

# MAGNETOFORESIS DE UNA NANOPARTÍCULA MAGNÉTICA EN UN GAS DILUIDO EN RÉGIMEN DE TRANSICIÓN. (Modalidad: Trabajo de Grado)

# Br. ASTRID CAROLINA BASTARDO GONZÁLEZ

### TRABAJO DE GRADO PRESENTADO COMO REQUISITO PARCIAL PARA OPTAR AL TÍTULO DE LICENCIADO EN FÍSICA

CUMANÁ, 2018.

# MAGNETOFORESIS DE UNA NANOPARTÍCULA MAGNÉTICA EN UN GAS DILUIDO EN RÉGIMEN DE TRANSICIÓN.

APROBADO POR:

Prof. Luis Antonio Araque Lameda

Asesor Académico

# **INDICE GENERAL**

DEDICATORIAI
AGRADECIMIENTOS II
LISTA DE FIGURASIII
RESUMEN
CAPÍTULO I1
INTRODUCCIÓN1
CAPITULO II
MARCO TEÓRICO7
2.1. Coeficientes de transportes y fenómenos de transporte7
2.2. Tiempo y recorrido libre medio
2.3. Ecuación de transporte de Boltzmann en la aproximación del tiempo de
10 2.4. Transmonte de momente en récimen de transisión
2.4. Transporte de momento en regimen de transición.
2.5. Magnetoforesis
CAPITULO III
MARCO METODOLÓGICO
<ul><li>3.1. Ecuación de transporte de Boltzmann en la aproximación del tiempo de relajación con simetría axial en coordenadas esféricas.</li><li>29</li></ul>
3.2. Linealización y criterio de aproximación del Radio crítico para la E.T.B en el tiempo de relajación
3.3. Correcciones de la función de distribución hasta tercer orden
3.4. Corrección de Burnett y súper-Burnett para el tensor de presiones
3.5. Determinación de los esfuerzos normales y cizallantes en la superficie de la partícula
3.6. Corrección de la fórmula de Stokes para la fuerza de arrastre
3.7. Determinación de las trayectorias
CAPITULO IV
RESULTADOS Y DISCUSIÓN42
CAPITULO V
CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES
BIBLIOGRAFIA

APÉNDICES	58
A.1 Colisiones binarias y sección eficaz de dispersión	58
A.2 Integral de colisión.	61
A.3. Ecuación de variación de los valores medios y leyes de conservación	63
A.4. Ecuación de transporte de Boltzmann en la aproximación del tiempo de relajación expresada en coordenadas esférico-axial	70
A.5 Función de distribución linealizada	72
A.6 Tensores de presión y el criterio del radio crítico.	76
HOJAS DE METADATOS	80

# DEDICATORIA

A mi familia quienes han estado conmigo apoyándome y guiándome en cada paso que doy. Uds. son mi fortaleza y razón para seguir adelante.

A Dios por otorgarme el entendimiento y las bendiciones que me han traído a este punto de mi vida. Gracias Sr. por nunca abandonarme.

### AGRADECIMIENTOS

Primero que todo a Dios por mi vida y los seres que puso en ella.

Les agradezco a todas aquellas personas que nunca dudan de mí y estuvieron conmigo apoyándome, principalmente a mi familia María González, Rafael Bastardo, Railenis Bastardo González, María Bastardo González, Zahara Bastardo González y Grecia Aguilera Bastardo. Gracias por todo, los AMO.

Les agradezco a mis amigos Marielsys Moya, Solanged Espinosa, Patricia Urbaneja y compañeros de carrera por siempre estar ahí pendiente de mí y apoyándome.

Les agradezco todos los profesores que formaron parte de mi crecimiento académico en especial a los profesores Delfin Marval, Angel Betancourt, José Mendoza, Glennys Hernández, José Bastardo y no menos importante mi asesor Luis Antonio Araque Lameda.

# LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Clasificación de los diferentes regímenes para un gas según el número de Knudsen (Tomado de Wen-Ming Zhang, et al., 2002) 2
Figura 2. Modelos utilizados para estudiar la dinámica de fluidos en los diferentes regímenes 3
Figura 3. Transporte de la cantidad de movimiento por las moléculas que atraviesan un plano. 20
Figura 4. Representación esquemática de la variación del campo coercitivo $H_c$ respecto al tamaño de la partícula. (Tomado de Segura, J., 2013)
Figura 5 .Magnetización M y susceptibilidad magnética χ de una partícula superparamagnética en función del campo magnético aplicado. (Tomado de Webster, J, 2015)26
Figura 6. Fuerza de arrastre y fuerza magnética actuando sobre una partícula con momento magnético saturado $\mu_s$ y radio <i>R</i> sumergida en un fluido con viscosidad $\eta_{eff}$ y velocidad constante $\vec{u}_c$ en el infinito
Figura 7. Rango de validez de la solución de Stokes y Oseen
Figura 8. Representación esquemática del flujo que pasa sobre la partícula esférica de radio R. (Tomado de Machado, J. 2006)
Figura 9. Trayectoria de una nanopartícula magnética de radio $25nm$ , suspendida en un gas diluido en régimen de transición con un $K_n = 1$ , y en presencia de un gradiente de campo magnético constante de $100Tm$ , para diferentes valores del parámetro $\epsilon'$ 43
Figura 10. Fuerza de arrastre $F_r$ en función de $R$ para una partícula suspendida en un gas diluido en régimen de transición con una velocidad $\vec{u}_c$ en el infinito de $0.01ms$ y un valor fijo de a) $\lambda = 10R_0$ , b) $\lambda = 5R_0$ , donde $R_0 = 25nm$ , y con diferentes valores del parámetro $\epsilon'$
Figura 11. Fuerza de arrastre $Fr$ en función de $\lambda$ para una partícula suspendida en un gas diluido en régimen de transición con una velocidad $\vec{u}_c$ en el infinito de 0.01 <i>ms</i> y un valor fijo de a) $R = 25nm$ , b) $R = 1\mu m$ , y con diferentes valores del parámetro $\epsilon'$
Figura 12. Viscosidad efectiva $\eta_{eff}$ en función de <i>R</i> de un gas diluido en régimen de transición con un valor fijo de a) $\lambda = 10R_0$ b) $\lambda = 5R0$ , donde $R_0 = 25nm$ , y para diferentes valores del parámetro $\epsilon'$
Figura 13. Viscosidad efectiva $\eta_{eff}$ en función a $\lambda$ de un gas diluido en régimen de transición con un valor fijo de a) $R = 25nm$ , b) $R = 1\mu m$ , y para diferentes valores del parámetro $\epsilon'$
Figura 14. Velocidad magnetoforética o velocidad terminal $u_z$ en función de $R$ de una partícula magnética suspendida en un gas diluido en régimen de transición y en presencia de

Figura 15.	Velocidad magnetoforética o velocidad terminal $u_z$ en función de $R$ de una partícula magnética suspendida en un gas diluido en régimen de transición y en presencia de un gradiente de campo constante 100 $Tm$ , para un valor fijo de a) $R = 25nm$ , b) $R = 1\mu m$ , y con diferentes valores del parámetro $\epsilon'$
Figura 16	. Construcción geométrica, basada en (A-5) que representa un proceso de choque elástico(Tomado del Reif, F, 1986)
Figura 17.	Dispersión clásica de una partículas (punto rojo) por otra partícula fija ubicada en O (Tomado del Huang, K. 1987)
Figura 18.	Proyección en dos dimensiones del elemento de volúmen $d^3r$ . (Tomado del Reif, F. 1965)

### RESUMEN

Se estudió la magnetoforesis de una partícula superparamagnética suspendida en un gas diluido en régimen de transición y en presencia de un gradiente de campo magnético constante. Se determinó la fuerza de arrastre que ejerce el fluido sobre la nanopartícula resolviendo la ecuación de transporte de Boltzmann mediante el método de Chapman-Enskog, obteniendo la función de distribución molecular hasta tercer orden en la aproximación del tiempo de relajación, para hallar el campo tensorial y la ecuación del movimiento del fluido. La ecuación del movimiento se resolvió para un flujo laminar con simetría esférica-axial, en ausencia de fuerza externa y utilizando condiciones de contorno de no deslizamiento, además, se parametrizo las interacciones de la interfaz solido-gas mediante la primera derivada radial de la velocidad tangencial. Por otro lado, la fuerza magnética se determinó utilizando las ecuaciones magnetostáticas de Maxwell obteniéndose la velocidad terminal de la nanopartícula a partir de la condición del equilibrio mecánico entre la fuerza magnética y la fuerza de arrastre. Las trayectorias seguidas por la partícula se obtuvieron utilizando esta velocidad terminal las cuales demostraron ser sensibles a la parametrización de las interacciones. Además, la velocidad magnetoforética presenta un comportamiento oscilante característico del régimen de transición y un comportamiento monotónico cuando el parámetro  $\epsilon'$  toma el valor de  $\frac{3}{2}$ .

# CAPÍTULO I INTRODUCCIÓN.

Einstein en 1905 [1], basándose en los conocimientos de la hidrodinámica, estudió como es afectado el coeficiente de viscosidad de un líquido homogéneo e incompresible, cuando en este se encuentran disueltas sin disociarse cierta cantidad de moléculas de una substancia. Este trabajo estableció un método para el estudio de suspensiones diluidas en las que se admite que las partículas suspendidas no interaccionan entre si y que además la suspensión se mueven como un cuerpo rígido, es decir, no hay deslizamiento entre las moléculas y el líquido, lo que le permitió poder realizar los cálculos considerando la acción de una sola partícula para luego extenderlo al caso de una suspensión más compleja. Un método alterno al propuesto por Einstein es el de Landau y Lifshitz [2], el cual se fundamenta en el cálculo del promedio de las tensiones en un fluido debido a las partículas suspendidas, suponiendo que las tensiones entre ellas son despreciables. De esta manera el promedio se puede obtener superponiendo el promedio de las tensiones de cada partícula en suspensión. Estos investigadores utilizaron como base fundamental la Ley de Resistencia de Stokes para llevar a cabo el estudio de suspensiones diluidas, así como la uso Millikan en la determinación de la carga del electrón [3-5].

El comportamiento dinámico de los fluidos tiene gran relevancia, no solo porque su conocimiento tiene aplicaciones numerosas, sino también debido a que permite entender aspectos como la interacción de las partículas. El estudio de los fluidos puede realizarse a través de enfoques diferentes, dependiendo de las características que queramos explorar, y en ocasiones resulta útil utilizar distintos enfoques en forma complementaria.

Es conocido que para un gas diluido la trayectoria libre media es inversamente proporcional a la densidad. Si se presenta el caso en que la densidad del fluido disminuye, entonces podemos esperar que el recorrido libre medio de las partículas del gas se incremente, de tal forma que si esta última cantidad es del orden de una distancia característica de las fronteras que lo contienen, se dice que el fluido es un gas rareficado.

Cuando el gas que se estudia se encuentra en este régimen de densidad, las contribuciones de las colisiones del gas en las paredes no son despreciables y conducen a efectos interesantes [6,7].

En el estudio de gases se ha podido identificar un parámetro adimensional, el número de Knudsen, que permite clasificar los diferentes regímenes de densidad de los gases y, que está definido por la razón entre la trayectoria libre media de las moléculas del gas y una de las distancias características de las fronteras que lo contienen, ver figura 1.



Figura 1. Clasificación de los diferentes regímenes para un gas según el número de Knudsen (Tomado de Wen-Ming Zhang, *et al.*, 2002).

El análisis de sistemas fluidicos con números de Knudsen muchos menores a la unidad,  $K_n \ll 1$ , se pueden llevar a cabo mediante los esquemas de la hidrodinámica clásica, empleando para ello la ecuación de Navier-Stokes, esta región se conoce como régimen del continuo. Usualmente en este régimen se emplean las condiciones de frontera de no deslizamiento, las cuales consisten en suponer que las paredes y la capa del gas adyacente tienen la misma temperatura y velocidad. Por otro lado, al encontrarnos con fluidos que tienen números de Knudsen cercanos a la unidad hablamos de flujos en régimen de transición, aquí las descripciones microscópicas son necesarias para llevar a cabo el análisis del comportamiento del fluido ya que las interacciones moleculares y moléculas-superficie se hacen notorias. Una de las características de este régimen es la llamada capa de Knudsen [8-15], ésta es una capa delgada de gas que se forma en las inmediaciones de la superficie de la frontera, que tiene propiedades diferentes a las del

gas y tampoco coinciden con las de la pared. En esta zona ocurren desviaciones apreciables en las propiedades macroscópicas de gas como en los perfiles de velocidad, la temperatura y la presión del gas. En la figura 2 se muestran los modelos más comunes utilizados para describir a un gas según el régimen en el que se encuentre.

Numero de Knudsen	Modelos
$K_n  ightarrow 0$ (continuo sin difusión molecular)	Ecuaciones de Euler.
$K_n \le 10^{-3}$ (continuo con difusión molecular)	Ecuaciones de Navier-Stokes con condiciones de contorno de no deslizamiento.
$10^{-3} \le K_n \le 10^{-1}$ (continuo-Transición)	<ul> <li>Ecuaciones de Navier-Stokes con condiciones contorno de no deslizamiento o deslizamiento.</li> <li>Ecuaciones de Burnett con condiciones contorno de no deslizamiento o deslizamiento.</li> </ul>
$10^{-1} \le K_n \le 10$ (Transición)	<ul> <li>Ecuaciones de Burnett con condiciones contorno de deslizamiento.</li> <li>Ecuaciones de Momentos.</li> <li>DSMC.</li> <li>Lattice Boltzmann.</li> </ul>
$K_n \ge 10$ (flujo libre molecular)	<ul> <li>Boltzmann sin colisiones.</li> <li>DSMC.</li> <li>Lattice Boltzmann.</li> </ul>

Figura 2. Modelos utilizados para estudiar la dinámica de fluidos en los diferentes regímenes.

Cuando se aborda el estudio de la dinámica de un gas diluido o rareficado en régimen de transición se recurre a la ecuación de transporte de Boltzmann en su forma original o en alguna de sus aproximaciones [17-20], dado que ésta está dada en términos de las variaciones de una función de distribución molecular. Hasta ahora, no se ha logrado resolver esta ecuación en forma exacta debido a que es no lineal; sin embargo, sus soluciones se dan mediante métodos de aproximación con condiciones de contorno adecuadas, lo cual permite describir el fluido en su totalidad, proporcionando todas las variables macroscópicas y microscópicas que intervienen en los procesos de transporte por colisión.

Se puede señalar al matemático alemán David Hilbert como el que comienza a estudiar un método para obtener soluciones aproximadas de la ecuación de transporte de Boltzmann [21]. En el mismo año, e independientemente, Sidney Chapman y David Enskog obtuvieron soluciones aproximadas para la misma ecuación y en gases suficientemente densos. Desde entonces, se le conoce como el método de Chapman-Enskog, tal como aparece titulado en el libro: *Teoría matemática de gases no uniformes*, de S. Chapman y T.G. Cowlign [7]. Básicamente este método consiste de dos hipótesis, una que permite hacer un desarrollo de la función de distribución en serie de potencias de un parámetro de uniformidad, llamémoslo  $\varepsilon$ , que es una medida del cambio relativo de las variables macroscópicas locales como la temperatura, $T(\vec{r},t)$ , la velocidad del fluido  $\vec{u}(\vec{r},t)$  y la densidad,  $n(\vec{r},t)$ , sobre una trayectoria libre media y, otra que introduce los cambios de la función de distribución con el tiempo solo a través de los promedios estadísticos de los invariantes colisiónales [22].

Otros investigadores como Bhatnagar, Gross y Krook [17] publicaron métodos diferentes para darle una solución a la ecuación de transporte, tal método es conocido como el modelo BGK. Otro que se dedicó a encontrar una solución para el término de colisión de la E.T.B fue Harold Grad [19,20] quien propuso la teoría de los 13 momentos, donde da un método sistemático para resolver la ecuación de transporte mediante un desarrollo en serie de polinomios ortogonales, pero además llama la atención sobre una condición para la validez de la ecuación de transporte de Boltzmann, hoy en día a esta conjetura se le denomina el límite de Boltzmann-Grad. Todas estas teorías se han enfocado en tratar de explicar la dinámica de gases rareficados, y más comúnmente cuando estos gases se encuentran en régimen de transición.

Es sabido que para estudiar la dinámica de gases rareficados en régimen de transición el modelo del continuo a órdenes superiores es considerado como una atractiva estrategia para incluir de los efectos de la capa de Knudsen [24]. Investigaciones han demostrado que llevar las ecuaciones de Navier-Stokes a orden superior, conocidas como ecuaciones de Burnett y Super-Burnett, arroja resultados que son comparables con los resultados experimentales y simulaciones numéricas, como lo es el caso de las ondas de choque [24]. Salomons y Mareschal en 1992 estudiando ondas de choque en un gas enrarecido con número de Mach entre 4 y 134, mediante simulación (DSMC) y dinámica molecular, obtuvieron que la ecuación de Navier-Stokes falla drásticamente en regiones

muy pequeñas, pero al agregarles las correcciones de Burnett estos resultados mejoran considerablemente.

A pesar de que el método de Chapman-Enskog ha sido altamente cuestionado, este arroja resultados que son consistentes en el régimen continuo donde son valederas las ecuaciones de Navier-Stokes y en regímenes donde ellas pierden su validez [25-27]. Unas de las primeras pruebas teóricas y experimentales reportadas para gases diluidos en régimen de transición en la que se utilizó la formulación de la ecuación de transporte de Boltzmann en la forma de la integral de camino, la que es equivalente al método de Chapman-Enskog [28], son las publicadas por los investigadores Garcías-Sucre y colaboradores [29-33] donde demuestran que para un gas diluido la viscosidad efectiva presenta zonas de alta variación para ciertos valores de presión, y que además, con estas variaciones en la presión se puede determinar la sección eficaz de colisión de las moléculas del gas utilizado como fluido, esto sería un nuevo método para la determinación de esta cantidad. Estos experimentos fueron realizados utilizando como viscosímetro un péndulo de torsión encerrado entre dos cilíndricos concéntricos, los cuales contenían al gas en estudio.

Hoy en día, el estudio teórico y experimental de sistemas formados por partículas de tamaño nanométrico suspendidas en una matriz fluidica abre una prometedora perspectiva de nuevos conocimientos y aplicaciones, en especial cuando estas tienen una respuesta a los campos externos; es decir, que las partículas no son inertes como en el caso de Einstein, donde el cambio del coeficiente de transporte, la viscosidad, se debe a la cantidad de soluto. Estas respuestas han dado origen a diferentes fenómenos, entre otros, como: la termoforesis, la electroforesis, la dielectroforesis y la magnetoforesis. Las tres últimas se deben a las respuestas de las partículas a los campos electromagnéticos y han dado origen a una nueva disciplina llamada electrohidrodinámica [34,35].

Las nanopartículas magnéticas son de gran interés para los investigadores de una amplia gama de disciplinas, incluyendo fluidos magnéticos, biomedicina, resonancia magnética, almacenamiento de datos, entre otros. El hecho de que este tipo de nanopartículas posea un elevado momento magnético, que tengan un tamaño comparable con las unidades básicas de la vida encerradas dentro de la membrana celular o de su y que puedan ser dirigidas fácilmente por campo magnético externo, hace que estas tengan un futuro prometedor en los campos antes mencionados, especialmente en la biomedicina [36-41].

Las suspensiones de nanopartículas magnéticas, conocidas como Ferrofluidos, forman parte de una nueva clase de materiales magnéticos, los cuales presentan nuevas propiedades debido al agregado de estas nanopartículas magnéticas, por lo que son de gran importancia científica y tecnológica. Generalmente el estudio de estos sistemas se hace usando la ecuación de Navier-Stokes, es decir que se admite la hipótesis del continuo y que además el fluido es homogéneo. En otras palabras las nanopartículas se comportan como las de la solución de Einstein, salvo que en este caso responden al campo magnético externo, con baja movilidad y efectos inerciales despreciables. En estas condiciones la fuerza volumétrica debida al campo externo se puede determinar mediante la aproximación de una partícula, es decir, se necesita estudiar el movimiento de la partícula debido a la acción de las fuerzas que actúan sobre ella. Esta repuesta en fluidos con partículas magnéticas es lo que se conoce como magnetoforesis [42,34].

