

SIMULACIÓN NUMÉRICA DE PROCESOS ELECTROOSMÓTICOS Y ELECTROFORÉTICOS MEDIANTE UNA PLATAFORMA MODULAR BASADA EN EL MÉTODO DE VOLUMENES FINITOS

Pablo A. Kler⁺ and Santiago Márquez Damián^{*}

Centro de Investigación de Métodos Computacionales (CIMEC) Predio CCT-CONICET Santa Fe, Col. RN 168, Paraje El Pozo, 3000, Santa Fe

⁺kler@cimec.santafe-conicet.gov.ar

^{}santiagomarquezd@gmail.com*

Abstract. Los procesos electroosmóticos y electroforéticos consisten en procesos de transporte de cantidad de movimiento en fluidos, y transporte y reacción de masa de solutos y electrolitos, mediante la aplicación controlada de campos eléctricos. La particularidad de estos fenómenos, fuertemente interfaciales, es que sus efectos pueden aprovecharse de manera más eficiente en la microescala. Es así que en las últimas dos décadas, las plataformas microfluídicas para análisis (más conocidas como Lab-on-a-chip), han sido el principal escenario para el desarrollo de métodos y tecnologías relacionadas a los procesos electroosmóticos y electroforéticos. El modelado y la simulación de los procesos electroosmóticos y electroforéticos en la microescala presentan cierta complejidad basada tanto en su naturaleza multifísica y multiescala, como también en las dificultades que implican la instrumentación y medición de parámetros físicos en microdispositivos, que obstaculizan la obtención de información suficiente para la comprensión integral de los fenómenos y las variables que los afectan, como la validación de resultados numéricos. A los fines de representar correctamente, la fisicoquímica de los procesos, se debe incluir modelos eléctricos, fluidicos, de transporte de materia y reacciones químicas. La implementación exitosa de modelos y simulaciones numéricas de estos procesos permiten una mayor comprensión y un mejor aprovechamiento de las características de los mismos en microdispositivos y Lab-on-a-chip, para mejorar sus diseños, aumentar su rendimiento y también poder expandir así su aplicabilidad. En este trabajo se presenta la implementación de la simulación numérica de procesos electroosmóticos y electroforéticos a través del acople de las diferentes ecuaciones que modelan el campo eléctrico, el campo de velocidades y presiones, el campo de concentraciones de solutos y electrolitos y el equilibrio ácido-base. Se consideran también de manera especial las heterogeneidades de concentraciones de cargas en las paredes que dan origen a la doble capa eléctrica, que en definitiva permite el flujo electroosmótico. La implementación se llevó a cabo mediante el método de volúmenes finitos utilizando la plataforma OpenFOAM(R). La implementación presentada resulta tanto original como novedosa, desde el punto de vista del método y las herramientas utilizadas. Por primera vez procesos electroosmóticos y electroforéticos son simulados mediante volúmenes finitos (en la literatura solamente pueden hallarse implementaciones mediante elementos finitos o diferencias finitas), mostrando ventajas claras respecto de la estabilidad de las soluciones, el menor costo computacional, la modularidad de la plataforma utilizada y la versatilidad para diferentes condiciones de operación, relacionadas a condiciones de borde, modelos de viscosidad y/o porosidad entre otros. Por último es destacable que la implementación en una plataforma con licencia GNU-GPL brindará la posibilidad a otros usuarios y desarrolladores de utilizar y mejorar las herramientas presentadas.