

# TESIS DOCTORAL

2018

**Análisis de Distribuciones de Carga Espacial  
emitidas por Atomización Electrohidrodinámica  
(Electrospray) en Vacío**

**CASIANO HERNÁNDEZ SAN JOSÉ**

**PROGRAMA DE DOCTORADO EN CIENCIAS  
DIRECTOR: MANUEL ARIAS ZUGASTI**

DEPARTAMENTO DE FÍSICA MATEMÁTICA  
Y DE FLUIDOS

UNIVERSIDAD NACIONAL DE EDUCACIÓN  
A DISTANCIA

---

Análisis de Distribuciones de Carga  
Espacial emitidas por Atomización  
Electrohidrodinámica (Electrospray) en  
Vacío

---

*Autor:*

Casiano HERNÁNDEZ SAN JOSÉ

*Director de la Tesis:*

Manuel ARIAS ZUGASTI

Madrid, Septiembre 2018



*A Merche*



# Agradecimientos

Deseo expresar mi agradecimiento:

- A mi director de tesis, Manuel Arias Zugasti, por la confianza que depositó en mí al darme la oportunidad de realizar este trabajo, así como por sus buenos consejos y dedicación a lo largo de todo el tiempo que ha durado la tesis.
- A los profesores Juan Fernández de la Mora (Universidad de Yale) y Francisco José Higuera Antón (Universidad Politécnica de Madrid), por sus sugerencias y comentarios.
- A las profesoras del Departamento de Física Interdisciplinar, María del Mar Montoya Lirola y Amalia Williard Torres, a quienes me une un gran afecto, por su interés en la evolución de mi trabajo.
- A Merche, mi compañera de vida, la gran artífice de que yo haya podido realizar esta tesis, por estar siempre a mi lado, en buenos y en malos momentos. No puedo olvidarme de Miguel y Nerea, mis dos hijos, que dan sentido a todo lo que hago.
- A mis padres, por su apoyo incondicional y a quienes debo todo lo que soy como persona, y a mi hermana, por confiar siempre en mí.
- A todas aquellas personas que, de una forma o de otra, se han interesado en mi trabajo durante todos estos años.



# Resumen

El método de atomización electrohidrodinámica consiste en la emisión de un spray de gotas submicrométricas cargadas eléctricamente (o electrospray), el cual se genera al aplicar un campo eléctrico con una intensidad superior a un valor crítico sobre la superficie libre de un líquido con una cierta conductividad, situado en la boca de un tubo capilar denominado emisor. Al superar este valor umbral, la superficie libre del líquido en la punta del emisor adopta la forma de un cono, denominado cono de Taylor. En la configuración más habitual, desde el vértice del cono se expelle un microchorro o *jet*, el cual, debido a la inestabilidad de Rayleigh, se rompe generando el spray de gotas cargadas.

El tamaño de las gotas que forman el electrospray depende fundamentalmente de la viscosidad, la conductividad eléctrica y la tensión superficial del líquido. En particular, las gotas producidas son más pequeñas conforme aumenta la conductividad del líquido. Por esta razón, el método de atomización electrohidrodinámica adquiere interés práctico sólo en líquidos conductores.

En la inmediata vecindad de la punta de emisión existe una región dominada por los efectos de la distribución de la carga espacial, la cual se denomina región de carga espacial. En dicha región, la repulsión electrostática mutua ejercida por las partículas domina sobre el campo eléctrico externo. Esto hace que las trayectorias seguidas por las gotas cargadas se separen rápidamente, haciendo que aumente considerablemente la anchura del spray emitido. Como consecuencia de esta rápida separación de las trayectorias, la densidad espacial de carga decae rápidamente a medida que aumenta la distancia a la punta, alcanzándose una región donde el campo externo domina sobre el campo debido a la distribución de carga espacial.

La técnica de atomización electrohidrodinámica en líquidos conductores ofrece importantes aplicaciones prácticas, por ejemplo, en el recubrimiento de membranas con sustancias catalíticas, en propulsión espacial, en encapsulado de partículas, etc. En todas estas aplicaciones, resulta fundamental predecir de manera precisa la forma del electrospray emitido, así como la intensidad máxima de corriente que puede lograrse en régimen estacionario antes de que la distribución espacial de carga emitida bloquee el electrospray. En particular, es fundamental conocer con precisión cómo varía la anchura del electrospray emitido con la distancia a lo largo del eje, ya que ello permitirá optimizar el diseño de electrodos intermedios, conocidos como extractores. Los extractores suelen emplearse para dirigir axialmente las partículas cargadas, evitando su eventual retroceso hacia el emisor debido al campo generado por la carga espacial, permitiendo de esta forma aumentar la intensidad máxima emitida por el electrospray, así como empaquetar números relativamente altos de puntas emisoras en un espacio reducido.