En este trabajo nos enfocaremos en estudiar el movimiento de una partícula magnética en un fluido de un gas diluido en régimen de transición [43,44] bajo la acción de un campo magnético externo independiente del tiempo. Se utilizarán la ecuación de transporte de Boltzmann en la aproximación del tiempo de relajación [28] hasta tercer orden para determinar el tensor de esfuerzo y así obtener la fuerza de arrastre que actúa sobre la nanopartícula; mientras que la fuerza magnética se determinará usando los conceptos básicos de la magnetostática y la termodinámica de los cuerpos magnetizables [45]. Estas dos fuerzas determinarán la dinámica de la nanopartícula dentro de la matriz fluidica. Estos resultados se podrán utilizar como un primer paso para el estudio de una suspensión más compleja.

### **CAPITULO II**

### MARCO TEÓRICO.

### 2.1. Coeficientes de transportes y fenómenos de transporte.

El estudio del comportamiento de los sistemas macroscópicos que no están en un estado termodinámico de equilibrio total, es de importancia para la comprensión de los estados de equilibrio de los sistemas macroscópicos. El primer enfoque que se dio para explicar los fenómenos que ocurre en sistemas macroscópica fuera del equilibrio termodinámico, fue mediante leyes fenomenológicas que relacionan los flujos con los gradientes que los producen, tales como, entre otras, la ley de Fourier para conducción de calor que relaciona el flujo de calor con el gradiente de temperatura, o la ley de fricción viscosa de Newton que relaciona el flujo de momento en un fluido, debido al gradiente de velocidad en el mismo. En general, en esta descripción los flujos transportados, fuera del equilibrio termodinámico, se explican mediante la expresión fenomenológica,

$$\vec{J} = -\mu \,\vec{\nabla} \,\phi \tag{2.1}$$

Donde  $\mu$ , el coeficiente de proporcionalidad, denominado coeficiente cinético o coeficiente de transporte y  $\phi$  es una cantidad asociada a la propiedad transportada.

Un segundo enfoque consiste en obtener estos flujos y los coeficientes cinéticos, usando modelos totalmente formales y los supuestos de la teoría atomística de la materia o usando modelos semi-fenomenológico. En ambos enfoque las colisiones moleculares controlan fuertemente los flujos de las cantidades transportadas.

En otras palabras, si un sistema termodinámico esta fuera del equilibrio y a continuación se elimina la causa que lo originó, en un cierto tiempo retornara al estado del equilibrio. Si el sistema es un gas, el movimiento azaroso de los átomos o moléculas y sus

colisiones, regirán esta evolución hacia el estado de equilibrio. A continuación expondremos, de una manera sencilla, el proceso estocástico de las colisiones.

#### 2.2. Tiempo y recorrido libre medio.

El tiempo libre es el tiempo que viaja una molécula entre dos colisiones sucesivas. El tiempo libre medio es el tiempo promedio entre dos colisiones sucesivas de una molécula. Consideremos una molécula con velocidad  $\vec{v}$ , asumamos que esta partícula sufre una colisión con otra molécula en t = 0. Denotaremos  $P_t(t)$  como la probabilidad que esta molécula sobreviva un periodo t sin sufrir una segunda colisión. Las colisiones múltiples se desprecian, por lo tanto,  $P_t(0) = 1$  (sí  $P_t(0) \neq 1$ , la partícula podría colidir con dos moléculas separadas en el mismo tiempo: tales colisiones no son consideradas en la teoría cinética clásica).

Denotemos  $\omega dt$  como la probabilidad que una molécula dada sufre una colisión entre t y t + dt. La cantidad  $\omega$  es la probabilidad de colisión por unidad de tiempo, también llamada frecuencia de colisión de una partícula. Se asume que esta probabilidad de colisión es independiente de la historia de las colisiones pasadas de la molécula. Hipótesis que se conoce con el nombre de caos molecular. En general,  $\omega$  depende de la rapidez de la partícula, las partículas más rápidas viajan distancias más grandes y por lo tanto experimentan más colisiones en el mismo intervalo de tiempo, esto se puede expresar en consecuencia como  $\omega(v)$ .

Conocida la frecuencia de colisión de la partícula, es posible obtener la forma funcional de la probabilidad de no colisión,  $P_t$ . La probabilidad que la partícula sobreviva un intervalo de tiempo t + dt sin sufrir colisión es igual al producto de las probabilidades de no colisión en los intervalos de tiempos entre 0 a t y entre t a t + dt:

$$P_t(t+dt) = P_t(t)P_t(dt)$$
(2.2)

Como  $\omega dt$  es la probabilidad de una colisión en el intervalo de tiempo, dt, entonces la probabilidad de que no ocurra colisión durante el mismo periodo de tiempo es  $P_t(dt) = (1 - \omega dt)$ . Con esto obtenemos:

$$P_t(t+dt) = P_t(t)(1-\omega dt)$$
 (2.3)

Es decir,

$$\frac{dP_t}{dt} = -\omega P_t \tag{2.4}$$

Con la condición inicial  $P_t(0) = 1$ , la ecuación (2.3) tiene como solución,

$$P_t(t) = e^{-\omega t} \tag{2.5}$$

Con esta probabilidad se puede obtener la probabilidad de sobrevivencia en el intervalo de tiempo entre t y t + dt. Denotaremos esta probabilidad por  $f_t(t)dt$ . La cual es igual al producto de la probabilidad que ocurra una colisión en el tiempo t, y la probabilidad que no ocurra una colisión en el instante t y t + dt:

$$f_t(t)dt = e^{-\omega t}\omega dt \tag{2.6}$$

 $f_t(t)$  es la función de distribución para el tiempo libre. Usando esta función de distribución podemos determinar el tiempo libre medio,  $\tau$  como,

$$\tau = \int_0^\infty dt \ t \ f_t(t) = \int_0^\infty dt \ t \ \omega e^{-\omega t} = \frac{1}{\omega}$$
(2.7)

Como en general  $\omega = \omega(v)$ ,  $\tau$  puede depender de la velocidad v de la molécula. [46,47].

El recorrido libre medio es la distancia promedio recorrida por la molécula entre dos colisiones sucesivas. El tiempo libre medio y el recorrido libre medio no son cantidades

independientes, es decir, una partícula viaja una distancia  $\lambda$  entre dos colisiones consecutivas en un tiempo  $\tau$ , por lo tanto la razón entre estas dos cantidades debe ser la rapidez promedio de la partícula,

$$\frac{\lambda}{\tau} = \bar{\nu} \tag{2.8}$$

Donde  $\lambda$  o  $\tau$ , son cantidades a determinar.

A continuación se presenta un argumento sencillo para obtener un orden aproximado para  $\lambda$ , suponiendo que los átomos o moléculas son esferas duras de radio  $a_1$  y  $a_2$ . Consideraremos una molécula que se mueve y otra que se considera fija. Una colisión tiene lugar solamente si la distancia d entre sus centros es  $d \leq (a_1 + a_2)$ . Si la esfera móvil recorre una distancia  $\lambda$  entre dos impactos, esto significa que sólo hay una molécula, es decir la móvil, en el cilindro de volumen  $\lambda \pi d^2$ , en otras palabras  $n\lambda \pi d^2 \approx$ 1. De aquí,

$$\lambda \cong \frac{1}{n\pi d^2} \tag{2.9}$$

donde  $n = \frac{N}{V}$ , es la densidad de esferas. En este argumento no se consideró el movimiento relativo entre las esfera que chocan, si esto se hace la relación obtenida se reduce en  $\frac{1}{\sqrt{2}}$ .

# 2.3. Ecuación de transporte de Boltzmann en la aproximación del tiempo de relajación.

Si entendemos la teoría cinética de la materia como el método propuesto para interpretar las propiedades observables o macroscópicas de un sistema formado por  $N(N \sim 10^{23})$ átomos o moléculas en términos de los parámetros que los caracterizan como: tamaño, carga, masa, entre otros, y de las leyes dinámicas que gobiernan su comportamiento, podemos afirmar que la primera persona a quien puede bautizarse como el padre de la teoría cinética de los gases es al famoso científico suizo Daniel Bernoulli.

En 1738 Bernoulli propuso por primera vez un modelo mecánico para describir las propiedades de un gas. Usando el postulado atomístico de la materia, obtuvo la presión ejercida por un gas sobre las paredes del recipiente que lo contiene, considerando el cambio de momento que experimentan las moléculas del gas, cuando estas chocan elásticamente con las paredes del mismo. Con este enfoque propuesto por Bernoulli es posible explicar las propiedades elementales de los gases, como su compresibilidad, la tendencia a expandirse, el aumento de la temperatura por compresión y la disminución por dilatación, y además la tendencia hacia la uniformidad. Este trabajo paso desapercibido en su época.

Uno de los primeros trabajos significativos de la teoría cinética fue el de R. Clausius, quien en 1858, en un artículo intitulado "Sobre las trayectorias libres medias recorridas por las moléculas individuales de cuerpos gaseosos", deduce de manera rigurosa la relación entre la energía cinética media de un gas formado por esferas duras y la temperatura termodinámica. En este trabajo Clausius dio una deducción elemental de las propiedades de transporte de un gas como la viscosidad y la conductividad térmica, expresándolas en términos de la trayectoria libre media que recorre una partícula.

Al estudiar los sistemas constituidos por muchas partículas es imposible conocer la configuración microscópica exacta de cada una de ellas. Por ejemplo, en un mol de un gas están contenidas aproximadamente  $10^{23}$  moléculas y que, en una descripción clásica, a cada molécula se le asigna al menos seis números, a saber las coordenadas del vector posición  $\vec{r}$  y las componente del vector momento  $\vec{p}$ . Si consideramos que esta información se imprime en un centímetro de papel, la especificación completa del sistema exigiría nada menos que unos  $10^{23}$  centímetros, esto es, cien mil años luz de información escrita. Sin embargo, es posible superar esta dificultad usando una especificación de sus micro-estados, es decir, dando sus posiciones y velocidades para

cada una de las partículas y recurriendo a la estadística. Este método es posible ya que las variables macroscópicas del gas, que son observables, tales como la densidad, la presión, temperatura y los esfuerzos pueden ser obtenidos como promedios estadísticos de estos micros-estados.

En 1867 J. Maxwell estudiando los trabajos realizados por Clausius logra encontrar su bien conocida función de distribución de las velocidades para las moléculas de un gas:

$$f = \left(\frac{m}{2k_B T}\right)^{3/2} e^{-\frac{m}{2k_B T}v^2}$$
(2.10)

Donde *m* es la masa de la partícula, *v* es la velocidad de las moléculas del gas, *T* es la temperatura absoluta y  $k_B$  es la constante de Boltzmann. Con esta función se puede obtener todas las variables macroscópicas que describen a un sistema de un gas ideal en equilibrio termodinámico.

En un intento de dar una justificación formal a los trabajos de Maxwell, Boltzmann en 1872 establece el teorema H. Este teorema afirma la irreversibilidad de los procesos físicos y muestra como las colisiones moleculares tienden al incremento de la entropía, cualquier distribución inicial de posiciones y velocidades moleculares casi sin duda evolucionará hacia un estado de equilibrio, en las cuales las velocidades son distribuidas según la función de distribución de Maxwell. En este trabajo, Boltzmann derivó una ecuación integro-diferencial para describir la evolución de la función de distribución de velocidades en el espacio y tiempo demostrando que la formula encontrada por Maxwell para los diversos coeficientes de transportes en un gas de moléculas podrían ser obtenidas directamente a partir de la solución de la ecuación integro-diferencial [48]. Esta ecuación es conocida como la ecuación de transporte de Boltzmann la cual deduciremos a continuación:

Iniciaremos consideraremos la función de distribución de una molécula de un gas ideal y, suponiendo además que cada molécula se comportará como un subsistema casi cerrado, donde las interacciones entre ellas pueden ser despreciadas por completo, también admitiremos que las moléculas están sometidas a una fuerza externa  $\vec{F}(\vec{r},t)$  que no depende de la velocidad  $\vec{v}$ . Esta función se define tal que,

$$f(\vec{r}, \vec{v}, t)d^3rd^3v \tag{2.11}$$

Representa el número de moléculas que en el instante t, tienen posiciones y velocidades  $d^3rd^3v$  alrededor de  $\vec{r}$  y  $\vec{v}$  respectivamente. Este espacio de seis dimensiones con coordenadas  $x, y, z, v_x, v_y, v_z$  se le denomina el espacio de fase  $\mu$  de una molécula.

Debido al movimiento de las moléculas y a la influencia de la fuerza  $\vec{F}$ , la función de distribución cambiara con el tiempo de forma que en un instante posterior infinitamente próximo t' = t + dt estas moléculas tendrán posiciones y velocidades en  $d^3r'd^3v'$  alrededor de  $\vec{r}'$  y  $\vec{v}'$  respectivamente,

$$\vec{r}' = \vec{r} + \vec{v}dt$$
 ,  $\vec{v}' = \vec{v} + \frac{\vec{F}}{m}dt$  (2.12)

Así todas las moléculas en  $d\mu$  alrededor de  $(\vec{r}, \vec{v})$  al tiempo t, estarán en  $d\mu'$ alrededor de  $(\vec{r}', \vec{v}')$  al tiempo t + dt. Como no hay colisiones, entonces por el teorema de Liouville[4]

$$f(\vec{r} + \vec{v}dt, \vec{v} + \vec{F}dt, t + dt) = f(\vec{r}, \vec{v}, t)$$
(2.13)

Esta relación establece que f permanece invariante si nos movemos con las moléculas en el espacio fásico, puesto que  $d\mu' = d\mu$ . En otras palabras df/dt = 0, es decir f es una constante del movimiento, de otra manera

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \vec{\nabla}_v f = 0.$$
(2.14)

Esta ecuación es la ecuación de Boltzmann en ausencia de colisiones. Cada termino tiene su significado, el primer termino  $\frac{\partial f}{\partial t}$ , representa el cambio de f en el punto  $(\vec{r}, \vec{v})$ 

del espacio de fase, el segundo,  $\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f$  es el arrastre a través del área de  $d^3r$  y el tercer termino  $\frac{\vec{F}}{m} \cdot \vec{\nabla}_v f$ , es el "arrastre" debido a  $\vec{F}$  en la superficie de  $d^3v$ . Es inmediato entonces, que el cambio de puntos en  $d\mu$  aparece como un flujo en la hipersuperficie de este, es decir una ley de conservación para el número de puntos en  $d\mu$ .

Ahora si consideramos que existen colisiones entre las moléculas, en este caso el número de moléculas en el intervalo  $d^3rd^3v$  puede variar también a consecuencia de estas. La razón es que por efecto de las colisiones algunas moléculas que pertenecen a  $d\mu$ , salen de este, mientras que algunas que pertenecen a  $d\mu'$  entran a  $d\mu$ . Sea  $D_c f d^3r d^3v$  el incremento neto por unidad de tiempo del número de moléculas en  $d^3rd^3v$  a consecuencias de las colisiones. Entonces se puede establecer, en lugar de (2.13), que

$$f(\vec{r} + \vec{v}dt, \vec{v} + \vec{F}dt, t + dt) = f(\vec{r}, \vec{v}, t) + D_C f(\vec{r}, \vec{v}, t)$$
(2.15)

Lo que podemos expresar como:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \vec{\nabla}_v f = D_C f \qquad (2.16)$$

Esta es la ecuación de Boltzmann, donde el lado derecho cuantifica el cambio en el número de partículas en el espacio de fase  $d^3rd^3v$  debido a las colisiones entre ellas. Para describir de forma sencilla y explicita  $D_C f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ , se hacen algunas hipótesis, que de hecho limitan la validez de la ecuación de Boltzmann al régimen de baja densidad [28]. En general, en estas hipótesis se asume que las colisiones entre partículas ocurren por pares y las velocidades de dos partículas son estadísticamente independientes [ver apéndice A.1].

De acuerdo con las hipótesis anteriores podemos escribir el operador de colisiones en la siguiente forma [ver apéndice A-2],

$$D_{C}f = \int [f(\vec{r}, \vec{v}_{1}', t)f(\vec{r}, \vec{v}_{2}', t) - f(\vec{r}, \vec{v}_{1}, t)f(\vec{r}, \vec{v}_{2}, t)] |\vec{v}_{1} - \vec{v}_{2}| d\sigma d^{3}v_{2} \quad (2.17)$$

Donde  $\vec{v}_1$ ,  $\vec{v}_2$  son las velocidades de las partículas antes de la colisión;  $\vec{v}_1'$ ,  $\vec{v}_2'$  son las velocidades correspondientes después de la colisión;  $d\sigma$  es la sección transversal de colisión y  $|\vec{v}_1 - \vec{v}_2|$  la velocidad relativa. El valor absoluto de la velocidad relativa de dos partículas monoatómicas que chocan debe ser la misma antes y después de la colisión debido a que el choque por pares es elástico conservándose el momento lineal y la energía cinética.

Debido a la complejidad para resolver el lado derecho de la E.T.B por ser no-lineal, se han propuestos métodos de aproximación que arrojan resultados comparables con los experimentales como lo es la aproximación del tiempo de relajación. En esta aproximación se propone la restauración de una situación de equilibrio local por efecto de las colisiones a partir de una función de distribución de equilibrio local más general,

$$f(\vec{r}, \vec{v}, t) = n(\vec{r}, t) \left(\frac{\alpha(\vec{r}, t)}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\alpha}{2}(\vec{v} - \vec{u}(\vec{r}, t))^2}$$
(2.18)

Donde  $\frac{\alpha(\vec{r},t)}{2} = \frac{m}{k_B T(\vec{r},t)}$  es el inverso del cuadrado de la velocidad más probable  $\bar{v}^2$ ,  $n(\vec{r},t)$  es la densidad de moléculas y  $u(\vec{r},t)$  la velocidad del fluido. Aproximando la integral de colisión por  $\frac{f^{(0)}-f}{\tau}$ , la E.T.B se escribe como,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \vec{\nabla}_v f = -\frac{f - f^{(0)}}{\tau}$$
(2.19)

Los efectos de estas colisiones se pueden describir de manera que: cada átomo o molécula, por término medio, pierde su información cada vez que experimenta una colisión. Después de cada colisión comienza de nuevo a ser afectada por cualquier propiedad de no equilibrio que se encuentre presente; perdiendo esta propiedad en la próxima colisión. Por lo tanto, el efecto de las colisiones es el de restablecer f a su valor de equilibrio local  $f^{[0]}$ , durante un tiempo de relajación  $\tau$ , el cual es del mismo orden

que el tiempo transcurrido entre las colisiones. La teoría exacta demuestra que una ecuación de la forma  $\frac{f^{[0]}-f}{\tau}$ , sólo es válida cuando  $f - f^{[0]}$  es pequeño, y sólo para un conjunto específico de funciones propias  $f - f^{[0]}$ , el tiempo de relajación difiere de una función propia a otra si  $f_{(1)}, f_{(2)}, ...$ , son las funciones propias sucesivas, y  $\tau_1, \tau_2, ...$ , los tiempos de relajación correspondientes, cualquier pequeña desviación de f a  $f^{[0]}$  puede expresarse mediante una serie:

$$f - f^{[0]} = \sum_{m} A_m f_{(m)}$$
(2.20)

Lo que corresponde a,

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\sum_{m} \frac{A_m f_{(m)}}{\tau_m} \tag{2.21}$$

La ecuación (2.19) debe considerarse como una aproximación a (2.21) si el  $\tau$  en (2.19) representa un valor medio de  $\tau_1, \tau_2, ...,$  que varía de una función  $f - f^{[0]}$  a otra.

