEN, Pontificia Universidad Catolica de Chile, LOGAN HAGEMAN, University of Texas, Austin, AMADOR GUZMAN, Pontificia Universidad Catolica de Chile — This article describes a computational study of flow mixing in microchannels due to electrokinetic instabilities that are compared to experimental results obtained in a cross- microchannel with an ionic solution of potassium chloride with two different ionic concentrations, with the purpose of determining the parameter combinations to produce the onset of flow mixing and its characteristics. For the numerical simulation process carried out using a finite element method-based commercial code, we applied a typical zeta potential used in other articles as a boundary condition for the microchannel walls. For the experiments, we used a commercial silicon glass (Caliper NS95) microchannel. For determining a flow mixing regime, we use the concept of "mixing index" established by (Fu et al., 2005) for an electrical conductivity ratio range of 18 to 52 with an electric field range of 1100 to 1900 V/cm. From our numerical simulation results we have found a threshold for the electrical Ravleigh number for starting a flow mixing regime, and a minimum microchannel characteristic length for achieving a 90% of flow mixing that will allow us to significantly reduce the mixing time.

¹Vicerrectoria de Investigacion y Departamento de Ingeniera Mecnica y Metalrgica Pontificia Universidad Catolica de Chile

X

Prefer Oral Session Prefer Poster Session Esteban Guerrero eeguerrero@uc.cl Pontificia Universidad Catolica de Chile

Date submitted: 19 Jul 2017

Electronic form version 1.4

H. RECEPCIÓN DE ARTÍCULO ENVIADO A LA REVISTA PHYSICS OF FLUIDS