El objetivo de este trabajo es el análisis teórico de la distribución espacial de carga emitida



por electrosprays en vacío y en régimen estacionario. La descripción matemática del sistema se realizará por medio de la aproximación del continuo. El trabajo se centrará en la descripción de distribuciones de carga monodispersas, esto es, todas las gotas emitidas son idénticas.

El punto de partida del trabajo es el modelo Euleriano Simplificado (SEM) propuesto por J. Fernández de la Mora en 2012 para la descripción de la distribución espacial de carga emitida en un electrospray en vacío, en aproximación estacionaria y axisimétrica. En este modelo se describe un electrospray monodisperso desde un punto de vista euleriano por medio de la aproximación del continuo. De esta forma, la descripción del electrospray se realiza en términos de tres campos: la densidad numérica de gotas, el campo de velocidades de las gotas y el potencial eléctrico, los cuales dependen sólo de dos coordenadas espaciales en un sistema de referencia fijo en el laboratorio. Asumiendo que todas las partículas parten con la misma velocidad del electrodo emisor, considerado éste como una superficie equipotencial, se encuentra que el campo de velocidades de las partículas es irrotacional y, por tanto, puede describirse por medio de un potencial de velocidad. De esta forma, la descripción completa del electrospray es posible por medio de sólo tres campos escalares: el citado potencial de velocidad, junto con la densidad numérica de partículas y el potencial eléctrico. Estos tres campos escalares están determinados por tres ecuaciones en derivadas parciales: la ecuación de conservación de la energía, la ecuación de Poisson y la ecuación de continuidad, las cuales proporcionan las ecuaciones fundamentales del modelo matemático.

A pesar de la simplificación que consiste en describir el sistema por medio de sólo tres campos escalares, el problema ofrece dificultades de índole matemático. En primer lugar, el citado sistema de ecuaciones en derivadas parciales no es susceptible de ser resuelto de manera analítica ya que incluye ecuaciones no lineales, lo que implica que la resolución matemática del sistema de ecuaciones debe realizarse numéricamente. En segundo lugar, otra dificultad que se plantea tiene su origen en las singularidades características de la geometría del cono de Taylor, en particular la existente en la inmediata vecindad del vértice del cono. Estas singularidades deben resolverse de forma analítica antes de iniciar la correspondiente integración numérica del sistema.

El presente trabajo se centrará en la descripción de la distribución espacial de carga en una cierta vecindad del vértice del cono de Taylor donde los efectos de carga espacial son importantes y deben tenerse en cuenta. Esto motiva que el trabajo de esta tesis tenga tres partes diferenciadas.

1. Implementación de un método numérico que permita resolver el sistema de ecuaciones diferenciales del modelo matemático.
2. Resolución analítica de la singularidad que presenta la densidad de carga espacial en el vértice del cono, lo que permite obtener la forma asintótica de la solución cerca del vértice.
3. Aplicación de ambas estrategias con el fin de obtener una solución completa, válida, tanto en la inmediata vecindad del vértice del cono, como más lejos.

La memoria de esta tesis se distribuye en ocho capítulos y cinco apéndices. En el primer capítulo se establecen los objetivos fundamentales del trabajo. En el capítulo segundo se trata el estado del arte y la descripción de la cuestión que se investiga en el trabajo. En el capítulo

tercero se introduce el SEM y se formula matemáticamente el problema, con sus ecuaciones diferenciales en derivadas parciales y condiciones de contorno. En el cuarto capítulo se implementa un algoritmo en diferencias finitas para la resolución numérica de las ecuaciones del SEM. En el quinto y sexto capítulo se estudia, dentro del SEM, la singularidad de la densidad de carga espacial cerca del vértice, lo que proporciona el comportamiento asintótico del electropray en la inmediata vecindad del vértice. En el séptimo capítulo se aplica el algoritmo numérico del SEM en diferencias finitas, implementado y probado en el capítulo cuarto, para obtener el comportamiento del electropray lejos del vértice. En el último capítulo se enumeran las principales contribuciones al problema investigado en este trabajo y las futuras líneas de investigación que pueden derivarse del estudio realizado. Finalmente, la memoria termina con cinco apéndices con cuestiones índole matemático cuyo tratamiento puede separarse del texto principal.



# Abstract

Electrohydrodynamic atomization method consists on the emission of a spray of submicrometric electrically charged droplets (or electrospray), which is generated when an electric field beyond a critical potential is applied on the free surface of a liquid with a certain conductivity, located inside a capillary tube termed emitter. When the critical electrostatic potential is attained, the free surface of the liquid at the end of the emitter takes the shape of a cone, termed the Taylor cone. In the typical configuration, a jet is emitted from the cone apex, which ultimately breaks into droplets, due to the Rayleigh instability, thus forming the electrospray.