La aproximación del tiempo de relajación aunque linealiza la E.T.B en f, no garantiza soluciones exacta en la mayoría de las veces, esto es importante para justificar el empleo de métodos aproximados que nos permiten el estudio del comportamiento del sistema. En la literatura se han desarrollado varios métodos para resolver de forma aproximada la E.T.B., es natural que los métodos más usados para resolver esta ecuación tengan como punto de partida a la función de distribución Maxwelliana local, aunque esta no satisface la ecuación (2.16). Unos de los métodos más usados es el método de Chapmann-Enskog, que consiste básicamente en tomar aproximaciones sucesivas de la función de distribución para dar solución a la E.T.B. Si consideramos el caso estacionario y en ausencia de fuerzas externas la expresión (2.16) queda simplificada a,

$$\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f = -\frac{f - f^{[0]}}{\tau} \tag{2.22}$$

El hecho de que  $\tau$  aparezca en el denominador significa que las colisiones entre las partículas son dominantes en el comportamiento del sistema. Haciendo un desarrollo de f en  $\tau$ , de manera que,

$$f = f^{[0]} + \tau f^{[1]} + \tau^2 f^{[2]} + \tau^3 f^{[3]} + \dots + \tau^n f^{[n]}$$
(2.23)

Donde las potencias de  $\tau$  y los superíndice en f indica el orden de corrección en el que se está trabajando, sustituyendo (2.23) en (2.22) se obtiene,

$$f^{[0]} + \tau f^{[1]} + \tau^2 f^{[2]} + \tau^3 f^{[3]} + \dots + \tau^n f^{[n]} =$$

$$f^{[0]} - \tau \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r [f^{[0]} + \tau f^{[1]} + \tau^2 f^{[2]} + \tau^3 f^{[3]} + \dots + \tau^n f^{[n]}] \qquad (2.24)$$

De la ecuación (2.24) obtenemos las expresiones para las correcciones de f en los diferentes órdenes de aproximación están dadas por,

$$f^{[0]} = f^{[0]} , \qquad (2.25)$$

$$f^{[1]} = -\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f^{[0]} , \qquad (2.26)$$

$$f^{[2]} = -\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f^{[1]}, \qquad (2.27)$$

$$f^{[3]} = -\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f^{[2]}, \qquad (2.28)$$

$$f^{[n]} = -\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f^{[n-1]}$$
(2.29)

•

.

•

Si  $f^{[0]}$  esta dada por:

$$f^{[0]}(\vec{r},\vec{v}) = n \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\alpha(\vec{v}-\vec{u}(\vec{r},t))^2}$$
(2.30)

Con  $\alpha = \frac{m}{2k_BT}$ , entonces el conjunto de ecuaciones (2.25)-(2.29) describirá al fluido del gas en condiciones estacionarias, y así con las ecuaciones de conservación [ver apéndice A-3] a orden cero se obtienen las ecuaciones de Euler. Si tomamos la aproximación hasta orden  $f^{[1]}$  se obtienen las ecuaciones de Navier-Stokes[2], y las soluciones a los siguientes ordenes en  $\tau$  conducen a las ecuaciones constitutivas de Burnett y super-Burnett[29,30].

### 2.4. Transporte de momento en régimen de transición.

Los modelos teóricos de los fenómenos de transporte pueden clasificarse en dos clases: Aquella formada por tratamientos analíticos del problema, como la ecuación de Boltzmann, con diversos grados de aproximación [17]. Y otra clase constituida por diversos abordes numéricos a partir del método de la dinámica molecular [34,50]. Cada una de estas dos clases de modelos tiene ventajas. La primera, más apropiada para atribuir un significado físico claro a las variables físicas pertinentes de los fenómenos de transporte y la segunda, para el desarrollo de nuevas técnicas computacionales que permitan una mayor precisión en la descripción de esas variables. Estas dos clases, son pues, complementarias.

Como se señaló al principio de este capítulo, los fenómenos de transporte no pueden ser explicados sin la existencia de las colisiones entre átomos o moléculas que forman al sistema gaseoso en estudio. Según esto, si en un fluido gaseoso, a temperatura constante, existe un gradiente de velocidad, cada molécula transportaría el momento local del fluido de una colisión a la otra, adquiriendo en promedio, la propiedad del medio que la rodea. Por lo tanto, mientras hace un recorrido libre medio es portadora de una muestra

del momento del fluido gaseoso en el sitio donde experimento su última colisión. Si el gas no está en equilibrio el momento transportado y el valor de este en el punto de la próxima colisión podrían no ser iguales. Durante la próxima colisión la partícula, en promedio, comunicara esta diferencia a la correspondiente porción de gas. En consecuencias, las moléculas en sus movimientos y colisiones, acoplaran las propiedades del gas en los puntos correspondiente, tratando de igualarlas. Cuanto más grande sea el recorrido libre medio, más grande será este acoplamiento.

Para ilustrar lo expuesto arriba consideraremos un modelo semi-formal, para el flujo de un gas diluido con velocidad  $\vec{u} = [u_x(z), 0, 0]$ , la cual varía de punto a punto como una función de z, por ejemplo: Una molécula que experimenta una colisión en el punto z con un recorrido libre medio  $\lambda$ , sufrió su última colisión en su recorrido descendente, antes de llegar a z, en el punto  $z + \lambda$  donde la velocidad del gas es  $u_x(z + \lambda)$ , mientras que otra molécula, pudo haber experimentado su última colisión en el punto  $z - \lambda$  donde la velocidad del gas es  $u_x(z - \lambda)$ , antes de llegar a z, en su recorrido ascendente. Ambas moléculas llevan la propiedad  $u_x(z \pm \lambda)$  al punto z antes de hacer su última colisión (ver figura 3). El momento medio transferido se puede determinar mediante el siguiente argumento: cada molécula es portadora de la cantidad de movimiento  $mu_x(z \pm \lambda)$ , debido al movimiento del fluido, si la velocidad del fluido es tal, entonces el flujo de partículas a lo largo de uno de los ejes coordenados se puede considerar igual a  $n\bar{v}$  / 6, donde n es la densidad de partículas y  $\bar{v}$  la velocidad promedio [28]. Entonces el momento medio transferido al plano z, por las moléculas que descienden es  $n\bar{v}mu_x(z+\lambda)/6$ , mientras que las que suben llevan la cantidad de momento  $n\bar{v}mu_x(z-\lambda)/6$ . En otras palabras el flujo neto de momento transferido al plano z está dado por,

$$P_{xz} = \frac{1}{6} n\bar{v}m[u_x(z+\lambda) - u_x(z-\lambda)]$$
(2.30)



Figura 3. Transporte de la cantidad de movimiento por las moléculas que atraviesan un plano.

De esta manera se establece el acople entre los puntos,  $z + \lambda$ ,  $z, z - \lambda$  y la diferencia del momento transferido. La ecuación (2.30) describe rasgos esenciales de la viscosidad de los gases en diferentes regímenes tales como; el continuo ( $\lambda \ll L$ ) y el de transición ( $\lambda \approx L$ ) [33,51]. En el régimen de transición, en el que estamos interesados, no es suficiente tener sólo en cuenta los términos del desarrollo en serie de Taylor de  $u_x(z \pm \lambda)$  hasta primer orden en  $\lambda$ . Como los términos de potencias pares en  $\lambda$  se cancelan en la ecuación (2.30), hay que por lo menos ir hasta tercer orden en  $\lambda$ . Si esto se hace es inmediato ver a partir de la ecuación (2.30), que hasta tercer orden en  $\lambda$  tenemos:

$$P_{ZX} \approx -\frac{1}{3} n \bar{\nu} m \lambda \frac{\partial u_X}{\partial z} - \frac{1}{18} n \bar{\nu} m \lambda^3 \frac{\partial^3 u_X}{\partial z^3}$$
(2.31)

El primer término de la ecuación (2.31), representa el flujo de momento debido a la fricción viscosa, es decir la ley de Newton, si identificamos  $\eta \equiv \frac{1}{3}n\bar{v}m\lambda$ . Mientras al otro coeficiente lo denotaremos como:

$$\zeta \equiv \frac{1}{18} n \bar{v} m \lambda^3 \tag{2.32}$$

Podemos reescribir (2.31) como,

$$P_{ZX} \approx -\eta \frac{\partial u_X}{\partial z} - \zeta \frac{\partial^3 u_X}{\partial z^3}$$
(2.33)

La integración de la ecuación (2.33) nos permite una descripción más realista de la situación física, ya que tanto el valor de  $u_x$  como la de  $\partial u_x/\partial z$ , en las superficies sólidas, debe depender de las propiedades físicas y químicas de estas superficies, o más precisamente de los potenciales de interacción de las moléculas del gas entre sí y con los átomos de las superficies. La solución de esta ecuación pone énfasis en el argumento de que  $P_{zx}$  debe ser independiente de las coordenadas para un flujo laminar, es decir, no debe haber aceleración entre las capas adyacentes. Por lo tanto, en la expresión (2.30) la diferencia entre  $u_x(z - \lambda)$  y  $u_x(z \pm \lambda)$  debe ser independiente de z. Esto solo ocurre cuanto  $u_x(z)$  es una combinación lineal de una función periódica en z con periodo  $2\lambda$  y un término lineal en z. Esto fortalecería la decisión de tomar el número de términos en el desarrollo en serie de Taylor para  $u_x(z)$ . La función más simple que cumple con esta condición es:

$$u_{x}(z) = A(n)sen\frac{\pi z}{2\lambda} + B(n)cos\frac{\pi z}{2\lambda} + C(n)z + D(n)$$
(2.34)

Donde A, B, C y D pueden depender de la densidad n. se puede demostrar que (2.34) satisface a (2.33) como es de esperarse.

Terminaremos este apartado haciendo algunos comentarios útiles: En el régimen continuo la condición  $f^{(0)} \ll f^{[1]}$  implica que  $\lambda \frac{du_x}{dz} \ll 1$ , lo que indica que el gradiente de  $u_x$  es local puesto que casi no cambia con  $\lambda$ , es decir, la restauración del equilibrio local por las colisiones. Con  $f^{[1]}$  es suficiente para describir este régimen. Pero si  $L \gtrsim \lambda$  y L es la escala donde el gradiente de  $u_x$  es apreciable, entonces aparece una característica no local, debido a que la partícula experimento su última colisión, antes de llegar al plano z, en un punto donde el gradiente de  $u_x$  es diferente al que existe en el plano. En otras palabras con el término  $-\eta \frac{\partial u_x}{\partial z}$  no es suficiente para explicar el transporte de momento en estas condiciones, como lo establece la ecuación (2.33). De otra manera, y consistentemente, con  $f^{[1]}$  no se puede explicar este transporte, es decir, se requieren términos adicionales para la f. El número de términos a admitir está sujeto a la contrastación de la teoría y experimento, aunque el argumento expuesto arriba para

obtener la ec. (2.33), establecer con nitidez el orden tres. Lo que incluiría los efectos de interacción con las fronteras. Los resultados obtenidos con una función de distribución hasta tercer orden determinada por el método de Chapmann-Enskog han sido corroborados experimentalmente en flujos confinados con números de Knudsen definidos como  $K_n = \frac{\lambda}{L}$ , donde *L* es la distancia entre las dos fronteras móviles. [29].

En el estudio numérico del flujo de un gas rareficado que pasa sobre un cuerpo esférico Sone[15,52] encontró una capa delgada en el fondo de la capa de Knudsen, es decir, la región del fluido adyacente a la frontera de la esfera y del orden de varios recorridos libres medios. Esta nueva capa denominada capa S es del orden de  $O\left(\frac{\lambda^2}{R}\right)$ , donde *R* es el radio de la esfera. Cuando  $\lambda \sim R$  entonces el ancho de la capas S es igual al ancho de la capa de Knudsen, en este caso una explicación tentativa se podría lograr utilizando el modelo semi-formal expuesto arriba donde las interacciones en la capa S determinarían las condiciones de frontera en este régimen, y de manera consistente llevar las correcciones de la E.T.B a los órdenes de Burnett y super-Burnet.

#### 2.5. Magnetoforesis.

La magnetoforesis describe el comportamiento de una partícula magnética que se mueve a través de un medio viscoso bajo la influencia de un gradiente de un campo magnético externo. Un término similar que sea utilizado para describir el movimiento de partículas en un medio viscoso bajo la influencia de un campo eléctrico es la electroforesis [34]. La idea principal de la magnetoforesis es aprovechar la respuesta que tienen las partículas magnéticas, a campos magnéticos controlados para usarlas en aplicaciones biomédicas y biotecnológicas.

Se sabe que en las partículas magnéticas la reducción de volumen trae aparejado un cambio de comportamiento magnético del material, es decir, que por debajo de un tamaño crítico de la partícula, la estructura en multi-dominio microscópica normal es

enérgicamente desfavorable, y por lo tanto es posible tener sólo un dominio magnético [53,54]. A medida que el tamaño de partícula disminuye dentro del rango de dominio único, se alcanza otro umbral crítico en el que la remanencia y coercitividad van a cero y la partícula pasa al estado superparamagnético [55]. En la figura 4 se muestra esta transición. En este estado, por efecto de la energía térmica, el momento magnético de la partícula cambia de dirección siendo el momento magnético promedio igual a cero en ausencia de campo magnético externo. Esta característica en las partículas superparamagnética es favorable en muchas áreas, ya que bajo los efectos de un campo magnético magnético inducido de externo, el momento una partícula superparamagnética sigue la dirección del campo magnético. Una vez que este campo magnético se elimina, la magnetización de esta partícula caerá a cero (sin remanencia), independientemente de la magnitud del campo aplicado. Esta falta de memoria magnética fue inicialmente percibida como una característica inconveniente, por ejemplo, limita el tamaño de un bit físico en un dispositivo real. Sin embargo, este comportamiento superparamagnético tiene también algunas ventajas sobre el ferromagnetismo tradicional, por ejemplo, la ausencia de remanencia y coercitividad facilita el ajuste fino de la magnetización de la partícula por campos magnéticos externos y los valores de magnetización alcanzados en el estado superparamagnético están en el rango de materiales ferromagnéticos típicos.



Figura 4. Representación esquemática de la variación del campo coercitivo  $\vec{H}_c$  respecto al tamaño de la partícula. (Tomado de Segura, J. 2013)

En el caso de una partícula superparamagnética, en campos por encima del punto de su magnetización de saturación, ella se comporta como dipolos magnéticos permanente. Aquí estudiaremos el caso en el que la fuente externa se encuentran muy alejadas y la partícula es tan pequeña que la inducción magnética  $\vec{B}$  no varía en presencia de esta.

Admitiendo que  $\vec{\mu}$  es el momento magnético de la partícula, que la barrera de energía anisotrópica magnética es más alta que la energía térmica local y, que la susceptibilidad magnética del fluido,  $\chi_f$ , en el que la partícula magnética está suspendida es despreciable con respecto a la de ella,  $\chi_p \gg \chi_f$ , entonces se define la energía de interacción magnética del dipolo con el campo como [56],

$$U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \ (\vec{r}) = -\mu B \cos \theta \tag{2.35}$$

Donde  $\vec{B}$  ( $\vec{r}$ ) depende de las coordenadas del punto y  $\theta$  es el ángulo formado por  $\vec{\mu}$  y  $\vec{B}$ . Debido a que estamos asumiendo un estado de equilibrio estable en el que  $\vec{\mu}$  y  $\vec{B}$  son paralelos, escribimos (2.35) como,

$$U = -\mu B \tag{2.36}$$

La energía potencial magnetostática, U, tiene la forma del producto del momento característico de la partícula por la inducción externa, la cual es una medida de la cantidad de energía mecánica almacenada en el sistema que está disponible para realizar trabajo útil, tal como el desplazamiento espacial de la partícula contra la fuerza de reacción del medio viscoso [57,58]. Para un sistema conservativo la fuerza magnética se define como,

$$\vec{F}(\vec{r}) = -\vec{\nabla}U \tag{2.37}$$

Sustituyendo (2.35) en (2.37) obtenemos la fuerza magnética que actúa sobre una partícula superparamagnética,

$$\vec{F}_m(\vec{r}) = \mu \vec{\nabla} B \tag{2.38}$$

Donde podemos ver que fuerza magnética está dirigida a la largo del gradiente de la magnitud del campo magnético local  $\vec{B}$ . Por otro lado, para un sistema magnetostático tenemos que la magnetización  $\vec{M}$ , se define como el momento dipolar magnético por unidad de volumen,

$$\vec{\mu} = \vec{M}(\vec{r})V_p \tag{2.39}$$

Donde  $\vec{M}(\vec{r})$  es la magnetización de la partícula y  $V_p$  su volumen. La magnetización tiene una relación funcional con el campo magnético aplicado que depende del material implicado de la forma:

$$\vec{M} = \chi_p \vec{H}(\vec{r}) \tag{2.40}$$

Por lo tanto, la ecuación (2.39) queda expresada como:

$$\vec{\mu} = \vec{M}(H)V_p = \chi_p V_p \vec{H}(\vec{r})$$
(2.41)

En el caso una partícula superparamagnética, ver figura 5, se tiene que para un campo magnético mayor a su magnetización de saturación,  $\vec{M_s}$ , la magnitud de la magnetización se hace constante sin importar la intensidad del campo externo aplicado.



Figura 5. Magnetización M y susceptibilidad magnética  $\chi$  de una partícula superparamagnética en función del campo magnético aplicado. (Tomado de Webster, J. 2015)

Sustituyendo (2.39) en (2.38) tenemos,

$$\vec{F}_m(\vec{r}) = V_p M_s \vec{\nabla} B \tag{2.42}$$

Esta es la fuerza magnética que actúa sobre una partícula superparamagnética bajo la acción de un campo magnético externo. La relación entre el campo magnético externo aplicado  $\vec{H}$  y el campo magnético inducido  $\vec{B}$  cuando este no es afectado en presencia del material magnetizable, la partícula superparamagnética, viene dada por:

$$\vec{H} = \vec{B}/\mu_0 \tag{2.43}$$

Donde  $\mu_0$  es la permeabilidad magnética en el vacío.

En los estudios de magnetoforesis es común utilizar el concepto de movilidad magnetoforética para describir la evolución en el tiempo de medios heterogéneos en los que una fase discreta de interés, como las partículas, se pone en movimiento bajo la influencia de fuerzas externas y contra la fricción de una fase continua. Se aplica a

sistemas en equilibrio dinámico, para los cuales la fase móvil alcanza una velocidad terminal y cuya movilidad se define como una constante de proporcionalidad entre la velocidad de la fase móvil  $\vec{u}$ , y la fuerza motriz  $\vec{F}_m$ :

$$\vec{u} = a_m \vec{F}_m \tag{2.44}$$

Donde  $a_m$  es la constate de proporcionalidad entre la velocidad terminal de la partícula,  $\vec{u}$ , y la fuerza que ocasiona el movimiento,  $\vec{F}_m$ . Por lo tanto, la velocidad terminal de la nanopartícula magnética que se mueve en un fluido viscoso en régimen de transición está dada por el equilibrio mecánico entre la fuerza de arrastre viscosa en régimen de transición y la fuerza magnética sobre la nanopartícula, ver figura 6,



Figura 6. Fuerza de arrastre y fuerza magnética actuando sobre una partícula con momento magnético saturado  $\vec{\mu}_s$  y radio R sumergida en un fluido con viscosidad  $\eta_{eff}$  y velocidad constante  $\vec{u}_c$  en el finito.

$$\vec{F}_{arras} = \vec{F}_m \tag{2.45}$$

Entonces,

$$a_m = \frac{V_p}{6\pi\eta_{eff}R} \frac{M_s}{H} \tag{2.46}$$
Donde  $M_s$  es la magnetización en saturación, R el radio de la partícula,  $V_p$  el volumen de la misma y  $\eta_{eff}$  es la viscosidad efectiva del fluido gaseoso en régimen de transición.

### CAPITULO III MARCO METODOLÓGICO.

## 3.1. Ecuación de transporte de Boltzmann en la aproximación del tiempo de relajación con simetría axial en coordenadas esféricas.

El problema a resolver es el de una esfera que se mueve con una velocidad uniforme  $\vec{u}_c$ a través de un gas diluido en régimen de transición. Este problema fue planteado y resuelto por Stokes para un fluido viscoso en el régimen del continuo, en nuestro caso el gas se encuentra en el régimen de transición, por lo tanto, se deben considerar correcciones a órdenes superiores para los tensores de presión tal como lo muestra la ecuación (2.33), en otras palabras, se obtendrá una extensión de la Formula de Stokes valedera en el régimen de transición [16,17].

Tal como lo plantea Stokes, el problema del movimiento de una esfera es exactamente equivalente al del flujo que pasa alrededor de una esfera fija, teniendo el fluido una velocidad constante  $\vec{u}_c$  en el infinito. También se admitió que este movimiento se realiza con un numero de Reynolds,  $R_e \ll 1$  [2], entonces el flujo es laminar y axial-simétrico.

