

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

Pablo A. Kler^{a,b,+} y Santiago Márquez Damián^{a,c,*}

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

^b*Departamento de Ingeniería en Sistemas de Información, FRSF-UTN. Lavaise 610, Santa Fe*

^c*Departamento de Ingeniería Mecánica, FRSF-UTN. Lavaise 610, Santa Fe*

⁺*kler@cimec.unl.edu.ar*

^{*}*santiagomarquezd@gmail.com*

Palabras Clave: Flujo electrosmótico, Electroforesis, Isotacoforesis, Método de volúmenes finitos

Resumen. Los procesos electrosmóticos y electroforéticos consisten en procesos de transporte de solutos y solvente, y de reacción entre diferentes electrolitos, mediante la aplicación controlada de campos eléctricos. La microescala se convierte en un escenario donde estos fenómenos, fuertemente interfaciales, se aprovechan de manera más eficiente en la implementación de procesos y dispositivos, fundamentalmente en química analítica y bioanalítica: 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 electrosmóticos y electroforéticos. El desarrollo de modelos y simulaciones numéricas de estos procesos permite una mayor comprensión y un mejor aprovechamiento de las características de los 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 electrosmóticos 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 electrosmótico. La implementación se llevó a cabo mediante el método de volúmenes finitos utilizando la plataforma OpenFOAM®. La herramienta de simulación, ya presentada en un trabajo anterior, resulta novedosa, desde el punto de vista de las herramientas utilizadas para la resolución de casos complejos. Justamente a partir de estos casos se presentarán las innovaciones recientes en el código que permitieron resolver situaciones experimentales computacionalmente demandantes. Se pondrá énfasis en las nuevas características que ofrece la herramienta como las diferentes condiciones de borde implementadas para la simulación del transporte de electrolitos, y la optimización de las estrategias de acoplamiento entre campos.