The size of the droplets in the electrospray depends mainly on the liquid viscosity, electric conductivity and surface tension. In particular, the droplets are smaller as the liquid conductivity increases. For this reason, electrohydrodynamic atomization method is only of practical interest in conducting electrified liquids.

In the immediate vicinity of the emission tip there exists a region dominated by space charge effects, which is called the space charge region. In this region, the mutual Coulomb repulsion field between particles dominates over the external electric field. Hence, the particle trajectories separate quickly, and the width of the emitted spray increases considerably. Due to this rapid trajectory separation the space charge density decays quickly as the distance to the tip increases, reaching a region where the external electric field dominates over the space charge electric field.

Electrohydrodynamic atomization offers important practical applications, for instance, in membrane coating with catalytic substances, space propulsion, encapsulation of particles, etc. In all these applications it is essential to accurately predict the shape of the emitted electrospray, as well as the maximum electric current that can be emitted at steady state before the space charge distribution blocks further electrospray emission. In particular, it is essential to know precisely the emitted electrospray width as a function of the distance in the axial direction, which is needed to optimize the design of intermediate electrodes called extractors. Extractors are often used to axially direct the charged particles, thus avoiding their eventual return to the emitter due to the space charge field. Extractors are also used to pack a relatively high number of electrospray emitter tips in small spaces.

The main goal of the present work is the theoretical analysis of space charge distributions in steady state electrospray emission in vacuum. The mathematical description of the system is based on the continuum hypothesis. The work will focus on the description of monodisperse distributions, i.e., we assume that all emitted droplets are identical.

The starting point of the work is the Simplified Eulerian model (SEM) proposed by J. Fernández de la Mora en 2012 to describe the space charge distribution emitted in vacuum,

assuming steady state and azimuthal symmetry. In this model, a monodisperse electrospray is described using an Eulerian frame by means of the continuum hypothesis. Hence, the electrospray is characterized by three fields: the droplet number density function, the droplet velocity field and the electric potential, which depend only on two spatial coordinates of the Eulerian reference frame. Assuming that all particles depart from the extractor electrode with the same initial velocity and considering that this electrode is an equipotential surface, we find that the droplet velocity field is irrotational, i.e., it is given by the gradient of a scalar velocity potential. Hence, the complete description of the electrospray is obtained through only three scalar fields: the former velocity potential, together with the droplet number density and the electric potential. These three scalar fields are determined by three partial differential equations: the energy conservation equation, the Poisson's equation and the continuity equation, which provide the fundamental equations of the mathematical model.

Despite the simplification of describing the system by means of only three scalar fields, the problem still encompasses mathematical difficulties. First, the former system of partial differential equations can not be solved analytically because it involves non-linear equations. This implies that the mathematical resolution of the system must be performed numerically. Second, another difficulty is due to the singularities derived from the geometry of the Taylor cone, in particular the singularity in the immediate vicinity of the cone apex. These singularities must be solved analytically before starting the corresponding numerical integration of the system.

The present work will focus on the spatial description of the charge in a certain neighborhood around the cone apex, where the space charge effects are relevant and must be taken into account, and has three different parts.

1. Implementation of a numerical method to solve the system of partial differential equations of the mathematical model.
2. Analytical resolution of the singularity of the space charge density at the cone apex, enabling the analysis of the asymptotic mathematical form of the solution near the cone apex.
3. Joint application of both strategies, to obtain a complete solution which is valid, both, in the immediate vicinity of the cone apex as well as far away from it.

The thesis is organized in eight chapters and five appendices. In the first chapter the fundamental objectives of the work are established. The second chapter contains the state of the art of the question investigated in the work. In the third chapter the SEM is introduced and formulated mathematically, including the corresponding partial differential equations and boundary conditions. In the fourth chapter an algorithm based on the finite differences method is implemented, to numerically solve the PDEs involved in the SEM. In the fifth and sixth chapter we study the singularity of the space charge density near the cone apex via SEM, this providing the asymptotic behavior of the electrospray in the immediate vicinity of the cone apex. In the seventh chapter the numerical finite differences algorithm implemented and tested in the fourth chapter is applied to obtain the behavior of the electrospray far from the cone apex. In the last chapter the main contributions to the problem investigated in this work and future lines of research are enumerated. Finally, the thesis has five appendices, which contain several questions of a mathematical nature which can be separated from the main text.

# Lista de símbolos

En esta lista sólo se incluyen los símbolos más importantes usados a lo largo del trabajo.

Las magnitudes adimensionales, en el sistema de unidades características relativo a la región de carga espacial, se denotan usando “tildes” en las correspondientes magnitudes de las que se obtienen (por ejemplo,  $\tilde{r} \equiv r/\ell$ ,  $\tilde{n} \equiv n/n_{sc}$ , etc.).