Con un  $R_e$  pequeño es flujo que pasa sobre la esfera es estacionario, de esta manera y sin fuerza externa actuando sobre el sistema la E.T.B en la aproximación del tiempo de relajación en coordenadas esféricas con simetría axial está dada por [ver apéndice A-4],

$$\xi_r \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{\xi_\theta}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} + \dot{\xi}_r \frac{\partial f}{\partial \xi_r} + \dot{\xi}_\theta \frac{\partial f}{\partial \xi_\theta} + \dot{\xi}_\phi \frac{\partial f}{\partial \xi_\phi} = -\frac{f - f^{[0]}}{\tau}$$
(3.1)

Donde  $r \neq \theta$  son las coordenadas esféricas-polares determinadas según un sistema de coordenadas inercial (x, y, z) con origen en el centro de la esfera,  $\xi_r$ ,  $\xi_\theta \neq \xi_\phi$  son las velocidades moleculares en coordenadas esféricas  $y \quad \dot{\xi}_r \equiv \frac{1}{r}(\xi_\theta^2 + \xi_\phi^2), \quad \dot{\xi}_\theta \equiv \frac{1}{r}(\xi_\theta^2 - \xi_r\xi_\theta), \quad \dot{\xi}_\phi \equiv -\frac{1}{r}\xi_\phi(\xi_\theta ctg\theta + \xi_r)$  son las aceleraciones debidas al cambio de

coordenadas (x, y, z) al  $(r, \theta)$ . De manera más simplificada podemos escribir la ecuación (3.1) de la forma,

$$\xi_i \frac{\partial f}{\partial r_i} + \dot{\xi}_i \frac{\partial f}{\partial \xi_i} = -\frac{f - f^{[0]}}{\tau}$$
(3.2)

Donde  $i = r, \theta, \phi$ .

# **3.2. Linealización y criterio de aproximación del Radio crítico para la E.T.B en el tiempo de relajación.**

La presencia del término no lineal en la ecuación de Navier-Stokes hace que la solución de la ecuación de movimiento sea muy difícil de obtener para cualquier campo de flujo. Pero sin embargo, se pueden obtener soluciones aproximadas siempre y cuando el término viscoso  $(\eta/\rho)\nabla^2 \vec{u}$  sea considerable respecto al término inercial  $\vec{u} \cdot \nabla \vec{u}$ , en otras palabras,

$$\left(\vec{u}\cdot\vec{\nabla}\right)\vec{u}\ll(\eta/\rho)\nabla^{2}\vec{u} \tag{3.3}$$

Usando las cantidades característica u y l podemos determinar el orden de magnitud de los términos involucrados en la expresión (3.3), así obtenemos para  $\vec{u} \cdot \nabla \vec{u}$  es  $u^2/l$ , mientras que para  $(\eta/\rho)\nabla^2 \vec{u}$  es  $\eta u/\rho l^2$ . La razón entre estas dos cantidades es lo que se conoce como el número de Reynolds,  $R_e$ . Si el número de Reynolds es muy pequeño entonces la ecuación de Navier-Stokes se puede expresar como,

$$\nabla^2 \vec{u} - \vec{\nabla} p = 0 \tag{3.4}$$

Este criterio de aproximación se extiende para términos no lineales de órdenes superiores, es decir, derivadas no lineales de segundo y tercer orden. Por otro lado, para

mantener el fluido en un estado estable se debe cumplir que la velocidad del fluido debe de ser mucho más pequeña que la velocidad más probable dada por,

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{2kT}{m}}$$

Es conocido, que aún para números de Reynolds muy pequeños la validez de esta linealización es cuestionable, esto se puede apreciar usando la solución de la ecuación (3.4) para un flujo que pasa sobre una esfera [2]. A grandes distancias de la esfera la solución se comporta como u/r y el cálculo de las derivadas en estas condiciones para el termino inercial es  $\frac{u^2}{r^2}$  y para el termino viscoso es  $(\eta/\rho)\frac{u}{r^3}$ , es inmediato entonces que a grandes distancia de la esfera  $\frac{u^2}{r^2} \gg (\eta/\rho)\frac{u}{r^3}$ , en otras palabras a pesar de que el número de Reynolds es pequeño los términos inerciales son considerables lejos de la esfera. En consecuencia, la solución obtenida para la ecuación (3.4) no es válida a grandes distancias de la esfera, lo que introduce un criterio para el rango de variación de la variable r; donde este criterio está determinado por lo que se conoce como radio crítico,  $r_c$ . El rango de variación de r está acotado por,

$$r \ll \frac{\eta}{\rho u} = r_c \tag{3.5}$$

Una justificación para lo antes expuesto es que para un fluido con  $R_e \ll 1$  la velocidad  $\vec{u}$  del fluido varia lentamente a lo largo de las líneas de corriente. Basándonos en esto podemos separar el problema en dos regiones, ver figura 7, en las que se pueden utilizar las soluciones dadas en la fórmula de Stokes para el rango  $R \leq r \ll r_c$ , y las soluciones de Oseen[60] para distancias mayores o iguales a  $r_c$ . En nuestro caso solo estamos interesados en la región  $R \leq r \ll r_c$ , ya que para  $R_e \ll 1$  las líneas de corrientes se ven perturbadas en las cercanías de la partícula.



Figura 7. Rango de validez de la solución de Stokes y Oseen.

Por lo tanto, una de las consecuencias del criterio del radio crítico es que los términos del orden de  $\frac{1}{r^2}$  son considerables que los términos del orden de  $\frac{1}{r}$ , esto se usó para determinar los términos de mayor interés en nuestras expresiones.

#### 3.3. Correcciones de la función de distribución hasta tercer orden.

Con  $f^{[0]}$  dada por:

$$f^{[0]} = n \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{3/2} e^{-\frac{\alpha}{2} \left[(\xi_r - u_r)^2 + (\xi_\theta - u_\theta)^2 + \xi_\phi^2\right]}$$

y  $\vec{u}$  definida de la forma,

$$\vec{u}(r,\theta) \equiv [u_r(r,\theta), u_\theta(r,\theta)]$$

Se determinó la función de distribución perturbada usando la ecuación (2.23) truncada hasta tercer orden. Utilizando el método perturbativo dado por las relaciones (2.25)-

(2.28) se realizaron las derivadas correspondientes aplicando el criterio de linealización dado en la sección 3.2, de esta manera se obtuvieron las correcciones a la función de distribución hasta tercer orden [ver apéndice A-5]:

$$f^{[1]} = -\alpha f^{[0]} \Lambda \,, \tag{3.6}$$

$$f^{[2]} = \alpha f^{[0]} \left[ U_{\beta} U_{\gamma} \frac{U_{\epsilon}}{h_{\epsilon}} \frac{\partial \Lambda_{\beta\gamma}}{\partial q^{\epsilon}} + 2\dot{\xi}_{\gamma} U_{\beta} \Lambda_{\beta\gamma} \right]$$
(3.7)

у

$$f^{[3]} = -\alpha f^{[0]} \left[ U_{\beta} U_{\gamma} U_{\epsilon} \frac{U_{\omega}}{h_{\omega}} \frac{\partial}{\partial q^{\omega}} \left( \frac{1}{h_{\epsilon}} \frac{\partial \Lambda_{\beta\gamma}}{\partial q^{\epsilon}} \right) + 4 \dot{\xi}_{\beta} U_{\gamma} U_{\epsilon} \left( D_{\epsilon} \Lambda_{\beta\gamma} \right) \right]$$
$$+ U_{\beta} U_{\gamma} \dot{\xi}_{\epsilon} \left( D_{\epsilon} \Lambda_{\beta\gamma} \right) + 2 U_{\epsilon} U_{\beta} \left( D_{\epsilon} \dot{\xi}_{\gamma} \right) \Lambda_{\beta\gamma} + 2 U_{\beta} \dot{\xi}_{\epsilon} \left( \frac{\partial \dot{\xi}_{\gamma}}{\partial \xi_{\epsilon}} \right) \Lambda_{\beta\gamma} + 2 \dot{\xi}_{\beta} \dot{\xi}_{\gamma} \Lambda_{\beta\gamma} \right]$$
(3.8)

Donde  $\Lambda \equiv U_{\beta}U_{\gamma}\Lambda_{\beta\gamma}$ , U es la velocidad relativa definida como  $\vec{U} \equiv \vec{\xi} - \vec{u}$  y  $\tau$  y n son constantes.

#### 3.4. Corrección de Burnett y súper-Burnett para el tensor de presiones.

Los campos tensoriales para un gas diluido están dados por [28],

$$P_{\gamma\beta} = m \int d^3 U f U_{\gamma} U_{\beta} \tag{3.09}$$

Donde el tensor de presiones está definido como un tensor simétrico con traza nula [46], esto es:

$$P_{\gamma\beta} = P_{\beta\gamma} \tag{3.10}$$

$$\sum_{\gamma=1}^{3} P_{\gamma\gamma} = 0 \tag{3.11}$$

Usando f dada por (2.23) con (3.6),(3.7) y (3.8), el flujo de momento quedan expresadas como,

$$P_{\gamma\beta} = P_{\gamma\beta}^{[0]} + P_{\gamma\beta}^{[1]} + P_{\gamma\beta}^{[2]} + P_{\gamma\beta}^{[3]}$$
(3.12)

Donde,

$$P_{\gamma\beta}^{[0]} = m \int d^3 U f^{[0]} U_{\gamma} U_{\beta} = p_{\infty} \delta_{\gamma\beta} = n k_B T , \qquad (3.13)$$

$$P_{\gamma\beta}^{[1]} = m \int d^3 U f^{[1]} U_{\gamma} U_{\beta} , \qquad (3.14)$$

$$P_{\gamma\beta}^{[2]} = m \int d^3 U f^{[2]} U_{\gamma} U_{\beta} , \qquad (3.15)$$

у

$$P_{\gamma\beta}^{[3]} = m \int d^3 U f^{[3]} U_{\gamma} U_{\beta}.$$
(3.16)

Siendo  $p_{\infty}$  la presión hidrostática constante en el infinito. Los términos de segundo y tercer orden son conocidos como correcciones de Burnett y super-Burnett para el flujo de momento, las cuales mejoran la descripción que dan las ecuaciones de Navier-Stokes, en la capa de Knudsen.

Obtenidas las correcciones del tensor de presiones, hasta tercer orden en el tiempo de relajación, integrando en el espacio de velocidades y usando el criterio de radio crítico antes discutido, se escriben las componentes del campo tensorial como es costumbre [ver apéndice A-6],

$$P_{rr} = p - 2\eta \Lambda_{rr} - 4\zeta \left[ \nabla^2 \Lambda_{rr} - \frac{6}{r^2} \Lambda_{rr} \right], \qquad (3.17)$$

$$P_{\theta\theta} = p - 2\eta \Lambda_{\theta\theta} - 4\zeta \left[ \nabla^2 \Lambda_{\theta\theta} - \frac{6}{r^2} \Lambda_{\theta\theta} \right], \qquad (3.18)$$

$$P_{\phi\phi} = p - 2\eta\Lambda_{\phi\phi} - 4\zeta \left[\nabla^2\Lambda_{\phi\phi} - \frac{6}{r^2}\Lambda_{\phi\phi}\right]$$
(3.19)

у

$$P_{r\theta} = -2\eta\Lambda_{r\theta} - 4\zeta \left[\nabla^2\Lambda_{r\theta} - \frac{4}{r^2}\Lambda_{r\theta}\right].$$
(3.20)

Donde,

$$\Lambda_{rr} = \frac{\partial u_r}{\partial r}, \ \Lambda_{\theta\theta} = \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{u_r}{r}, \ \Lambda_{\phi\phi} = \frac{u_r}{r} + \frac{\cot\theta}{r} u_\theta \text{ y } \Lambda_{r\theta} = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} + \frac{\partial u_\theta}{\partial r} - \frac{u_\theta}{r} \right).$$

# 3.5. Determinación de los esfuerzos normales y cizallantes en la superficie de la partícula.

En los cálculos realizados por Machado en el 2006 [44], para un flujo que pasa sobre una partícula esférica en régimen de transición utilizando el método de la integral de caminos como aproximación para la E.T.B., se obtuvieron expresiones en coordenadas rectangulares para los tensores de esfuerzos hasta tercer orden tales como,

$$P_{\gamma\beta} = p\delta_{\gamma\beta} - 2\eta\Lambda_{\gamma\beta} - 2\zeta\nabla^2\Lambda_{\gamma\beta}$$
(3.21)

Los cuales satisfacen la ecuación del movimiento,

$$\nabla^4 \vec{u} + \omega^2 \nabla^2 \vec{u} = k \vec{\nabla} p \tag{3.22}$$

En la cual  $\omega^2 = \frac{\eta}{\zeta}$ ,  $k = \frac{1}{\zeta}$  y la que es independiente del sistema de coordenadas.

Al transformar los tensores dados por las ecuaciones (3.17)-(3.20) a coordenadas rectangulares, donde  $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$  con i = x, y, z, se obtienen los campos tensoriales dados por la ecuación (3.21), por lo que podemos utilizar las soluciones obtenidas por Machado para la ecuación del movimiento dada por (3.22). Machado definió siguiendo el método de Landau la velocidad en el infinito como  $\vec{u}_{\infty} = u_c \cos(\theta) \hat{e}_r - u_c \sin(\theta) \hat{e}_{\theta}$  y el perfil de velocidades como  $\vec{u} = \vec{u}' + \vec{u}_{\infty}$ , donde  $\vec{u}'$  es un vector que debe ser nulo en el infinito; además, utilizo condiciones de frontera de no deslizamiento, es decir, se asumió que no existe deslizamiento sobre la superficie de la partícula de manera que,

$$\vec{u} \cdot \hat{e}_r|_{r=R} = \vec{u} \cdot \hat{e}_\theta|_{r=R} = 0 \tag{3.23}$$

Mientras que para las derivadas:

$$\frac{\hat{e}_r \cdot \vec{\nabla}(\vec{u} \cdot \hat{e}_r)|_{r=R}}{\vec{u}_{\infty} \cdot \hat{e}_r} = 0, \qquad \qquad \frac{\hat{e}_r \cdot \vec{\nabla}(\vec{u} \cdot \hat{e}_{\theta})|_{r=R}}{\vec{u}_{\infty} \cdot \hat{e}_{\theta}} = \epsilon \qquad (3.24)$$

donde  $\epsilon$  es un parámetro constante con dimensiones  $\epsilon: \left[\frac{1}{m}\right]$ , que está relacionado con las propiedades físicas y químicas asociadas a la superficie de la partícula. En el régimen continuo este parámetro está fijado con valor  $\epsilon = \frac{3}{2R}$  [2]. Para simplificar las ecuación se redefinió el parámetro  $\epsilon$  como,

$$\epsilon = \frac{\epsilon'}{R}$$

Con estas condiciones de contorno se obtuvieron las soluciones para los perfiles de velocidades del fluido, dadas por:

$$\vec{u} = g_1(r)u_c\cos(\theta)\,\hat{e}_r + g_2(r)u_c\sin(\theta)\hat{e}_\theta. \tag{3.25}$$

Donde,

$$g_{1}(r) = 1 - \frac{3}{2} \frac{R}{r} + \frac{1}{2} \left(\frac{R}{r}\right)^{3} - \frac{3}{2} k_{n} \left(1 - \frac{2}{3} \epsilon'\right) \left(1 - \frac{R^{2}}{r^{2}}\right) \frac{R}{r} \cot\left(\frac{1}{k_{n}}\right) + 3k_{n}^{2} \left(1 - \frac{2}{3} \epsilon'\right) \left(\frac{\sin\left(\frac{r}{k_{n}R}\right)}{\sin\left(\frac{1}{k_{n}}\right)} - \frac{R}{r}\right) \left(\frac{R}{r}\right)^{2} - 3k_{n}^{3} \left(1 - \frac{2}{3} \epsilon'\right) \left(1 - \frac{\cos\left(\frac{r}{k_{n}R}\right)}{\cos\left(\frac{1}{k_{n}}\right)}\right) \left(\frac{R}{r}\right)^{3} \cot\left(\frac{1}{k_{n}}\right), \qquad (3.26)$$
$$g_{2}(r) = -1 + \frac{3}{4} \frac{R}{r} + \frac{1}{4} \left(\frac{R}{r}\right)^{3} + \frac{3}{2} k_{n}^{2} \left(1 - \frac{2}{3} \epsilon'\right) \left(\frac{\sin\left(\frac{r}{k_{n}R}\right)}{\sin\left(\frac{1}{k_{n}}\right)} - \frac{R}{r}\right) \left(\frac{R}{r}\right)^{2} + \frac{3}{4} k_{n} \left(1 - \frac{2}{3} \epsilon'\right) \left(1 + \frac{R^{2}}{r^{2}} - 2 \frac{\cos\left(\frac{r}{k_{n}R}\right)}{\cos\left(\frac{1}{k_{n}}\right)}\right) \frac{R}{r} \cot\left(\frac{1}{k_{n}}\right) - \frac{3}{2} k_{n}^{3} \left(1 - \frac{2}{3} \epsilon'\right) \left(1 - \frac{\cos\left(\frac{r}{k_{n}R}\right)}{\cos\left(\frac{1}{k_{n}}\right)}\right) \left(\frac{R}{r}\right)^{3} \cot\left(\frac{1}{k_{n}}\right) \qquad (3.27)$$

donde  $k_n = \frac{1}{\omega R}$ , es el número de Knudsen.

De igual manera, se utilizó el resultado obtenido por Machado para el gradiente de presión del lado derecho de la ecuación (3.22) dado por,

$$p = p_{\infty} - \frac{3}{2} \eta \frac{(\vec{u}_{\infty} \cdot \hat{e}_r)R}{r^2} \Big[ 1 + k_n \left( 1 - \frac{2}{3} \epsilon' \right) \cot\left( \frac{1}{k_n} \right) \Big].$$
(3.28)

Utilizando (3.25), (3.26) y (3.27) en las ecuaciones (3.17)-(3.20) obtenemos el cizallamiento interno de las moléculas del gas sobre la superficie de la partícula, en la siguiente figura se muestra una representación esquemática de estos tensores,



Figura 8. Representación esquemática del flujo que pasa sobre la partícula esférica de radio R. (Tomado de Machado, J. 2006)

Además, se puede demostrar con simple sustitución que,

$$\Lambda_{rr} = -2\Lambda_{\theta\theta},\tag{3.29}$$

$$\Lambda_{\theta\theta} = \Lambda_{\phi\phi} \tag{3.30}$$

Y que por lo tanto,

$$\nabla^2 \Lambda_{rr} = -2\nabla^2 \Lambda_{\theta\theta} \tag{3.31}$$

Evaluando en r = R, tenemos:

$$P_{rr}|_{r=R} = p + 8u_c R\eta \cos(\theta) \left[ K_n \left(\frac{3}{2} - \epsilon'\right) \cot\left(\frac{1}{K_n}\right) + 5K_n^2 \epsilon' \right], \qquad (3.32)$$

$$P_{\theta\theta}|_{r=R} = p - 4u_c R\eta \cos(\theta) \left[ K_n \left( \frac{3}{2} - \epsilon' \right) \cot\left( \frac{1}{K_n} \right) + 5K_n^2 \epsilon' \right], \qquad (3.33)$$

$$P_{r\theta}|_{r=R} = u_c \eta \epsilon \sin(\theta)$$

$$+12u_c R\eta \sin(\theta) \left[ \left( 1 - \frac{3}{2}\epsilon' \right) + K_n \left( 3 - \frac{1}{2}\epsilon' \right) \cot\left( \frac{1}{K_n} \right) \right]$$

$$-\frac{2}{3}K_n^2 \left( \frac{9}{2} - 7\epsilon' \right) - 5K_n^3 (3 - 2\epsilon') \cot\left( \frac{1}{K_n} \right)$$

$$(3.34)$$

#### 3.6. Corrección de la fórmula de Stokes para la fuerza de arrastre.

Como se muestra en la figura 6 la fuerza  $\vec{F}_{arras}$  es paralela a la velocidad del fluido. Tomando de la ecuación (3.21) las componentes normal y tangencial a la superficie podemos determinar el valor de la fuerza de arrastre sobre un elemento de superficie de la esfera y proyectando estas componentes en la dirección de  $\vec{u}$  [2], tenemos:

$$F_{arras} = \oint (-p\cos(\theta) + P_{rr}\cos(\theta) - P_{r\theta}\sin(\theta)) \, ds \tag{3.35}$$

Utilizando la ecuación (3.12), la corrección para la fuerza puede ser escrita de la siguiente forma,

$$F_{arras} = F^{[1]} + F^{[3]}. ag{3.36}$$

Donde,

$$F^{[1]} = \oint \left(-p\cos(\theta) + P_{rr}^{[1]}\cos(\theta) - P_{r\theta}^{[1]}\sin(\theta)\right) ds \tag{3.37}$$

у

$$F^{[3]} = \oint \left( P_{rr}^{[3]} \cos(\theta) - P_{r\theta}^{[3]} \sin(\theta) \right) ds \tag{3.38}$$

Sustituyendo (3.28), (3.32) y (3.34) y realizando la integración sobre toda la superficie de la esfera, se obtuvo:

$$F^{[1]} = 2u_c \pi R \eta \left[ 1 + \frac{4}{3} \epsilon' \right], \qquad (3.39)$$

$$F^{[3]} = 8u_c \pi R \eta \left[ 1 - \frac{2}{3}\epsilon' + K_n \left( \frac{5}{4} - \frac{2}{3}\epsilon' \right) \cot\left( \frac{1}{K_n} \right) - 12K_n^2 (1 - \epsilon') - 20K_n^3 (3 - 2\epsilon') \cot\left( \frac{1}{K_n} \right) \right],$$
(3.40)

Con (3.39) y (3.40) se obtiene la corrección para la fuerza de arrastre de Stokes de la forma:

$$\vec{F}_{arras} = 6\pi R \eta_{eff} \vec{u}_c \tag{3.41}$$

Donde

$$\eta_{eff} = \eta \left[ \frac{5}{3} - \frac{4}{9} \epsilon' + K_n \left( \frac{5}{3} - \frac{10}{9} \epsilon' \right) \cot \left( \frac{1}{K_n} \right) - 16K_n^2 (1 - \epsilon') + 80K_n^3 \left( 1 - \frac{2}{3} \epsilon' \right) \cot \left( \frac{1}{K_n} \right) \right].$$
(3.42)

#### 3.7. Determinación de las trayectorias.

Para el caso en estudio, se consideró que la presencia de la nanopartícula magnética no afecta significativamente el campo magnético externo aplicado, además solo se consideran campos magnéticos controlados por lo que se usó la ecuación 2.42 para expresar la fuerza magnética. Por otro lado, para mantener el fluido en régimen laminar la velocidad  $\vec{u}$  de la nanopartícula en un instante dado viene determinada por el

equilibrio entre la fuerza magnética y la fuerza de arrastre, ecuación 2.45, con lo que se obtuvo la ecuación de la trayectoria de la partícula:

$$d\vec{z} = \vec{u} \, dt = \left(\frac{V_p M_s}{6\pi\eta_{eff}R} \vec{\nabla}B\right) dt = \left(\frac{\mu_s}{6\pi\eta_{eff}R} \vec{\nabla}B\right) dt \tag{3.43}$$

Donde  $\mu_s$  es el momento magnético saturado. Para mantener la consistencia con el argumento utilizado en la deducción de la fuerza de arrastre de la sección 3.6 se consideraron solo gradientes de campos magnéticos constantes a lo largo del eje z [61], esto es:

$$\vec{\nabla}B = \frac{\mathrm{d}B}{\mathrm{d}z}\hat{e}_z = \frac{B_0}{z_0}\hat{e}_z \tag{3.44}$$

Donde  $B_0$  es la magnitud del campo magnético a una distancia característica  $z_0$  desde el origen del sistema de coordenadas. Podemos ver de (3.44) que es la magnitud del campo magnético B es una función lineal de z, de forma que,

$$B(z) = \frac{B_0}{z_0} z + C_2 \tag{3.45}$$

Asumiendo que  $B_0(0) = 0$ , entonces  $C_2 = 0$ , quedando,

$$B(z) = \frac{B_0}{z_0} z$$
(3.46)

Donde  $\frac{B_0}{z_0}$  es un constante.

#### **CAPITULO IV**

#### **RESULTADOS Y DISCUSIÓN**

Se obtuvo la trayectoria de una nanopartícula magnética de radio R = 25nm, integrando la ecuación (3.43), en presencia de un gradiente de campo magnético constante de  $100 \frac{T}{m}$ , suspendida en un gas diluido en régimen de transición con una susceptibilidad magnética mucho más pequeña que la de la nanopartícula y con una viscosidad en el continuo del orden de  $194.1\mu P$  [42]. Además, se admitió que la partícula tiene un momento magnético saturado del orden de  $400\mu_B$ , donde  $\mu_B = 9.274 * 10^{-24} \frac{J}{T}$  es el magnetón de Bohr [62]. En la gráfica 9 se muestra las trayectorias de la nanopartícula para un  $\eta_{eff}$  correspondiente al valor  $K_n = 1$  y diferentes valores del parámetro  $\epsilon'$ . Cuando el parámetro  $\epsilon'$  varía entre 0 y 1 las trayectorias no muestran diferencias como consecuencias de la parametrización debida a las interacciones en la interfaz solido-gas. No obstante, cuando el parámetro  $\epsilon'$  varía en el rango  $1 \le \epsilon' \le \frac{3}{2}$  las trayectorias se diferencian notoriamente debido a que las interacciones posiblemente en este caso son importantes. Como se ha dicho con anterioridad el valor  $\epsilon' = \frac{3}{2}$  esta prefijado en el continuo. Por esta razón, los análisis se harán para valores del parámetro comprendido en el intervalo  $\left[1, \frac{3}{2}\right]$ .



Figura 9. Trayectoria de una nanopartícula magnética de radio **25***nm*, suspendida en un gas diluido en régimen de transición con un  $K_n = 1$ , y en presencia de un gradiente de campo magnético constante de  $100\frac{T}{m}$ , para diferentes valores del parámetro  $\epsilon'$ .

Mediante la integración de las componentes  $P_{rr}$ ,  $P_{r\theta}$  y de la presión evaluadas sobre la superficie de la nanopartícula se obtuvo la extensión de la fórmula de Stokes, valedera en el régimen de transición, dada por la ecuación (3.41). Las figuras 10 y 11, muestran el comportamiento de la fuerza de arrastre sobre la nanopartícula, sin campo magnético externo y con una velocidad constante en el infinito  $u_c = 0.01 \frac{m}{s}$  [48], en función de su radio R o del recorrido libre medio de las moléculas del gas  $\lambda$ , para diferentes valores del parámetro  $\epsilon'$ . En las gráficas 10-a) y 10-b) podemos observar el comportamiento de  $\vec{F}_{arras}$  para el valor de a)  $\lambda = 10R_0$  y b)  $\lambda = 5R_0$ . En ambas graficas se muestra que cuando  $\epsilon'$  toma el valor de  $\frac{3}{2}$  es inmediato ver que la fuerza dada por la ecuación (3.41) se reduce a la fuerza de Stokes más un término correctivo proporcional a  $K_n^2$ , el cual es del mismo orden del ancho de la capa S reportado por Sone[15], es decir, no obstante a

que el valor de  $\epsilon' = \frac{3}{2}$  es el que corresponde al perfil de velocidades obtenidos por Stokes para el régimen continuo, la fuerza se describe el régimen de transición. Este comportamiento es característico de los fluidos confinados en régimen de transición, como se demostró en los trabajo realizado por García S., Urbina V., Araque L. y Parra [30,31], quienes observaron que para un gas diluido confinado entre dos placas planoparalelas, si las derivadas en las fronteras tienen el valor de  $\frac{2\Delta u}{L}$  entonces la viscosidad efectiva tiene valores correspondientes al continuo, aunque el sistema se encuentre con valores de  $K_n$  correspondientes al régimen de transición. Por otro lado, para valores de  $1 \le \epsilon' < \frac{3}{2}$  se observan las oscilaciones en la fuerza de arrastre que experimenta la partícula [29].

Por otro lado, en las gráficas 11-a) y 11-b) se muestra un comportamiento de la fuerza de arrastre, donde se nota que a medida que  $\lambda$  crece respecto a *R* mayor es la fuerza de arrastre que experimenta la partícula, es decir, existe una mayor trasferencia de cantidad de momento de las moléculas del gas a la partícula.



Figura 10. Fuerza de arrastre  $F_r$  en función de R para una partícula suspendida en un gas diluido en régimen de transición con una velocidad  $\vec{u}_c$  en el infinito de  $0.01\frac{m}{s}$  y un valor fijo de a)  $\lambda = 10R_0$ , b)  $\lambda = 5R_0$ , donde  $R_0 = 25nm$ , y con diferentes valores del parámetro  $\epsilon'$ .



Figura 11. Fuerza de arrastre  $F_r$  en función de  $\lambda$  para una partícula suspendida en un gas diluido en régimen de transición con una velocidad  $\vec{u}_c$  en el infinito de  $0.01\frac{m}{s}$  y un valor fijo de a) R = 25nm, b)  $R = 1\mu m$ , y con diferentes valores del parámetro  $\epsilon'$ .

En las figuras 12 y 13 se observa la dependencia de la viscosidad efectiva dada por la ecuación (3.42), en función de *R* o  $\lambda$  para diferentes valores del parámetro  $\epsilon'$ . En la gráfica 12-a) y 12-b) se observan patrones de rápida variación características de los fluidos en régimen de transición, en las que podemos observar la disminución de la separación entre las regiones de rápida variación a medida que la razón  $\lambda/R$  disminuye. De igual forma que en las gráficas anteriores, cuando el parámetro  $\epsilon' = \frac{3}{2}$  conduce a un comportamiento monotónico de la viscosidad efectiva respecto al radio de la partícula. También se observan que existe un tamaño en el radio de la partícula donde la viscosidad efectiva va aproximándose a la viscosidad en el continuo, es decir, los efectos de la capas S se van haciendo menos notorios. Esto sucede en los diferentes valores del parámetro  $\epsilon'$ , por lo tanto, este comportamiento nos indica la transición al continuo.

También se obtuvieron comportamientos de la viscosidad en función al recorrido libre medio de las moléculas del gas para valores fijos del radio de la partícula en las gráficas 13-a) y 13-b), como era de esperarse, se observa un incremento del coeficiente a medida que  $\lambda$  aumenta. El comportamiento de  $\eta_{eff}$  se aparta drásticamente del comportamiento oscilatorio dado por estos términos  $(K_n)^n \cot\left(\frac{1}{K_n}\right)$  y como  $\frac{1}{K_n}$  está contenido en  $0 < \frac{1}{K_n} < \pi$ , entonces la cotangente se puede aproximar a un desarrollo en serie.



Figura 12. Viscosidad efectiva  $\eta_{eff}$  en función de R de un gas diluido en régimen de transición con un valor fijo de a)  $\lambda = 10R_0$  b)  $\lambda = 5R_0$ , donde $R_0 = 25nm$ , y para diferentes valores del parámetro  $\epsilon'$ .



Figura 13. Viscosidad efectiva  $\eta_{eff}$  en función a  $\lambda$  de un gas diluido en régimen de transición con un valor fijo de a) R = 25nm, b)  $R = 1\mu m$ , y para diferentes valores del parámetro  $\epsilon'$ .

En las figuras 14 y 15 se muestra la velocidad magnetoforética o velocidad terminal [42] de una partícula magnética en función de su radio o del recorrido libre medio de las moléculas del gas. De igual manera que en las gráficas de fuerza y viscosidad, para las gráficas 14-a) y 14-b) se observan oscilaciones en la velocidad debidas al régimen de transición y la separación entre estas oscilaciones disminuyen a medida que la razón  $\frac{\lambda}{R}$  disminuye. También se observa que cuando  $\epsilon' = \frac{3}{2}$  la velocidad tiene un comportamiento monotónico y con un máxima bien definido, a partir del cual la velocidad comienza a disminuir. Finalmente el comportamiento mostrado en las gráficas 15-a) y 15-b) es consecuencia del comportamiento mostrado en las gráficas 11-a) y 11-b), respectivamente.



Figura 14. Velocidad magnetoforética o velocidad terminal  $u_z$  en función de R de una partícula magnética suspendida en un gas diluido en régimen de transición y en presencia de un gradiente de campo constante  $100\frac{T}{m}$ , para un valor fijo de a)  $\lambda = 10R_0$ , b)  $\lambda = 5R_0$ , donde  $R_0 = 25nm$ , y con diferentes valores del parámetro  $\epsilon'$ .



Figura 15: Velocidad magnetoforética o velocidad terminal  $u_z$  en función de R de una partícula magnética suspendida en un gas diluido en régimen de transición y en presencia de un gradiente de campo constante  $100\frac{T}{m}$ , para un valor fijo de a) R = 25nm, b)  $R = 1\mu m$ , y con diferentes valores del parámetro  $\epsilon'$ .

### CAPITULO V CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

En vista del creciente interés científico y tecnológico que tienen en la actualidad los sistemas a nanoescala, hemos estudiado la magnetoforesis de una nanopartícula superparamagnética con una fuerza de arrastre obtenida a partir de la ecuación de transporte de Boltzmann en la aproximación del tiempo de relajación, hallando una extensión de la fuerza de arrastre de Stokes que permito describir la dinámica de la partícula superparamagnética sometida a la acción de un gradiente de campo magnético constante.

Se encontró que la parametrización de las interacciones en la interfaz solido-gas no son notorias cuando el parámetro  $\epsilon'$  varía entre  $0 < \epsilon' \leq 1$ , en este caso las trayectorias no se diferencian una de la otra. Caso contrario, cuando el parámetro varía entre  $1 \leq \epsilon' \leq \frac{3}{2}$  las trayectorias se diferencias notoriamente. Hemos examinado la dependencia de la posición con el parámetro  $\epsilon'$ , el cual parametriza las interacciones solido-gas. Para un tiempo dado, esta dependencia se podría usar como un nuevo método para determinar la magnitud del parámetro  $\epsilon'$ .

También se observó un comportamiento oscilante en la fuerza de arrastre con zonas de máximas variaciones característica de la viscosidad efectiva en gases en régimen de transición, donde una explicación posible seria que el fluido localmente se aparta del régimen laminar.

Mostramos que la velocidad magnetoforética presenta un comportamiento oscilante o monotónico. Con el valor  $\epsilon' = \frac{3}{2}$  la velocidad magnetoforética presenta un comportamiento hasta  $K_n^2$  el cuál es el mismo orden de la capa S, presentando un máximo bien definido para el valor de *R*, es decir, el ancho de la capa S estable un radio máximo para el establecimiento del perfil de velocidad. Por otro lado, utilizando el

periodo de las oscilaciones en la velocidad para un recorrido medio fijo es posible establecer un nuevo método para determinar con precisión el tamaño de las partículas.

Para hacer el modelo más realista, se sugiere utilizar condiciones de contorno de deslizamiento con las cuales posiblemente se describiría mejor la interacción solido-gas [64]. Otra recomendación para extender mejor este trabajo, seria estudiar un ferrofluido diluido usando la forma generalizada de la ecuación de Navier-Stokes tratando la fuerza magnética como fuerza externa y evitando la sedimentación de las nanopartícula. También se recomienda estudiar el movimiento de una partícula superparamagnética sometida a un gradiente de campo constante y confinada en una geometría más realista, por ejemplo, una geometría cilíndrica.

Por último, y no menos importante, seria realizar el experimento que permita constatar el modelo teórico.

#### **BIBLIOGRAFIA**

- Trevor, L.; Alice, C. y Sam, E. 1998. Einstein's dissertation on the determination of molecular dimensions. En: Einstein's Miraculous Year. John, S. (ed.). Princeton University Press, New Jersey. Págs. 31-43.
- [2] Landau, L. y Lifshitz, E. 1985. Mecánica de Fluidos. Reverté S. A. Barcelona.
- [3] Sommerfeld, A. 1956. Thermodynamics and statistical mechanics, Volumen V. Academic Press, Inc. New York.
- [4] Millikan, R. A. 1910. The general law of fall of small spherical body through a gas, and its bearing upon the nature of molecular reflection from surfaces. Phys. Rev. 22:1-23.
- [5] Millikan, R. A. 1910. The isolation of an ion, a precision measurement of its charge, and the correction of Stokes's law. Cience. XXXII: 436-448.
- [6] Cercignani, C. 1975. Theory and Application of the Boltzmann Equation. Scottish Academic, Edinburgh.
- [7] Chapman, S. y Cowling, T. 1970. *The mathematical theory of non-uniform gases*. Cambridge University Press, Cambridge.
- [8] Sone, Y. 2007. *Molecular Gas Dynamics*. Theory, Techniques, and Applications. *Birkhäuser*. Boston.
- [9] Sone, Y. 1973. New king of boundary layer over a convex solid boundary in a rarefied gas. *Phys. Fluids.* 16: 1422-1424.
- [10] Sone, Y. y Aoki, K. 1977. Slightly rarefied gas flow over a specularly reflecting body. Phys. Fluids. 20: 571-576.
- [11] Sharipov, F. 2004. Heat transfer in the Knudsen layer. Phys. Rev. E 69: 061201, 1-4.
- [12] Sone, Y. 1972. Flow induced by thermal stresses in a rarefied gas. Phys. Fluids. 8:1418-1423.
- [13] Woods, L. C. 1979. Transport processes in the dilute gases over the whole range of Knudsen number. Part 1. General Theory. J. Fluid Mech. 93: 585-607.

- [14] Struchtrup, H. y Weiss, W. 2000. Temperature jump and velocity slip in the moment method. Continuum Mech. Thermodyn. 12: 1-18.
- [15] Sone, Y. y Yamamoto, K. 1971. Flow of Rarefied Gas over planewall. Phys. Fluids. 14: 919-922.
- [16] Cercignani, C. 1968. Stokes Paradox in Kinetic Theory. Phys. Fluids. 11: 303-308.
- [17] Kogan, M. N. 1966. Rarefied Gas Dynamics. Springer. Massachusetts.
- [18] Grad, H. 1949. Note on n-dimensional Hermite polinomials. Communs. Pure and Appl. Math. 2: 325-330.
- [19] Grad, H. 1949. On the kinetic theory of rarefied gases. Communs. Pure and Appl. Math. 2: 331-407.
- [20] Grad, H. 1963. Asyntotic theory of the Boltzmann equation. Phys. Fluids. 6: 147-181.
- [21] Gracia, L. y Scherer, C. 1982. Ciento diez años de teoría cinética de los gases. Revista Mexicana de Física, 28:121-148.
- [22] Chapman, S. y Cowling, T.G. 1970. The Mathematical Theory Of Non-Uniform Gases. Tercera edición. Cambridge Mathematical Library. New York.
- [23] Zhang, W., Meng, G. y Wei, X. 2012. A review on slip models for gas microflows. Microfluid Nanofluid. 13:845-882.
- [24] Salomons, E. y Mareschal, M. 1992. Usefulness of the Burnett description of strong shock waves. Physical Review Letters. 69:2
- [25] Gallis, M. A.; Torczynski, J. R. y Rader, D. J. 2004. Molecular gas dynamics observations of Chapman-Enskog behavior and departures therefrom in nonequilibrium gases. Phys. Rev. E 69: 0402201,1-4.
- [26] Bobylev, A. V. 1982. The Capman-Enskog and Grad methods for solving the Boltzmann equation. Sov. Phys. Dokl. 27: 29-31.
- [27] Agarwal, R. K.; Yun, K.-Y. y Balakrishnan, R. 2001. Beyond Navier-Stokes: Burnett equations for flow in the continuum-transition regime. Phys. Fluids. 13: 3061-3085.