## Símbolos griegos

$\alpha$	Semiángulo del cono líquido
$\alpha_T$	Ángulo de Taylor
$\gamma$	Tensión superficial del líquido
$\Delta\theta$	Desviación estándar de la coordenada angular $\theta$
$\Delta\theta_r$	Desviación estándar de la coordenada angular $\theta$ a $r$ constante
$\Delta p$	Diferencia entre la presión del líquido y la presión exterior
$\epsilon_0$	Permitividad eléctrica del vacío
$\theta$	Coordenada esférica polar
$\rho$	Coordenada cilíndrica radial
$\rho'$	Coordenada cilíndrica rotada en la dirección perpendicular al cono
$\phi$	Potencial eléctrico
$\phi_{sc}$	Valor característico del potencial eléctrico
$\phi_T$	Potencial eléctrico de Taylor
$\psi$	Potencial de velocidad
$\psi_{sc}$	Valor característico del potencial de velocidad

## Símbolos romanos

$e$	Carga eléctrica de las partículas
$\mathbf{E}$	Campo eléctrico
$E_{sc}$	Valor característico del campo eléctrico
$\mathbf{E}_T$	Campo eléctrico de Taylor

$F$	Función angular correspondiente al potencial de velocidad $\psi$
$h_w, h_\theta, h_{z'}$	Pasos en las variables $w$ (ó $u$ ), $\theta$ y $z'$
$I$	Intensidad de corriente emitida por el electrospray
$\mathbf{J}$	Vector densidad de corriente
$l_e$	Distancia desde la punta emisora al electrodo extractor
$m$	Exponente de $\tilde{r}$ en la solución autosemejante correspondiente a $\psi$
MES	Modelo Euleriano Simplificado
$m_d$	Masa de las partículas
$n$	Densidad numérica de partículas
$\mathbf{n}$	Vector unitario normal (externo) a una superficie
$n_{sc}$	Valor característico de la densidad numérica de gotas
$n_w, n_\theta, n_{z'}$	Número de nodos en las variables $w$ (ó $u$ ), $\theta$ y $z'$
$N$	Función angular correspondiente a la densidad numérica de partículas $n$
$p$	Función angular correspondiente al potencial eléctrico $\phi$
$p_T$	Función angular correspondiente al potencial eléctrico de Taylor $\phi_T$
$P_\nu$	Función de Legendre de primera especie de orden $\nu$
$Q_\nu$	Función de Legendre de segunda especie de orden $\nu$
$Q_{sc}$	Valor característico de la carga eléctrica
$r$	Coordenada esférica radial
$\mathbf{r}$	Vector de posición
$r_c$	Radio del tubo capilar
$t$	Tiempo
$t_{sc}$	Valor característico del tiempo
$u$	Variable escalada correspondiente a la coordenada adimensional $\tilde{\rho}'$
$\mathbf{v}$	Campo de velocidades
$v_e$	Voltage al que se carga el líquido conductor
$v_{sc}$	Valor característico del campo de velocidades
$V_{min}$	Voltaje umbral de formación del cono de Taylor
$w$	Variable escalada correspondiente a la coordenada adimensional $\tilde{r}$
$x$	Coseno de la coordenada angular $\theta$
$x_T$	Ángulo de Taylor en la coordenada angular $x$
$z$	Coordenada cilíndrica axial
$z'$	Coordenada cilíndrica rotada en la dirección del cono

**Otros símbolos**

$\ell$	Longitud característica de la región de carga espacial
$\langle \theta \rangle$	Valor medio de la coordenada angular $\theta$
$\langle \theta_r \rangle$	Valor medio de la coordenada angular $\theta$ a $r$ constante





# Índice general

<b>1. Objetivos</b>	<b>1</b>
<b>2. Estado del arte</b>	<b>3</b>
2.1. Electrosprays . . . . .	3
2.2. Potencial de Taylor . . . . .	9
2.3. Modelo cónico en sprays atmosféricos . . . . .	11
2.4. Problema que se desea resolver . . . . .	19
<b>3. Modelo Euleriano Simplificado (SEM)</b>	<b>25</b>
3.1. Justificación y ecuaciones fundamentales . . . . .	25
3.2. Aplicación en geometrías sencillas . . . . .	27
3.2.1. Diodo plano . . . . .	28
3.2.2. Diodo esférico . . . . .	32
3.2.3. Diodo cilíndrico . . . . .	36
3.3. Formulación matemática en un cono líquido . . . . .	41
3.3.1. Validez del SEM . . . . .	42
3.3.2. Escalas características y formulación adimensional . . . . .	44
<b>4. Aplicación del SEM para la dispersión de carga en un cono redondeado</b>	<b>47</b>
4.1. Geometría y condiciones de contorno . . . . .	47
4.2. Descomposición del dominio . . . . .	49
4.2.1. Cambio de variable y mallado . . . . .	52
4.3. Método numérico . . . . .	55
4.3.1. Formulación en la variable escalada . . . . .	57
4.3.2. Ecuaciones en diferencias finitas . . . . .	61
4.3.3. Algoritmo numérico . . . . .	70
4.4. Resultados y análisis . . . . .	71