- [28] Reif, F.1968. Fundamentos de la física estadística y térmica. Ediciones del Castillo, S, A. Madrid.
- [29] García-Sucre, M. y Moronta, D. 1982. Shear viscosity of a dilute gas in a weak thermal gradient. Phys. Rev. A 26: 1713-1727.
- [30] García-Sucre, M. y Mata, G. J. 1986. Oscillatory behavior of effective viscosity versus density for gases in the transition regime. Phys. Rev. A 34: 1591-1594.
- [31] Urbina-Villalba, G.; García-Sucre, M.; Araque-Lameda, L. y Parra, R. 1997. External thermal gradient dependence of the shear viscosity of helium in the transition regime. Langmuir. 13: 5739-1550.
- [32] Moronta, D. y García-Sucre, M. 1978. Viscosity model for gases in the transition regime. Phys. Rev. A 18: 756-766.
- [33] Garcia, M., Lameda, L., Parra, R. And Urbina, G. 1995. Non-monotonic dependen de of transport coefficients of gases on pressure and external thermal gradient in the transition regime. Proceedings of the third caribbean congress con fluid dynamics and the third latin-american symposium con fluid mechanics. Caracas, pp.1-8.
- [34] Bruus, H. 2008. Theoretical Microfluidics. Oxford University Prees. New York.
- [35] Scherer, C, and Figueiredo, A. 2005. Ferrofluids: Properties and Applications. Brazilian Journal of Physics, vol. 35, no. 3A.
- [36] Sun, C.; Lee, J. and Zhang, M. 2008. Magnetic Nanoparticles in MR Imaging and Drug Delivery. Elsevier, 60(11): 1252–1265
- [37] Gomez, A. 2009. Preparación de nanopartículas magnéticas uniformes y de alta cristalinidad para biomedicina. Trabajo para optar al grado de doctor. Departamento de Química Física I, Universidad Complutense de Madrid. Madrid.
- [38] Martin, A. y Gijs, M. 2004. Magnetic bead handling on-chip: new opportunities for analytical applications. Microfluid Nanofluid. 1:22-40.
- [39] Anzai Y, Blackwell KE, Hirschowitz SL, Rogers JW, Sato Y. 1994. Initial clinical experience with dextran-coated superparamagnetic iron oxide for detection of lymph node metastases in patients with head and neck cancer. Radiology. 192:709–715.

- [40] Bjornerud A, Johansson L. 2004. The utility of superparamagnetic contrast agents in MRI: theoretical consideration and applications in the cardiovascular system. NMR Biomed. 17(7):465–477.
- [41] Wadghiri YZ, Sigurdsson EM, Sadowski M, Elliott JI, Li Y, et al. 2003. Detection of Alzheimer's amyloid in transgenic mice using magnetic resonance microimaging. Magn Reson Med. 50(2):293–302.
- [42] Zborowski, M. 2008. Magnetic cell separation. En: Magnetophoresis. A comprehensive treatise. Zborowski, M. y Chalmers, J.J. (eds). Elservier Volumen 32, Oxford. Págs. 105-116.
- [43] Lameda, L. 2005. La fuerza térmica con un campo de temperatura en régimen de transición. Trabajo de ascenso. Departamento de Física, Universidad de Oriente, Cumaná.
- [44] Machado, J. 2006. Flujo que pasa sobre una partícula esférica en régimen de transición. Trabajo de pregrado. Departamento de Física, Universidad de Oriente, Cumaná.
- [45] Landau L. y Lifshitz, E. 1981. Electrodinámica de los medios continuos. Reverté S. A. Barcelona.
- [46] Huang, K. 1987. Statistical mechanics. John Wiley & Sons, Inc. Canada.
- [47] Gombosi, T. 1994. Gaskinetic theory. Cambridge university press. Cambridge.
- [48] Levich, B. 1973. Theoretical Physics: Quantum statistics and physical kinetics. Volumen 4. Wiley interscience. New York.
- [49] Marion. J. 1975. Dinámica clásica de las partículas y sistemas. Editorial Reverté. España.
- [50] Din, X. y Michaelides, E. 1997. Kinetic theory and molecular dynamics simulations of microscopic flows. Physics of fluids, 9(12):3915-3925. New Orleans.
- [51] Garcia- Sucre, M., Lameda, L.,Parra, R. y Urbina, G. 1995. Transition regime effective viscosity of a gas confined in a cylindrical geometry. Ciencia, 3(2):109-116. Venezuela.
- [52] Sone, Y. 1973. New kind of boundary layer over a convex solid boundary in a rarefied gas. Physics of fluids, 16(9):1422-1424. Japon.

- [53] Schüth, F., Lu, A.-H. y Salabas, E. 2007. Magnetic nanoparticles: Synthesis, protection, functionalization, and application. Wiley interscience, 4G:1222-1244. Weinheim.
- [54] Coey, J. 2009. Magnetism and Magnetic Materials. Cambridge university press. UK.
- [55] Segura, J. 2013. Statistical mechanics of superparamagnetic colloidal dispersion under magnetic fields. Trabajo doctoral. Departamento de Física, Universidad Autónoma de Barcelona. Barcelona.
- [56] M. Zborowski, L. R. Moore, P. S. Williams, and J. J. Chalmers. 2002. Separations Based on Magnetophoretic Mobility. Sep. Sci. Technol., 37, pp 3611– 3633.
- [57] Leong, S., Ahmad, Z. y Lim, J. 2015. Magnetophoresis of superparamagnetic nanoparticle at low field gradient: Hydrodynamic effect. The royal society of chemistry. California.
- [58] Wangsness, R. 2001. Campos electromagnetics. Limusa. México.
- [59] Cerignani, C. 2006. Slow rarefied flows: Theory and Application to Micro-Electro-Mechanical Systems. Birkhäuser Verlag. Germany.
- [60] Barchelor, G. 2000. An introduction to fluid dynamics. Cambridge university press. UK.
- [61] Benelmekki, M. y Martinz, L. 2012. Magnetophoresis of iron oxide nanoparticles: A tool for synthesis monitoring and biomagnetic applications. Nanotechnology, 7:321-336.
- [62] Harris, J., Grimaldi, J.E., Awschalom, D., Chiolero, A. y Loss, D. 2008. Excess spin and the dynamics of antiferromagnetic ferritin. PACS, 7340Gk.
- [63] Cuadros, M., Llanos, A. y Villegas, R. 2007. Nanotecnología en Medicina: Informe de síntesis de tecnología emergente. Agencia de Evaluación de Tecnologías Sanitarias de Andalucía. España.
- [64] Seyed, M. 2014. Analysis of hydrodynamic drag forces acting on suspended fine particle in porous media. LSU Doctoral Dissertations. 658. Luisiana.

### **APÉNDICES**

#### A.1 Colisiones binarias y sección eficaz de dispersión.

Describiremos el choque elástico entre dos partículas simples de masa respectiva  $m_1$  y  $m_2$ . El momento de las partículas en su estado inicial son denotados por  $\vec{p}_1$  y  $\vec{p}_2$ , respectivamente, y sus energías por  $E_1$  y  $E_2$ , con la energía cinética total  $E = p_i^2/2m_i$ .

Para simplificar el problema de colisión es conveniente hacer un cambio de variable donde el origen del sistema es trasladado a su centro de masa. La conservación de la cantidad de movimiento total y la energía total implican que,

$$\vec{P} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 = \vec{p}'_1 + \vec{p}'_2 = ctte$$
 (A-1)

$$E = E_1 + E_2 = E'_1 + E'_2 = ctte$$
 (A-2)

Las cantidades primadas corresponden al estado de las partículas después de la colisión. Por lo tanto los momentos  $\vec{p}_1$  y  $\vec{p}_2$  no son independientes, lo que implica que tienen que satisfacer siempre las relaciones (A-1) y (A-2). Definiremos la masa total *M* y la masa reducida  $\varepsilon$  del centro de masa por:

$$M \equiv m_1 + m_2$$
,  $\varepsilon \equiv \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$  (A-3)

el momento relativo queda expresado como:

$$\vec{p} \equiv \frac{m_2 \vec{p}_1 - m_1 \vec{p}_2}{m_1 + m_2} = \varepsilon (\vec{v}_1 - \vec{v}_2) = \varepsilon \vec{V}$$
 (A-4)

Donde  $\vec{V}$  es la velocidad relativa. Obteniendo  $\vec{p}_1$  y  $\vec{p}_2$  de (A-4) tenemos,

$$\vec{p}_1 = \frac{m_1}{M}\vec{P} - \vec{p}, \qquad \vec{p}_2 = \frac{m_2}{M}\vec{P} + \vec{p}$$
 (A-5)

Podemos verificar fácilmente utilizando (A-2), (A-3) y (A-4) que la energía cinética total que expresada como,

$$E = \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2\varepsilon} \tag{A-6}$$

Consideremos ahora un proceso de colisión. Consecuentemente con la ley de conservación del momento y energía se debe cumplir,

$$\vec{P} = \vec{P}', \qquad |\vec{p}| = |\vec{p}'|$$
 (A-7)

Por lo tanto, el único efecto de una colisión en estas condiciones es el cambio de dirección del momento relativo sin cambiar su módulo. El proceso de colisión puede, en consecuencia, definirse especificando simplemente el ángulo polar  $\theta$  y el azimutal  $\varphi$  entre  $\vec{p}'$  y  $\vec{p}$ , el conjunto de estos dos ángulos forman un ángulo solido denotado por  $\Omega$  y es llamado ángulo de dispersión. A continuación se muestra en la figura 16 la relación geométrica del proceso de colisión entre dos partículas basada en la ecuación (A-4), en la que se considera las cantidades de movimiento iniciales  $\vec{p}_1$  y  $\vec{p}_2$  representadas por los vectores  $\vec{AQ}$  y  $\vec{QB}$ , respectivamente. Su vector suma da la cantidad de movimiento total  $\vec{P}$ , que no varía con el tiempo. Se divide el vector  $\vec{AB}$  según la relación  $m_1:m_2$  para situar el punto 0; entonces,  $\vec{AO} = \frac{m_1}{M} \vec{P}$  y  $\vec{OB} = \frac{m_2}{M} \vec{P}$ . En consecuencia, el vector  $\vec{OQ} = \vec{p}$ . Con centro en O se dibuja una esfera de radio OQ. El momento relativo final tiene que ser tal que el vector  $\vec{OQ'} = \vec{p}'$  termine en algún punto de esta esfera, aunque no necesariamente en el plano ABQ. Las cantidades de movimiento final  $\vec{p}'_1$  y  $\vec{p'}_2$  vienen dadas sencillamente por los vectores  $\vec{AQ'}$  y  $\vec{Q'B}$ . Sus direcciones son respecto a los vectores iniciales  $\vec{p}_1$  y  $\vec{p}_2$  se deducen del diagrama.



Figura 16. Construcción geométrica, basada en (A-5) que representa un proceso de choque elástico (Tomado del Reif, F, 1986).

De igual forma que en la mecánica clásica [49], este problema de dos partículas se reduce, con un sistema de referencia que se mueve respecto a su centro de masas, a un problema de una sola partícula. En la figura 17 se ilustra el proceso de dispersión respecto a la partícula 2, considerada como fija en O, donde el ángulo polar de dispersión se representa por  $\theta$ . Clásicamente corresponden varios ángulos de dispersión a valores diferentes del parámetro *b*, distancia de máxima aproximación de las moléculas si no hubiese interacción entre ellas.



Figura 17. Dispersión clásica de una partícula (punto rojo) por otra partícula fija ubicada en O (Tomado del Huang, K. 1987).

El proceso de colisión elástica entre dos moléculas puede ser caracterizado por el diferencial de la sección transversal de colisión dentro del elemento de ángulo solido

 $d\Omega$ . Esta sección transversal depende del valor absoluto de la velocidad relativa de las partículas que coliden  $|\vec{V}_1 - \vec{V}_2|$  y el ángulo de dispersión  $\theta = \theta(\vec{V}_1, \vec{V}_2)$ . Entonces, el diferencial de la sección transversal de colisión de una partícula de velocidad  $\vec{V}_1$  dentro del ángulo solido  $d\Omega$  puede ser escrito de la forma,

$$d\sigma = \sigma(\vec{V}, \theta) d\Omega \tag{A-8}$$

#### A.2 Integral de colisión.

La ecuación de transporte de Boltzmann esta expresada como:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \vec{\nabla}_v f = D_C f \tag{A-9}$$

Donde  $D_C f$  se conoce como el operador de colisiones o integral de colisión. Este operador está determinado por las colisiones entre moléculas de un gas donde solo ocurren colisiones binarias entre moléculas.

Comenzaremos con el número de partículas contenidas en un volumen  $d^3r$ . Denotaremos,

$$D_{c}f \, d^{3}p_{1}d^{3}rdt = dN^{-} - dN^{+} \tag{A-10}$$

Donde  $dN^+$  es el número de moléculas que entran a  $d^3r$  por efectos de las colisiones y  $dN^-$  es el número de moléculas que salen de  $d^3r$ . Por otro lado,

$$\int f(\vec{r},\vec{p},t)d^3rd^3p = \int d^6n$$

Integrando en  $\vec{p}$  tenemos,

$$\int f(\vec{r}, \vec{p}, t) d^3 r = \int d^3 n = n(\vec{r}, t)$$
 (A-11)

Es decir,  $n(\vec{r},t)$  es la cantidad de partículas que están en un punto  $\vec{r}$  a un instante t. Consideremos una partícula fija llamada blanco y un haz que incide, entones el número de partículas que salen dispersadas por una partícula blanco es el número de partículas contenidas en un cilindro de volumen  $d\sigma |\vec{V}| dt$ ,

$$f(\vec{r}, \vec{p}'_{1}, t)d^{3}p'_{1}d\sigma |\vec{V}'|dt$$
 (A-12)

El número de partículas blanco contenidas en  $d^3r$  es,

$$f(\vec{r}, \vec{p}'_2, t) d^3r d^3p'_2$$
 (A-13)

Por lo tanto el número de partículas dispersadas es,

$$dN^{-} = f(\vec{r}, \vec{p}'_{1}, t)d^{3}p'_{1}d\sigma |\vec{V}'| dtf(\vec{r}, \vec{p}'_{2}, t)d^{3}rd^{3}p'_{2}$$
(A-14)

En las colisiones binarias existen colisiones tipo directas,

$$\{\vec{p}_1, \vec{p}_2\} \rightarrow \{\vec{p}'_1, \vec{p}'_2\}$$

Y colisiones tipo inversas,

$$\{\vec{p}_1, \vec{p}_2\} \leftarrow \{\vec{p}'_1, \vec{p}'_2\}$$

Para la colisión inversa la sección transversal de colisión es la misma que la de la colisión directa, en consecuencia, repitiendo el mismo argumento para la colisión inversa y siendo consistentes con las operaciones de simetría dadas en la sección A-1 obtenemos,

$$dN^{+} = f(\vec{r}, \vec{p}_{1}, t)d^{3}p_{1}d\sigma |\vec{V}| dt f(\vec{r}, \vec{p}_{2}, t)d^{3}rd^{3}p_{2}$$
(A-14)

Usando las cantidades obtenidas la integral de colisiones queda expresada como:

$$D_{c}f = \int (f(\vec{r}, \vec{p}'_{1}, t)f(\vec{r}, \vec{p}'_{2}, t) - f(\vec{r}, \vec{p}_{1}, t)f(\vec{r}, \vec{p}_{2}, t)) |\vec{V}| d\sigma d^{3}p_{2}$$
(A-15)

También podemos expresar la ecuación A-14 en términos de las velocidades moleculares realizando un procedimiento similar usando las velocidades de cada partícula  $\vec{v}_i$  en vez de sus momentos  $\vec{p}_i$  obteniendo,

$$D_{C}f = \int [f(\vec{r}, \vec{v}_{1}', t)f(\vec{r}, \vec{v}_{2}', t) - f(\vec{r}, \vec{v}_{1}, t)f(\vec{r}, \vec{v}_{2}, t)] |\vec{v}_{1} - \vec{v}_{2}| d\sigma d^{3}v_{2} \quad (A-16)$$

#### A.3. Ecuación de variación de los valores medios y leyes de conservación.

Como ya hemos dicho,  $n(\vec{r}, t)$  es el número medio de moléculas por unidad de volumen. Sea  $\chi(\vec{r}, \vec{v}, t)$  una función que denota una propiedad transportada de una molécula situada en el instante t cerca de  $\vec{r}$  con una velocidad próxima a  $\vec{v}$ , entonces su valor medio está definido como,

$$\langle \chi(\vec{r},t) \rangle = \frac{1}{n(\vec{r},t)} \int d^3 v f(\vec{r},\vec{v},t) \chi(\vec{r},\vec{v},t)$$
(A-16)

Deduciremos a continuación una ecuación que defina como varia  $\langle \chi(\vec{r},t) \rangle$ . Consideremos el elemento de volumen  $d^3r$ , situado entre  $\vec{r}$  y  $\vec{r} + d\vec{r}$ , que contiene  $n(\vec{r},t)d^3r$  moléculas. En un intervalo de tiempo t y t + dt el valor medio total  $\langle nd^3r\chi \rangle$  de la magnitud  $\chi$  para todas las moléculas que hay en  $d^3r$  se incrementan de la forma,

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle n\chi \rangle d^3r dt = A_{int} + A_{flux} + A_{col} \tag{A-17}$$

Donde las A es representan las variaciones de las diversas aportaciones definidas como:
Debido a que  $\chi(\vec{r}, t)$  varia para cada molécula de  $d^3r$ , existe un incremento intrínseco  $A_{int}$  en el valor medio total  $\chi$ . Para un tiempo dt cada una de las moléculas varían de posición y velocidad, en consecuencia, el cambio en  $\chi$  debido a estas variaciones viene dado por,

$$D\chi = \frac{\partial\chi}{\partial t} + \frac{\partial\chi}{\partial x_{\alpha}} v_{\alpha} + \frac{\partial\chi}{\partial v_{\alpha}} \frac{F_{\alpha}}{m}$$
(A-18)

Donde  $x_{\alpha}$  y  $v_{\alpha}$  son las componentes cartesianas respecto a las vectores  $\vec{r}$  y  $\vec{v}$ . Por lo tanto, el incremento intrínseco en el valor medio de  $\chi$  en  $d^3r$  viene dado por,

$$A_{int} = \langle nd^3 \vec{r} D\chi dt \rangle = nd^3 r dt \langle D\chi \rangle \tag{A-19}$$

Dado que *n* no depende de la velocidad se puede sacar de los corchetes.

Por otro lado, existe un incremento  $A_{flux}$  en el valor medio total de  $\chi$  en  $d^3r$  debido al flujo neto de moléculas que entran en el elemento de volumen  $d^3r$  en el tiempo dt. En la figura 18 se ilustra que el incremento en el valor medio  $\chi$  originado por moléculas que entran en el elemento de volumen en el tiempo dt, a través de la cara en  $x_1$ , es el valor medio contenido en el volumen  $v_1 dt dx_2 dx_3$ , esto es,

$$\langle n\chi[v_1 dt dx_2 dx_3] \rangle.$$
 (A-20)

La disminución correspondiente en el valor medio de  $\chi$  debida a las moléculas que salen a través de la cara en  $x_1 + dx_1$  viene dada por,

$$\langle n\chi v_1 dt dx_2 dx_3 \rangle + \frac{\partial}{\partial x_1} \langle n\chi v_1 dt dx_2 dx_3 \rangle dx_1$$
 (A-21)

Restando las ecuaciones A-20 y A-21 se obtiene para el incremento neto del valor medio de  $\chi$  debido a las moléculas que entran y salen a través de estas dos caras el valor:

$$-\frac{\partial}{\partial x_1} \langle n \chi v_1 dt d^3 r \rangle \tag{A-22}$$

Sumando las aportaciones de todas las demás caras se obtiene



Figura 18. Proyección en dos dimensiones del elemento de volumen  $d^3r$ . (Tomado del Reif, F. 1965)

Finalmente, hay un incremento  $A_{col}$  en el valor medio total de  $\chi$  en  $d^3r$  a causa de las colisiones entre las moléculas de este elemento de volumen. En una tal colisión en que una molécula con velocidad  $\vec{v}$  choca con otra de velocidad  $\vec{v}_1$ , y las moléculas salen con velocidades finales respectivas  $\vec{v}'$  y  $\vec{v}'_1$ , la variación de  $\chi$  es igual a

$$\Delta \chi = \chi' + \chi'_{1} - \chi - \chi_{1}$$
 (A-24)

Siendo,

$$\chi \equiv \chi(\vec{r}, \vec{v}, t), \qquad \chi_1 \equiv \chi(\vec{r}, \vec{v}_1, t),$$
$$\chi' \equiv \chi(\vec{r}, \vec{v}', t), \qquad \chi'_1 \equiv \chi(\vec{r}, \vec{v}'_1, t),$$

El número de estas colisiones viene dado por,

$$[|\vec{v} - \vec{v}_1| f(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3 \vec{v}] [\sigma' d^3 v' d^3 v'_1] [f(\vec{r}, \vec{v}_1, t) d^3 r d^3 v_1]$$
(A-25)

en la que se asume la hipótesis del caos molecular. Por lo tanto,  $A_{col}$  se obtiene multiplicando este número por  $\Delta \chi$  y sumando para todas las velocidades posibles  $\vec{v}$  y  $\vec{v}_1$ de las moléculas y para todas las velocidades finales posibles. Debido a que la suma A-25 se hace para todas las velocidades moleculares, cada par de moléculas que chocan se cuentan dos veces, el resultados de esta suma se divide entre 2,

$$A_{col} = \frac{1}{2} d^3 r dt \int d^3 v \, d^3 v_1 d^3 v' d^3 v'_1 f f_1 V \sigma' \Delta \chi \tag{A-26}$$

Sustituyendo A-19, A-23 y A-26 en A-17 tenemos,

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle n\chi \rangle = n \langle D\chi \rangle - \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \langle nv_{\alpha}\chi \rangle + \Theta(\chi)$$
(A-27)

Donde  $\Theta(\chi)$  es la velocidad de variación de  $\chi$ , por unidad de volumen, a causa de las colisiones. Esta ecuación también se denomina ecuación de variación de Enskog.