<b>5. Aplicación del SEM para la dispersión de carga cerca del vértice de un cono</b>	<b>81</b>
5.1. Planteamiento del problema singular . . . . .	81
5.2. Soluciones autosemejantes . . . . .	83
5.2.1. Sistema angular . . . . .	84
5.2.2. Propiedades generales del sistema angular . . . . .	85
5.3. Análisis asintótico del sistema angular cerca de los puntos singulares . . . . .	86
5.3.1. Comportamiento asintótico en $x = \pm 1$ . . . . .	87
5.3.2. Comportamiento asintótico en $x = x_\beta$ , con $F'(x_\beta) = 0$ y $-1 < x_\beta < 1$ . . . . .	90
5.4. Integración numérica del problema angular . . . . .	93
5.4.1. Rango físicamente admisible para el semiángulo del cono $\alpha$ . . . . .	94
5.5. Resultados y discusión . . . . .	96
5.5.1. Trayectorias de las gotas y distribución de carga . . . . .	97
5.5.2. Dominio de validez . . . . .	101
5.5.3. Limitaciones . . . . .	101
5.6. Emisión limitada por distribución espacial de carga . . . . .	102
5.6.1. Motivación del problema y geometría . . . . .	103
5.6.2. Posibilidad de emisión desde el vértice por medio de una superficie singular	105
<b>6. Aplicación del SEM para la dispersión de carga desde un filamento</b>	<b>113</b>
6.1. Geometría y problema angular . . . . .	113
6.2. Integración numérica del problema angular . . . . .	116
6.3. Resultados y discusión . . . . .	120
<b>7. Aplicación del SEM para la dispersión de carga lejos del vértice de un cono</b>	<b>125</b>
7.1. Problema regular . . . . .	125
7.1.1. Formulación matemática . . . . .	128
7.2. Resultados y análisis . . . . .	129
7.2.1. Análisis de un ejemplo concreto . . . . .	130
7.2.2. Análisis en el rango admisible de valores para el ángulo del cono . . . . .	137
7.2.3. Discusión . . . . .	141
<b>8. Conclusiones generales y trabajo futuro</b>	<b>143</b>
8.1. Conclusiones generales . . . . .	143
8.2. Trabajo futuro . . . . .	147

---

8.3. Aportaciones del trabajo . . . . .	148
<b>A. Coordenadas cilíndricas rotadas</b>	<b>151</b>
A.1. Transformación de coordenadas . . . . .	151
A.2. Operadores diferenciales . . . . .	152
<b>B. Fórmulas en diferencias finitas</b>	<b>155</b>
B.1. Aproximaciones en diferencias finitas . . . . .	155
B.2. Fórmulas en diferencias finitas de orden dos . . . . .	156
<b>C. Parámetros estadísticos</b>	<b>159</b>
C.1. Ángulo medio y desviación estándar . . . . .	159
C.2. Parámetros a distancia constante . . . . .	160
<b>D. Estudio de soluciones analíticas en los semiejes y soluciones exactas del SEM</b>	<b>161</b>
D.1. Soluciones analíticas en los semiejes . . . . .	161
D.2. Soluciones autosemejantes exactas . . . . .	164
<b>E. Problema angular para el potencial eléctrico</b>	<b>169</b>
E.1. Ecuación de Legendre no homogénea . . . . .	169
E.2. Aplicación al caso de un menisco cónico . . . . .	172
<b>Bibliografía</b>	<b>175</b>



# Índice de tablas

3.1. Resultados numéricos obtenidos para el diodo plano. . . . .	31
3.2. Resultados numéricos obtenidos para el diodo esférico . . . . .	35
3.3. Resultados numéricos obtenidos para el diodo cilíndrico . . . . .	40
3.4. Sistema de unidades características basado en el conjunto de parámetros físicos independientes del problema . . . . .	45
4.1. Definición de los coeficientes de las ecuaciones en diferencias finitas. . . . .	62
4.2. Valores elegidos para la simulación . . . . .	72
5.1. Soluciones separables para los campos con ley de potencias para la variable radial	84
5.2. Comportamiento asintótico en el límite $x \rightarrow 1_-$ . . . . .	88
5.3. Comportamiento asintótico en el límite $x \rightarrow x_{\beta+}$ . . . . .	91
7.1. Valores elegidos para la simulación en el caso $\alpha = 36^\circ$ . . . . .	131
A.1. Gradiente, divergencia y laplaciano en las coordenadas cilíndricas rotadas $(\rho', z')$ .	153
B.1. Fórmulas en diferencias finitas de orden dos para la primera y la segunda derivada de una función. . . . .	157
D.1. Valores de los primeros coeficientes de las series de Taylor en torno a $x = 1$ para las funciones angulares como función del exponente $m$ . . . . .	163
D.2. Soluciones exactas del SEM . . . . .	165
D.3. Solución correspondiente a $m = 5/3$ . . . . .	166
D.4. Solución correspondiente a $m = 2$ . . . . .	166



# Índice de figuras

2.1. Cono-chorro y electrospray . . . . .	4
2.2. Esquema del problema de Taylor. . . . .	10
2.3. Modelo cónico de un electrospray. . . . .	14
2.4. Semiángulo del spray y corriente emitida (sin dimensiones) como función del semiángulo del cono . . . . .	18
2.5. Esquema de un electrospray en vacío y detalle de la región de carga espacial . . . . .	20
3.1. Diodo plano. . . . .	28
3.2. Funciones $\phi$ , $v$ y $n$ para los valores de $E_0$ de la tabla 3.1 . . . . .	31
3.3. Diodo esférico. . . . .	32
3.4. Funciones $\phi$ , $v$ y $n$ para los valores de $E_0$ de la tabla 3.2 . . . . .	35
3.5. Diodo cilíndrico. . . . .	37
3.6. Funciones $\phi$ , $v$ y $n$ para los valores de $E_0$ de la tabla 3.3 . . . . .	40
3.7. Esquema del problema y notación . . . . .	41
4.1. Esquema del problema. . . . .	48
4.2. Descomposición del dominio y coordenadas usadas en el problema. . . . .	50
4.3. Mallado en diferencias finitas . . . . .	54
4.4. Esquema del algoritmo numérico. . . . .	56
4.5. Perfil de carga emitido . . . . .	72
4.6. Gráficas de los campos escalares $\tilde{n}$ , $\tilde{\phi}$ y $\tilde{\psi}$ correspondientes a los datos de la tabla 4.2 . . . . .	74
4.7. Densidad numérica de gotas $\tilde{n}$ como función del ángulo $\theta$ a $\tilde{r}$ constante . . . . .	75
4.8. Potencial eléctrico $\tilde{\phi}$ como función de la coordenada radial $\tilde{r}$ en el eje ( $\theta = 0$ ) . . . . .	76
4.9. Parámetros estadísticos correspondientes a la distribución de la carga emitida . . . . .	77
4.10. Simulaciones para varios valores de la velocidad de inyección $\tilde{v}_i$ . . . . .	78
5.1. Vaporización de iones en un cono de Taylor. . . . .	82



5.2.	Valor adimensional del radio $r_s$ como función del semiángulo del cono $\alpha$ . . . . .	95
5.3.	Funciones angulares correspondientes a varios valores del semiángulo del cono líquido $\alpha$ . . . . .	96
5.4.	Trayectorias de las gotas correspondientes a $\alpha = 22^\circ$ y $\alpha = 36^\circ$ . . . . .	98
5.5.	Trayectorias de las gotas correspondientes a $\alpha = 46^\circ$ y $\alpha = 49,2^\circ$ . . . . .	99
5.6.	Distribución angular del electropray en la región de carga espacial en función del semiángulo del cono $\alpha$ . . . . .	100
5.7.	Emisión desde el vértice del cono. . . . .	104
5.8.	Superficie singular de emisión: casos . . . . .	107
5.9.	Esquema de las trayectorias emitidas desde el vértice . . . . .	108
6.1.	Emisión desde un filamento líquido. . . . .	114
6.2.	Funciones angulares correspondientes al problema de la emisión de carga desde un filamento líquido . . . . .	121
6.3.	Trayectorias de las gotas correspondientes al problema de la emisión de carga desde un filamento líquido . . . . .	121
7.1.	Esquema de la componente singular de la función $\tilde{n}$ . . . . .	126
7.2.	Mallado en diferencias finitas para los valores de la tabla 7.1 . . . . .	131
7.3.	Gráficas de los campos $\tilde{n}$ , $\tilde{\phi}$ y $\tilde{\psi}$ para el caso $\alpha = 36^\circ$ . . . . .	132
7.4.	Densidad numérica de gotas $\tilde{n}$ como función del ángulo $\theta$ a $\tilde{r}$ constante en el caso $\alpha = 36^\circ$ . . . . .	133
7.5.	Parámetros estadísticos correspondientes a la distribución de la carga emitida en el caso $\alpha = 36^\circ$ . . . . .	135
7.6.	Distribución angular del electropray emitido en el caso $\alpha = 36^\circ$ . . . . .	136
7.7.	Evaluación de la condición de equilibrio mecánico en el caso $\alpha = 36^\circ$ . . . . .	137
7.8.	Distribución angular del electropray emitido en función de $\alpha$ . . . . .	139
7.9.	Evaluación de la condición de balance en función de $\alpha$ . . . . .	140
A.1.	Transformación de coordenadas. . . . .	152
D.1.	Superficies equipotenciales del potencial eléctrico y trayectorias correspondientes a $m = 2$ . . . . .	167