La ecuación A-27 se hace sencilla si  $\chi$  se refiere a una cantidad que se conserva en la colisión entre las moléculas de forma que  $\Delta \chi = 0$ . Es decir,  $\Theta(\chi) = 0$  y la ecuación A-27 se reduce a:

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle n\chi \rangle + \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \langle n\nu_{\alpha}\chi \rangle = n \langle D\chi \rangle \tag{A-28}$$

Las magnitudes que se conservan en una colisión son, en primer lugar, cualquier constante, en particular la masa m de una molécula. También se conservan cada una de las componentes de la cantidad de movimiento total de las moléculas que chocan. Y finalmente, suponiendo que la energía interna de todas las moléculas permanecen invariables en las colisiones, la energía cinética total de las moléculas que chocan se

conserva también. Estas leyes de conservación llevan a cinco casos correspondientes en los que  $\Delta \chi = 0$ .

De la ecuación A-28 se obtienen entonces cinco leyes correspondientes de conservación satisfechas por el gas, las cuales son:

Conservación de la masa, si  $\chi = m$ , la ecuación A-28 queda,

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle nm\rangle + \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}}\langle nv_{\alpha}m\rangle = 0 \tag{A-29}$$

y la cantidad nm es la densidad del gas, que se puede escribir en forma general,

$$\rho(\vec{r}.t) = mn(\vec{r}.t) \tag{A-30}$$

Y el promedio  $\langle v_{\alpha} \rangle$ , es la componente de la velocidad media del gas  $u_{\alpha}$ . Entonces la ecuación () se reduce a,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \langle \rho u_{\alpha} \rangle = 0 \tag{A-31}$$

y se conoce como ecuación de continuidad en la hidrodinámica, la cual es la condición macroscópica necesaria que garantiza la conservación de la masa.

Conservación del momento, de otra manera, si  $\chi = mv_{\alpha}$ , entonces la ecuación A-28 se expresa,

$$\frac{\partial}{\partial t}(n\langle mv_{\alpha}\rangle) + \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}}(n\langle mv_{\beta}v_{\alpha}\rangle) = n\langle m\frac{dv_{\alpha}}{dt}\rangle \tag{A-32}$$

Con,

$$\frac{dv_{\alpha}}{dt} = \frac{\partial v_{\alpha}}{\partial v_{\beta}} \frac{\partial v_{\beta}}{\partial t} = \frac{F_{\beta}}{m} \delta_{\alpha\beta} = \frac{F_{\alpha}}{m}$$
(A-33)

Entonces la ecuación A-32 queda,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_{\alpha}) + \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} (\rho \langle v_{\beta} v_{\alpha} \rangle) = \rho F'_{\alpha}$$
(A-34)

Donde  $F'_{\alpha} = \frac{F_{\alpha}}{m}$ .

El término  $\langle v_{\beta}v_{\alpha}\rangle$  se puede expresar en función de la velocidad peculiar  $\vec{U}$  y la velocidad del fluido  $\vec{u}$ , entonces,

$$\langle v_{\beta}v_{\alpha}\rangle = \langle u_{\beta}u_{\alpha} + U_{\beta}U_{\alpha} + u_{\beta}U_{\alpha} + U_{\beta}u_{\alpha}\rangle \tag{A-35}$$

Y además  $u_{\beta} \langle U_{\alpha} \rangle = u_{\alpha} \langle U_{\beta} \rangle = 0$ , por lo tanto

$$\langle v_{\beta}v_{\alpha}\rangle = u_{\beta}u_{\alpha} + \frac{P_{\alpha\beta}}{\rho}$$
 (A-36)

Donde,

$$P_{\alpha\beta} \equiv \rho \langle U_{\beta} U_{\alpha} \rangle \tag{A-37}$$

La cual da el flujo neto de momento transferido por las moléculas del gas, cuando existen inhomogenidades en el perfil de velocidades del fluido. Los subíndices denotan lo siguiente: el primero designa la dirección de la componente del momento transportada y el segundo la componente de la velocidad del fluido.

Entonces, usando la definición dada, la ecuación A-34 queda,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_{\alpha}) + \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}}(\rho u_{\beta} u_{\alpha}) = -\frac{\partial P_{\alpha\beta}}{\partial x_{\alpha}} + \rho F'_{\alpha}$$
(A-37)

La cual se conoce como la ecuación de movimiento de Navier-Stokes, y se puede expresar de otra manera si se considera la ecuación de continuidad A-31:

$$\rho \frac{du_{\alpha}}{dt} = -\frac{\partial P_{\alpha\beta}}{\partial x_{\alpha}} + \rho F'_{\alpha} \tag{A-38}$$

Expresada de esta forma se determina que la velocidad de deformación de un elemento de fluido es proporcional a las tensiones del fluido circundante.

*Conservación de la energía*. Finalmente, haciendo  $\chi = \frac{1}{2}mv_{\alpha}^{2}$ , entonces, la ecuación A-28 queda,

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{2} \rho \langle v_{\alpha}^{2} \rangle \right) + \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \left( \frac{1}{2} \rho \langle v_{\beta} v_{\alpha}^{2} \rangle \right) = n \left\langle \frac{d}{dt} (m v_{\alpha}^{2}) \right\rangle \tag{A-39}$$

Esta ecuación, puede transformarse usando la relación  $u_{\alpha} = U_{\alpha} + u_{\alpha}$ , obteniendo,

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho u_{\alpha}^{2}\right) + \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \left(\frac{1}{2} \rho u_{\beta} u_{\alpha}^{2}\right) + \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho U_{\alpha}^{2}\right) + \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \left(\frac{1}{2} \rho u_{\beta} U_{\alpha}^{2}\right) = +\rho u_{\alpha} F_{\alpha} - \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \left(\frac{1}{2} \rho \langle U_{\alpha}^{2} U_{\beta} \rangle - u_{\alpha} P_{\alpha\beta}\right)$$
(A-40)

la cual se expresará en función de las variables macroscópicas que describen al fluido, usando la ecuación A-37. Multiplicando ambos lados de la ecuación A-37 por  $u_{\alpha}$  se obtiene,

$$u_{\alpha}\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_{\alpha}) + u_{\alpha}\frac{\partial}{\partial x_{\beta}}(\rho u_{\alpha}u_{\beta}) = -u_{\alpha}\frac{\partial P_{\alpha\beta}}{\partial x_{\beta}} + \rho u_{\alpha}F'_{\alpha}$$
(A-41)

El lado izquierdo de esta relación se puede reescribir usando la relación,

$$\rho\left(\frac{\partial A}{\partial t} + u_{\beta}\frac{\partial A}{\partial x_{\beta}}\right) = \frac{\partial}{\partial t}(\rho A) + \frac{\partial}{\partial x_{\beta}}(\rho u_{\beta} A)$$
(A-42)

Obteniendo,

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \rho \frac{u_{\alpha}^{2}}{2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \left( \rho u_{\beta} \frac{u_{\alpha}^{2}}{2} \right) = -u_{\alpha} \frac{\partial P_{\alpha\beta}}{\partial x_{\beta}} + \rho u_{\alpha} F'_{\alpha}$$
(A-43)

Restando las ecuaciones A-43 y A-40 se obtiene

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{2} \rho \langle U_{\alpha}^{2} \rangle \right) + \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \left( \frac{1}{2} \rho \langle U_{\alpha}^{2} U_{\beta} \rangle + \frac{1}{2} \rho u_{\beta} \langle U_{\alpha}^{2} \rangle \right) + \rho \langle U_{\alpha} U_{\beta} \rangle \frac{\partial u_{\alpha}}{\partial x_{\beta}} = 0 \quad (A-44)$$

Si se define, las siguientes cantidades:

$$E_c = \frac{1}{2}\rho \langle U_{\alpha}^2 \rangle \tag{A-45}$$

$$q_{\beta} = \frac{1}{2} \rho \langle U_{\alpha}^{2} U_{\beta} \rangle \tag{A-46}$$

Entonces se puede escribir la ecuación A-44 como,

$$\frac{\partial E_c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \left( q_{\beta} + u_{\beta} E_c \right) + P_{\alpha\beta} \frac{\partial u_{\alpha}}{\partial x_{\beta}} = 0 \tag{A-47}$$

donde  $E_c$  es la energía cinética por unidad de volumen de un elemento de fluido, y  $q_\beta$  el flujo de calor. El primer término de esta relación expresa la variación de  $E_c$  y el segundo representa el flujo de la energía cinética por unidad de volumen, relacionado con las fluctuaciones de velocidad, más la energía disipada por la fricción interna y un flujo de calor.

# A.4. Ecuación de transporte de Boltzmann en la aproximación del tiempo de relajación expresada en coordenadas esférico-axial.

Se sabe que la energía cinética, *K*, permanece invariante ante un cambio de coordenadas. Escribiremos el lado izquierdo de la ecuación (2.22) en coordenadas generalizadas utilizando el principio de Hamilton y las ecuaciones de Lagrange para movimientos inerciales [49]. Denotaremos q<sup>i</sup> (i = 1,2,3) como la i-ésima coordenada generalizada y  $p^{i} = \dot{q}^{i}(i = 1,2,3)$  su derivada en el tiempo. Sabemos que f es una función de las coordenadas cartesianas  $x_{i}$  y de las correspondientes velocidades moleculares  $v_{i}$ , en coordenadas generalizadas expresaremos f en términos de  $q^{i}$  y de los momentos cinéticos  $p_{i}$  de manera que  $f = f(q^{i}, p_{i})$ .

$$v_i \frac{\partial f}{\partial x_i} = p^i \frac{\partial f}{\partial q^i} + p^i \frac{\partial p_i}{\partial q^i} \frac{\partial f}{\partial p_i}$$
(A-48)

Utilizando las ecuaciones de Lagrange,

$$p^{i} = \frac{\partial K}{\partial p_{i}} \tag{A-49}$$

$$\dot{p}_i = \frac{\partial K}{\partial q^i} \tag{A-50}$$

Podemos rescribir la ecuación A-48 como [59],

$$v_i \frac{\partial f}{\partial x_i} = p^i \frac{\partial f}{\partial q^i} + \frac{\partial K}{\partial q^i} \frac{\partial f}{\partial p_i}$$
(A-51)

Donde el segundo término del lado derecho de la ecuación A-51 se debe a las deformaciones de las líneas de campo de velocidad del fluido debidas a la presencia del cuerpo si no hay ninguna fuerza externa. En algunos casos es más natural expresar la dependencia de la función de distribución en la forma  $f = f(q^i, \xi_i)$  en vez de  $f = f(q^i, p_i)$ , donde los  $\xi_i$  son las velocidades moleculares. En el caso de que el cuerpo sea esférico, la ecuación A-51 queda expresada, en función de las velocidades en coordenadas esféricas, de la forma [8,17],

$$v_{i}\frac{\partial f}{\partial x_{i}} = \xi_{r}\frac{\partial f}{\partial r} + \frac{\xi_{\theta}}{r}\frac{\partial f}{\partial \theta} + \frac{1}{r}\left(\xi_{\theta}^{2} + \xi_{\phi}^{2}\right)\frac{\partial f}{\partial \xi_{r}} + \frac{1}{r}\left(\xi_{\phi}^{2}ctg\theta - \xi_{r}\xi_{\theta}\right)\frac{\partial f}{\partial \xi_{\theta}}$$

$$-\frac{1}{r}\xi_{\phi}(\xi_{\theta}ctg\theta + \xi_{r})\frac{\partial f}{\partial\xi_{\phi}}$$
(A-52)

Para simplificar la ecuación A-52 definimos las cantidades:

$$\dot{\xi}_r \equiv \frac{1}{r} \left( \xi_\theta^2 + \xi_\phi^2 \right) \tag{A-53}$$

$$\dot{\xi}_{\theta} \equiv \frac{1}{r} (\xi_{\phi}^{2} ctg\theta - \xi_{r}\xi_{\theta}) \tag{A-54}$$

$$\dot{\xi}_{\phi} \equiv \frac{1}{r} \xi_{\phi} (\xi_{\theta} ctg\theta + \xi_r) \tag{A-55}$$

Entonces,

$$v_i \frac{\partial f}{\partial x_i} = \xi_r \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{\xi_\theta}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} + \dot{\xi}_r \frac{\partial f}{\partial \xi_r} + \dot{\xi}_\theta \frac{\partial f}{\partial \xi_\theta} + \dot{\xi}_\phi \frac{\partial f}{\partial \xi_\phi}$$
(A-56)

# A.5 Función de distribución linealizada.

La función de distribución perturbada hasta tercer orden viene dada por:

$$f = f^{[0]} + \tau f^{[1]} + \tau^2 f^{[2]} + \tau^3 f^{[3]}.$$
 (A-57)

Donde cada orden de perturbación está definido por el conjunto de ecuaciones 2.25-2.28. Con  $f^{[0]}$  como,

$$f^{[0]} = n \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{3/2} e^{-\frac{\alpha}{2} \left[(\xi_r - u_r)^2 + (\xi_\theta - u_\theta)^2 + \xi_\phi^2\right]}$$
(A-58)

Entonces la ecuación 2.26 se escribe como,

$$f^{[1]} = -\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r \left[ n \left( \frac{\alpha}{2\pi} \right)^{3/2} e^{-\frac{\alpha}{2} \left[ (\xi_r - u_r)^2 + (\xi_\theta - u_\theta)^2 + \xi_\phi^2 \right]} \right]$$
(A-59)

donde  $\nabla_r$  denotan las derivadas espaciales, las cuales se expresan en coordenadas esféricas y con simetría axial, de esta manera se obtiene:

$$f^{[1]} = -\alpha \left[ \xi_r \left( U_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + U_\theta \frac{\partial u_\theta}{\partial r} \right) + \xi_\theta \left( U_r \frac{\partial u_r}{\partial \theta} + U_\theta \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} \right) -\dot{\xi}_r U_r - \dot{\xi}_\theta U_\theta - \dot{\xi}_\phi U_\phi \right] f^{[0]}$$
(A-60)

Donde  $\vec{U} \equiv \vec{\xi} - \vec{u}$ ,  $\vec{\xi} = [\xi_r, \xi_\theta, \xi_\phi]$  y  $\vec{u}(r, \theta) = [u_r(r, \theta), u_\theta(r, \theta)]$ . Utilizando el criterio de linealización expuesto en la sección 3.2 tenemos que los términos no lineales de la forma  $u_\alpha \frac{\partial u_\beta}{\partial \alpha}$  son despreciables respecto a los términos lineales y los términos de la forma  $u_\alpha u_\beta$  son despreciables si  $|\vec{u}| \ll \bar{v} = \sqrt{\frac{2}{\alpha}}$ , de manera ilustrativa, donde los términos en rojo son los términos no lineales,

$$\xi_{\alpha}^{2} = (U_{\alpha} + u_{\alpha})^{2} = U_{\alpha}^{2} + 2U_{\alpha}u_{\alpha} + u_{\alpha}^{2} \approx U_{\alpha}^{2} + 2U_{\alpha}u_{\alpha}$$
$$\xi_{\alpha}\xi_{\beta} = (U_{\alpha} + u_{\alpha})(U_{\beta} + u_{\beta}) = U_{\alpha}U_{\beta} + u_{\beta}U_{\alpha}$$
$$+ u_{\alpha}U_{\beta} + u_{\alpha}u_{\beta} \approx U_{\alpha}U_{\beta} + u_{\beta}U_{\alpha} + u_{\alpha}U_{\beta}$$

Si se utiliza el último criterio. Mientras q utilizando el primer criterio tenemos,

$$\xi_{\alpha}\frac{\partial u_{\beta}}{\partial x_{\alpha}} = (U_{\alpha} + u_{\alpha})\frac{\partial u_{\beta}}{\partial \alpha} = U_{\alpha}\frac{\partial u_{\beta}}{\partial \alpha} + u_{\alpha}\frac{\partial u_{\beta}}{\partial \alpha} \approx U_{\alpha}\frac{\partial u_{\beta}}{\partial \alpha}$$

Entonces A-60 queda expresada como:

$$f^{[1]} = -\alpha f^{[0]} \left[ U_r^2 \Lambda_{rr} + 2U_r U_\theta \Lambda_{r\theta} + U_\theta^2 \Lambda_{\theta\theta} + U_\phi^2 \Lambda_{\phi\phi} \right]$$
(A-61)

Donde,

$$\Lambda_{rr} \equiv \frac{\partial u_r}{\partial r} \tag{A-62}$$

$$\Lambda_{r\theta} \equiv \frac{1}{2} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} + \frac{\partial u_\theta}{\partial r} - \frac{u_\theta}{r} \right]$$
(A-63)

$$\Lambda_{\theta\theta} \equiv \frac{1}{r} \frac{\partial u_{\theta}}{\partial \theta} + \frac{u_r}{r} \tag{A-64}$$

$$\Lambda_{\phi\phi} \equiv \frac{1}{r} [u_r + u_\theta ctg\theta] \tag{A-65}$$

Para simplificar la escritura en A-61 definimos,

$$\Lambda \equiv U_r^2 \Lambda_{rr} + 2U_r U_\theta \Lambda_{r\theta} + U_\theta^2 \Lambda_{\theta\theta} + U_\phi^2 \Lambda_{\phi\phi}$$
(A-66)

Entonces la ecuación A-61 la expresamos como,

$$f^{[1]} = -\alpha f^{[0]} \Lambda \tag{A-67}$$

Con  $f^{[1]}$  se obtiene  $f^{[2]}$  según la ecuación 2.27, es decir

$$f^{[2]} = \vec{\nu} \cdot \vec{\nabla}_r \left[ \alpha f^{[0]} \Lambda \right] \tag{A-68}$$

Si expresamos  $\Lambda$  como,

$$\Lambda \equiv U_{\alpha} U_{\beta} \Lambda_{\alpha\beta}. \tag{A-69}$$

y  $\vec{v} \cdot \nabla_r$  como,

$$v_i \frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{\xi_\epsilon}{h_\epsilon} \frac{\partial}{\partial q^\epsilon} + \dot{\xi}_\omega \frac{\partial}{\partial \xi_\omega}$$
(A-70)

Donde,

$$\frac{\xi_{\epsilon}}{h_{\epsilon}}\frac{\partial}{\partial q^{\epsilon}} \equiv \xi_r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\xi_{\theta}}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}$$

У

$$\dot{\xi}_{\omega}\frac{\partial}{\partial\xi_{\omega}} \equiv \dot{\xi}_{r}\frac{\partial}{\partial\xi_{r}} + \dot{\xi}_{\theta}\frac{\partial}{\partial\xi_{\theta}} + \dot{\xi}_{\phi}\frac{\partial}{\partial\xi_{\phi}}$$

En las que  $h_{\omega}$  son los factores de escala en coordenadas esféricas. Entonces desarrollamos en forma compacta la ecuación A-68 despreciando los términos no lineales de la misma manera que en los cálculos anteriores, obtenemos:

$$f^{[2]} = \alpha f^{[0]} \left[ U_{\beta} U_{\gamma} \frac{U_{\epsilon}}{h_{\epsilon}} \frac{\partial \Lambda_{\beta\gamma}}{\partial q^{\epsilon}} + 2\dot{\xi}_{\gamma} U_{\beta} \Lambda_{\beta\gamma} \right]$$
(A-71)

Una vez obtenida  $f^{[2]}$  se realiza el cálculo para  $f^{[3]}$  utilizando la ecuación 2.28,

$$f^{[3]} = -\vec{\nu} \cdot \vec{\nabla}_r \left[ \alpha f^{[0]} \left( U_\beta U_\gamma \frac{U_\epsilon}{h_\epsilon} \frac{\partial \Lambda_{\beta\gamma}}{\partial q^\epsilon} + 2\dot{\xi}_\gamma U_\beta \Lambda_{\beta\gamma} \right) \right]$$
(A-72)

Desarrollando y despreciando los términos no lineales se obtiene,

$$f^{[3]} = -\alpha f^{[0]} \left[ U_{\beta} U_{\gamma} U_{\epsilon} \frac{U_{\omega}}{h_{\omega}} \frac{\partial}{\partial q^{\omega}} \left( \frac{1}{h_{\epsilon}} \frac{\partial \Lambda_{\beta\gamma}}{\partial q^{\epsilon}} \right) \right. \\ \left. + 4 \dot{\xi}_{\beta} U_{\gamma} U_{\epsilon} \left( D_{\epsilon} \Lambda_{\beta\gamma} \right) + U_{\beta} U_{\gamma} \dot{\xi}_{\epsilon} \left( D_{\epsilon} \Lambda_{\beta\gamma} \right) \right. \\ \left. + 2 U_{\epsilon} U_{\beta} \left( D_{\epsilon} \dot{\xi}_{\gamma} \right) \Lambda_{\beta\gamma} + 2 U_{\beta} \dot{\xi}_{\epsilon} \left( \frac{\partial \dot{\xi}_{\gamma}}{\partial \xi_{\epsilon}} \right) \Lambda_{\beta\gamma} + 2 \dot{\xi}_{\beta} \dot{\xi}_{\gamma} \Lambda_{\beta\gamma} \right] (A-73)$$

Sustituyendo A-67, A-71 y A-73 en A-57 se obtiene la función de distribución perturbada hasta tercer orden en la aproximación del tiempo de relajación,

$$f = f^{[0]} - \tau \alpha f^{[0]} \Lambda + \tau^2 \alpha f^{[0]} \left[ U_{\beta} U_{\gamma} \frac{U_{\epsilon}}{h_{\epsilon}} \frac{\partial \Lambda_{\beta\gamma}}{\partial q^{\epsilon}} + 2\dot{\xi}_{\gamma} U_{\beta} \Lambda_{\beta\gamma} \right]$$
$$-\tau^3 \alpha f^{[0]} \left[ U_{\beta} U_{\gamma} U_{\epsilon} \frac{U_{\omega}}{h_{\omega}} \frac{\partial}{\partial q^{\omega}} \left( \frac{1}{h_{\epsilon}} \frac{\partial \Lambda_{\beta\gamma}}{\partial q^{\epsilon}} \right) + 4\dot{\xi}_{\beta} U_{\gamma} U_{\epsilon} \left( D_{\epsilon} \Lambda_{\beta\gamma} \right)$$
$$+ U_{\beta} U_{\gamma} \dot{\xi}_{\epsilon} \left( D_{\epsilon} \Lambda_{\beta\gamma} \right) + 2U_{\epsilon} U_{\beta} \left( D_{\epsilon} \dot{\xi}_{\gamma} \right) \Lambda_{\beta\gamma} + 2U_{\beta} \dot{\xi}_{\epsilon} \left( \frac{\partial \dot{\xi}_{\gamma}}{\partial \xi_{\epsilon}} \right) \Lambda_{\beta\gamma} + 2\dot{\xi}_{\beta} \dot{\xi}_{\gamma} \Lambda_{\beta\gamma} \right].$$
(A-74)

#### A.6 Tensores de presión y el criterio del radio crítico.

Obtendremos el campo tensorial de presiones hasta tercer orden.

$$P_{\gamma\beta} = P_{\gamma\beta}^{[0]} + P_{\gamma\beta}^{[1]} + P_{\gamma\beta}^{[2]} + P_{\gamma\beta}^{[3]},$$

donde cada orden está definido por el conjunto de ecuaciones 3.13-3.16. Así para el orden cero se obtienen la presión hidrostática,

$$P_{\gamma\beta}^{[0]} = m \int d^3 U f^{[0]} U_{\gamma} U_{\beta} = p_{\infty} \delta_{\gamma\beta}$$
 (A-75)

A primer orden tenemos,

$$P_{\gamma\beta}^{[1]} = m \int d^3 U f^{[1]} U_{\gamma} U_{\beta}$$
 (A-76)

Sustituyendo A-67 según 2.23 en la ecuación anterior nos queda,

$$P_{\gamma\beta}^{[1]} = -\tau \alpha m \int d^3 U f^{[0]} \Lambda U_{\gamma} U_{\beta}$$
 (A-77)

Sustituyendo A-69 tenemos,

$$P_{\gamma\beta}^{[1]} = -\tau \alpha m \Lambda_{\alpha\beta} \int d^3 U f^{[0]} U_{\alpha} U_{\beta} \ U_{\gamma} U_{\beta}. \tag{A-78}$$

Corriendo los índices y resolviendo las integrales se tiene,

$$P_{rr}^{[1]} = -2\eta\Lambda_{rr} \tag{A-79}$$

$$P_{\theta\theta}^{[1]} = -2\eta\Lambda_{\theta\theta} \tag{A-80}$$

$$P_{\phi\phi}^{[1]} = -2\eta\Lambda_{\phi\phi} \tag{A-81}$$

$$P_{r\theta}^{[1]} = -2\eta\Lambda_{r\theta} \tag{A-82}$$

Donde  $\eta \equiv nkT\tau$  es el coeficiente de viscosidad.

Sustituyendo A-71 en 3.15 se tiene la corrección a segundo orden,

$$P_{\gamma\beta}^{[2]} = \tau^2 \alpha m \int d^3 U f^{[0]} \left[ U_\beta U_\gamma \frac{U_\epsilon}{h_\epsilon} \frac{\partial \Lambda_{\beta\gamma}}{\partial q^\epsilon} + 2\dot{\xi}_\gamma U_\beta \Lambda_{\beta\gamma} \right] U_\rho U_\omega$$

$$P_{\gamma\beta}^{[2]} = \tau^2 \alpha m \frac{1}{h_\epsilon} \frac{\partial \Lambda_{\beta\gamma}}{\partial q^\epsilon} \int d^3 U f^{[0]} U_\beta U_\gamma U_\epsilon U_\rho U_\omega$$

$$+ 2\tau^2 \alpha m \Lambda_{\beta\gamma} \int d^3 U f^{[0]} \dot{\xi}_\gamma U_\beta U_\rho U_\omega \qquad (A-83)$$

Como el integrando es una función impar de las U,

$$P_{\gamma\beta}^{[2]} = 0 (A-84)$$

Finalmente, para el tercer orden se sustituye A-73 en 3.16 obteniendo,

$$P_{\gamma\beta}^{[3]} = -\tau^{3} \alpha m \int d^{3} U f^{[0]} \left[ U_{\beta} U_{\gamma} U_{\epsilon} \frac{U_{\omega}}{h_{\omega}} \frac{\partial}{\partial q^{\omega}} \left( \frac{1}{h_{\epsilon}} \frac{\partial \Lambda_{\beta\gamma}}{\partial q^{\epsilon}} \right) \right. \\ \left. + 4 \dot{\xi}_{\beta} U_{\gamma} U_{\epsilon} \left( D_{\epsilon} \Lambda_{\beta\gamma} \right) + U_{\beta} U_{\gamma} \dot{\xi}_{\epsilon} \left( D_{\epsilon} \Lambda_{\beta\gamma} \right) \right. \\ \left. + 2 U_{\epsilon} U_{\beta} \left( D_{\epsilon} \dot{\xi}_{\gamma} \right) \Lambda_{\beta\gamma} + 2 U_{\beta} \dot{\xi}_{\epsilon} \left( \frac{\partial \dot{\xi}_{\gamma}}{\partial \xi_{\epsilon}} \right) \Lambda_{\beta\gamma} + 2 \dot{\xi}_{\beta} \dot{\xi}_{\gamma} \Lambda_{\beta\gamma} \right] U_{\sigma} U_{\rho} \qquad (A-85)$$

Aplicando el criterio de radio crítico expuesto en la sección 3.2 solo consideramos los términos de orden  $\frac{1}{r^2}$ , por lo tanto,

$$P_{\gamma\beta}^{[3]} = -\tau^{3} \alpha m \int d^{3} U f^{[0]} \left[ U_{\beta} U_{\gamma} U_{\epsilon} \frac{U_{\omega}}{h_{\omega}} \frac{\partial}{\partial q^{\omega}} \left( \frac{1}{h_{\epsilon}} \frac{\partial \Lambda_{\beta\gamma}}{\partial q^{\epsilon}} \right) \right. \\ \left. + 2 U_{\epsilon} U_{\beta} \left( D_{\epsilon} \dot{\xi}_{\gamma} \right) \Lambda_{\beta\gamma} + 2 U_{\beta} \dot{\xi}_{\epsilon} \left( \frac{\partial \dot{\xi}_{\gamma}}{\partial \xi_{\epsilon}} \right) \Lambda_{\beta\gamma} + 2 \dot{\xi}_{\beta} \dot{\xi}_{\gamma} \Lambda_{\beta\gamma} \right] U_{\sigma} U_{\rho} \quad (A-86)$$

$$P_{\gamma\beta}^{[3]} = -\tau^{3} \alpha m \frac{1}{h_{\omega}} \frac{\partial}{\partial q^{\omega}} \left( \frac{1}{h_{\epsilon}} \frac{\partial \Lambda_{\beta\gamma}}{\partial q^{\epsilon}} \right) \int d^{3} U f^{[0]} U_{\beta} U_{\gamma} U_{\epsilon} U_{\omega} U_{\sigma} U_{\rho} \\ \left. -2\tau^{3} \alpha m \Lambda_{\beta\gamma} \int d^{3} U f^{[0]} U_{\epsilon} U_{\beta} \left( D_{\epsilon} \dot{\xi}_{\gamma} \right) U_{\sigma} U_{\rho} \right. \\ \left. -2\tau^{3} \alpha m \Lambda_{\beta\gamma} \int d^{3} U f^{[0]} U_{\beta} \dot{\xi}_{\epsilon} \left( \frac{\partial \dot{\xi}_{\gamma}}{\partial \xi_{\epsilon}} \right) U_{\sigma} U_{\rho} \\ \left. -2\tau^{3} \alpha m \Lambda_{\beta\gamma} \int d^{3} U f^{[0]} \dot{\xi}_{\beta} \dot{\xi}_{\gamma} \qquad (A-87)$$

Corriendo los índices y resolviendo las integrales obtenemos,

$$P_{rr}^{[3]} = -4\zeta \left[\nabla^2 \Lambda_{rr} - \frac{6}{r^2} \Lambda_{rr}\right],\tag{A-88}$$

$$P_{\theta\theta}^{[3]} = -4\zeta \left[ \nabla^2 \Lambda_{\theta\theta} - \frac{6}{r^2} \Lambda_{\theta\theta} \right], \tag{A-89}$$

$$P_{\phi\phi}^{[3]} = -4\zeta \left[ \nabla^2 \Lambda_{\phi\phi} - \frac{_6}{_{r^2}} \Lambda_{\phi\phi} \right] \tag{A-90}$$

у

$$P_{r\theta}^{[3]} = -4\zeta \left[ \nabla^2 \Lambda_{r\theta} - \frac{4}{r^2} \Lambda_{r\theta} \right]. \tag{A-91}$$

En las que  $\zeta = 3mn \left(\frac{kT}{m}\right)^2 \tau^3$  es el coeficiente de viscosidad en el tercer orden. Entonces el campo tensorial hasta tercer orden queda expresado como,

$$P_{rr} = p - 2\eta \Lambda_{rr} - 4\zeta \left[ \nabla^2 \Lambda_{rr} - \frac{6}{r^2} \Lambda_{rr} \right], \tag{A-92}$$

$$P_{\theta\theta} = p - 2\eta \Lambda_{\theta\theta} - 4\zeta \left[ \nabla^2 \Lambda_{\theta\theta} - \frac{6}{r^2} \Lambda_{\theta\theta} \right], \tag{A-93}$$

$$P_{\phi\phi} = p - 2\eta\Lambda_{\phi\phi} - 4\zeta \left[\nabla^2\Lambda_{\phi\phi} - \frac{_6}{r^2}\Lambda_{\phi\phi}\right] \tag{A-94}$$

у

$$P_{r\theta} = -2\eta \Lambda_{r\theta} - 4\zeta \left[ \nabla^2 \Lambda_{r\theta} - \frac{4}{r^2} \Lambda_{r\theta} \right]. \tag{A-95}$$

Los cuales satisfacen las ecuaciones 3.10 y 3.11.

## **HOJAS DE METADATOS**

## Hoja de Metadatos para Tesis y Trabajos de Ascenso – 1/6

Título	MAGNETOFORESIS DE UNA NANOPARTÍCULA MAGNÉTICA EN UN GAS DILUIDO EN RÉGIMEN DE TRANSICIÓN.
Subtítulo	

## Autor(es)

Apellidos y Nombres		Código CVLAC / e-mail
Astrid Carolina Bastardo	CVLAC	20.565.814
González.	e-mail	astridcbastardog@gmail.com
	e-mail	

#### Palabras o frases claves:

Gas Diluido, Régimen de Transición, Nanopartícula Superparamagnética, Magnetoforesis.

#### Hoja de Metadatos para Tesis y Trabajos de Ascenso - 2/6

Líneas y sublíneas de investigación:

Área	Subárea
Ciencias	Física

Resumen (abstract):

Se estudió la magnetoforesis de una partícula superparamagnética suspendida en un gas diluido en régimen de transición y en presencia de un gradiente de campo magnético constante. Se determinó la fuerza de arrastre que ejerce el fluido sobre la nanopartícula resolviendo la ecuación de transporte de Boltzmann mediante el método de Chapman-Enskog, obteniendo la función de distribución molecular hasta tercer orden en la aproximación del tiempo de relajación, para hallar el campo tensorial y la ecuación del movimiento del fluido. La ecuación del movimiento se resolvió para un flujo laminar con simetría esférica-axial, en ausencia de fuerza externa y utilizando condiciones de contorno de no deslizamiento, además, se parametrizo las interacciones de la interfaz solido-gas mediante la primera derivada radial de la velocidad tangencial. Por otro lado, la fuerza magnética se determinó utilizando las ecuaciones magnetostáticas de Maxwell obteniéndose la velocidad terminal de la nanopartícula a partir de la condición del equilibrio mecánico entre la fuerza magnética y la fuerza de arrastre. Las trayectorias seguidas por la partícula se obtuvieron utilizando esta velocidad terminal las cuales demostraron ser sensibles a la parametrización de las interacciones. Además, la velocidad magnetoforética presenta un comportamiento oscilante característico del régimen de transición y un comportamiento monotónico cuando el parámetro  $\epsilon'$  toma el valor de  $\frac{3}{2}$ .

# Hoja de Metadatos para Tesis y Trabajos de Ascenso - 3/6

Contribuidores:

Apellidos y Nombres		ROL / Código CVLAC / e-mail
Prof. Luis Araque Lameda	ROL	C A X U U U
	CVLAC	2.728.346
	e-mail	aralameda@gmail.com
	e-mail	
Prof. Angel Betancourt	ROL	C     A     T     J       A     S     U     U
	CVLAC	8.434.642
	e-mail	a.e.betancourt@gmail.com
	e-mail	
Prof. Ulises Guevara	ROL	C     A     T     J       A     S     U     U
	CVLAC	12.658.034
	e-mail	ujguevara@udo.edu.ve
	e-mail	

Fecha de discusión y aprobación:AñoMesDíaColocar fecha de discusión y aprobación:201803

Lenguaje: ESPAÑOL

# Hoja de Metadatos para Tesis y Trabajos de Ascenso – 4/6

i (ombre de di em (o	Tipo MIME
Tesis-bastardoa.doc	Aplication/word
Alcance:	
Espacial:	(Opcional)
Temporal:	(Opcional)
l'ítulo o Grado asociado con el trabajo: Li	icenciado en Física
Nivel Asociado con el Trabaio: Licencia	ado
Nivel Asociado con el Trabajo: Licencia	ado
Nivel Asociado con el Trabajo: Licencia	ado
Nivel Asociado con el Trabajo: Licencia	ado
Nivel Asociado con el Trabajo: <u>Licencia</u> Área de Estudio: Física	ado
Nivel Asociado con el Trabajo: <u>Licencia</u> Área de Estudio: Física	ado
Nivel Asociado con el Trabajo: <u>Licencia</u> Área de Estudio: Física	ado
Nivel Asociado con el Trabajo: <u>Licencia</u> Área de Estudio: Física Institución(es) que garantiza(n) el Título o gr	ado
Nivel Asociado con el Trabajo: <u>Licencia</u> Área de Estudio: Física I <u>nstitución(es) que garantiza(n) el Título o g</u>	ado
Nivel Asociado con el Trabajo: <u>Licencia</u> Área de Estudio: Física I <u>nstitución(es) que garantiza(n) el Título o g</u>	ado
Nivel Asociado con el Trabajo: <u>Licencia</u> Área de Estudio: Física I <u>nstitución(es) que garantiza(n) el Título o gr</u>	ado
Nivel Asociado con el Trabajo: <u>Licencia</u> Área de Estudio: Física I <u>nstitución(es) que garantiza(n) el Título o g</u>	ado

# Hoja de Metadatos para Tesis y Trabajos de Ascenso - 5/6



UNIVERSIDAD DE ORIENTE CONSEJO UNIVERSITARIO RECTORADO

CUNº0975

Cumaná, 0 4 AGO 2009

Ciudadano **Prof. JESÚS MARTÍNEZ YÉPEZ** Vicerrector Académico Universidad de Oriente Su Despacho

Estimado Profesor Martínez:

Cumplo en notificarle que el Consejo Universitario, en Reunión Ordinaria celebrada en Centro de Convenciones de Cantaura, los días 28 y 29 de julio de 2009, conoció el punto de agenda "SOLICITUD DE AUTORIZACIÓN PARA PUBLICAR TODA LA PRODUCCIÓN INTELECTUAL DE LA UNIVERSIDAD DE ORIENTE EN EL REPOSITORIO INSTITUCIONAL DE LA UDO, SEGÚN VRAC Nº 696/2009".

Leido el oficio SIBI – 139/2009 de fecha 09-07-2009, suscrita por el Dr. Abul K. Bashirullah, Director de Bibliotecas, este Cuerpo Colegiado decidió, por unanimidad, autorizar la publicación de toda la producción intelectual de la Universidad de Oriente en el Repositorio en cuestión.

		1	
ſ	UNIVERSION RURE OF THE	hago a usted a los fines consiguientes.	
	SISTEMA DE BIBLIOTECA	Contigingente Contigination	
	Maguler	Conducting the states of the states	
	RECIBIDO POR		
	5/8/09 HORA 5=	JUAN A. BOLANOS CURPELO	
	TARGEN CONTRACTOR AND	Secretario	
		UNIVER	

C.C: Rectora, Vicerrectora Administrativa, Decanos de los Núcleos, Coordinador General de Administración, Director de Personal, Dirección de Finanzas, Dirección de Presupuesto, Contraloría Interna, Consultoría Jurídica, Director de Bibliotecas, Dirección de Publicaciones, Dirección de Computación, Coordinación de Teleinformática, Coordinación General de Postgrado.

JABC/YGC/maruja

Mr. Warmen

Apartado Correos 094 / Telfs: 4008042 - 4008044 / 8008045 Telefax: 4008043 / Cumaná - Venezuela

#### Hoja de Metadatos para Tesis y Trabajos de Ascenso- 6/6

Artículo 41 del REGLAMENTO DE TRABAJO DE PREGRADO (vigente a partir del II Semestre 2009, según comunicación CU-034-2009) : "los Trabajos de Grado son de la exclusiva propiedad de la Universidad de Oriente, y sólo podrán ser utilizados para otros fines con el consentimiento del Consejo de Núcleo respectivo, quien deberá participarlo previamente al Consejo Universitario para su autorización".

Esta hoja tiene que estar personalizada por el autor (e)s

Br. Astrid Bastardo Autor

Prof: Luis Araque Lameda Asesor