# Capítulo 1

## Objetivos

El objeto de esta tesis es la descripción teórica de la distribución espacial de carga emitida por electrosprays en vacío, en régimen estacionario y axisimétrico. La descripción se hará usando un esquema euleriano, esto es, el modelo matemático empleado para la descripción del sistema estará basado en la aproximación del continuo. Así, no se considerarán las partículas individuales emitidas por el electrospray, sino la correspondiente densidad numérica de partículas, la cual se desplaza por el espacio con una velocidad local, descrita por un campo de velocidades, por acción del campo eléctrico existente. De esta manera, la ecuación de conservación del momento, la ecuación de Poisson y la ecuación de conservación de la carga proporcionan las relaciones fundamentales del modelo matemático que permiten determinar las variables dependientes del problema (densidad numérica de partículas, campo de velocidades y potencial eléctrico) y, por tanto, la descripción física del sistema.

La hipótesis fundamental que se introducirá en este modelo euleriano es la suposición de que el campo de velocidades es irrotacional, esto es, deriva del gradiente de un potencial escalar de velocidades. De esta forma, la descripción euleriana se puede realizar por medio de sólo tres campos escalares (densidad numérica de partículas, potencial de velocidad y potencial eléctrico) lo que simplifica el tratamiento matemático. Este modelo matemático, denominado modelo Euleriano Simplificado (SEM), será usado a lo largo del trabajo para realizar el estudio del sistema.

Los objetivos generales que se pretenden lograr en este trabajo se resumen en los siete puntos siguientes:

1. Justificar la validez del SEM en este sistema físico y formular el correspondiente problema matemático para los tres campos escalares, el cual consiste en el sistema de ecuaciones en derivadas parciales para dichos campos junto con las condiciones de contorno apropiadas, dadas por la geometría del problema.
2. Establecer un sistema adecuado de unidades características en términos de los parámetros físicos independientes del problema (carga y masa de las partículas emitidas, tensión superficial del líquido y corriente total emitida), lo que permite escribir el SEM en forma adimensional.
3. Implementar un método numérico basado en diferencias finitas que permita analizar, por medio del SEM, la dispersión de carga procedente del cono de Taylor. En esta parte, se

- evitará la singularidad existente en el vértice del cono, aproximando éste por una superficie esférica con un cierto radio finito sobre la cual se prescribe el perfil de carga emitido.
4. Obtener el comportamiento singular de la distribución espacial de carga en la inmediata vecindad del vértice del cono de Taylor. Esto pasa por resolver analíticamente la singularidad geométrica que presenta el problema en el vértice del cono.
  5. Estudiar si la emisión de carga desde un cono de Taylor está limitada por carga espacial, esto es, si la emisión puede ocurrir en el límite de un campo externo nulo. Esto es de interés pues permite conocer si existe un valor máximo de la corriente por encima de la cual la repulsión eléctrica es tan grande que impide la emisión de más carga.
  6. Estudiar el caso límite en el que la emisión ocurra desde una interfase líquida infinitamente aguda (esto es, un cono con un ángulo que tiende a cero). Esto también tiene interés físico porque proporciona una posible descripción del comportamiento singular de la distribución espacial de carga cerca del *jet* o chorro emitido desde el vértice de un *cone-jet*, régimen que se observa frecuentemente en los experimentos.
  7. Obtener el comportamiento de la distribución espacial de carga lejos del vértice del cono de Taylor. Esta parte del problema se hará usando el mismo algoritmo en diferencias finitas implementado antes para el estudio numérico de la dispersión desde un cono redondeado, pero iniciando el cálculo numérico a partir de los comportamientos asintóticos válidos en la inmediata vecindad del vértice del cono.

# Capítulo 2

## Estado del arte

### 2.1. Electrosprays

El método de atomización electrohidrodinámica en líquidos conductores, conocido también como *electrospray*, es una técnica conocida para la obtención de sprays de gotas cargadas eléctricamente con tamaños del orden de las micras o menores. El tema central de esta tesis es el análisis matemático de la distribución espacial de la carga eléctrica emitida por electrosprays en vacío. En esta sección presentamos una breve introducción a este fenómeno físico.

Consideremos un líquido suficientemente conductor en el interior de un tubo capilar metálico (denominado emisor), de forma que la superficie libre del líquido está en contacto con un aislante (aire o vacío) o un líquido dieléctrico inmiscible con el primero. Al aplicar una diferencia de potencial entre el tubo y un electrodo metálico distante (llamado extractor) que supere un cierto umbral, la interfase se hace inestable y evoluciona desde una forma generalmente redondeada a una o varias estructuras con forma cónica llamadas conos de Taylor [13].

A pesar de que los conos de Taylor se pueden ver como estructuras más o menos estacionarias, no son estáticas, ni mucho menos. De hecho, sus vértices son fuente de emisión de gotas cargadas. Dependiendo del modo en el que tenga lugar la formación de estas gotas, existen diversos regímenes de funcionamiento [5]. El modo *cone-jet* o cono-chorro es el más estudiado por ser el más útil en las aplicaciones. En este modo, desde el vértice del cono se expelle un *jet* o microchorro que posteriormente se rompe, como consecuencia de la inestabilidad de Rayleigh, generando un fino spray de gotas submicrométricas cargadas eléctricamente, que es a lo que comúnmente se le llama electrospray. La figura 2.1 muestra la imagen de un electrospray emitido desde un cono-chorro.

El diámetro del *jet* y el tamaño final de las gotas emitidas está determinado por la viscosidad, la tensión superficial y fundamentalmente por la conductividad eléctrica del líquido [13]. En particular, los conos de Taylor de líquidos altamente conductores (del orden de 1 S/m) ofrecen la única técnica posible para la obtención de *jets* submicrométricos y nanométricos (con diámetros por debajo de 10 nm), lo que les confiere un enorme interés práctico. Por contra, en líquidos poco conductores, encontramos que el *jet* es ancho y poco diferenciado del menisco; en estos casos, la técnica del electrospray deja de tener interés, en cuanto existen otras formas más simples de obtener *jets* gruesos.

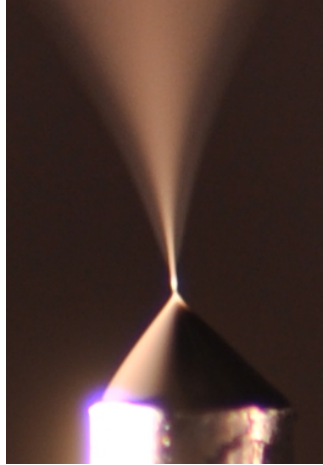


Figura 2.1: Cono-chorro y electro-spray. De abajo a arriba, tubo capilar, cono-chorro y electro-spray.

La acción de un campo eléctrico sobre la interfase de un líquido conductor se conoce al menos desde 1600 cuando William Gilbert, en su obra *De Magneto*, reportó la existencia de meniscos cónicos que se formaban cuando un trozo de ámbar se aproximaba a una pequeña gota de agua. No obstante, hay que esperar a principios del siglo pasado para encontrar estudios cuantitativos más completos sobre estos meniscos cónicos. Desde entonces, el interés por el tema de los electro-sprays no ha hecho más que crecer. Esto es debido a la enorme relevancia que la técnica de atomización electrohidrodinámica posee en las aplicaciones en diversos campos tales como la Electroquímica, la Biología, la Ciencia de los Materiales, etc. Entre las principales aplicaciones podemos resaltar las siguientes:

- El desarrollo de baterías y sistemas de almacenamiento de energía [54], [50] o al recubrimiento de membranas con materiales catalíticos.
- Propulsión espacial de satélites de masa pequeña [38],
- Técnicas de impresión con tinta [47].
- Combustión [6], especialmente en micromotores.
- Espectrometría de masas [11].
- Técnicas de focalización de haces iónicos [42, 43] usadas, por ejemplo, en aplicaciones FIB (*Focused ion beam*).
- Encapsulado de partículas [1].

Esta riqueza en las aplicaciones explica la considerable literatura que hay disponible sobre el tema de los electro-sprays, tanto desde un punto de vista experimental como desde el punto de vista teórico. Veremos, a continuación, algunas de las aportaciones más significativas.

## Voltaje umbral y ángulo del cono de Taylor

Los primeros estudios son debidos a Zeleny [51, 52, 53] en la segunda década del siglo XX, quién recoge la formación de estructuras cónicas cuando la interfase entre un líquido conductor y un aislante se carga por encima de un cierto potencial eléctrico crítico  $V_{min}$ . En particular, los estudios de Zeleny mostraban que este voltaje umbral  $V_{min}$  debe ser proporcional a la raíz cuadrada de la tensión superficial del líquido  $\gamma$ , esto es,  $V_{min} \sim \gamma^{1/2}$ .

En 1964, Taylor [49] explicó matemáticamente la formación de meniscos cónicos electrificados (precisamente, en su honor se denominan conos de Taylor) a partir de un balance entre los esfuerzos eléctricos y capilares sobre la interfase líquida. Su resultado más importante es que, en ausencia de carga espacial, el semiángulo del cono debe tener un valor próximo a  $49,3^\circ$  (denominado ángulo de Taylor) (ver sección 2.2). Taylor también confirmó las investigaciones de Zeleny encontrando que el voltaje umbral debía escalar además con una longitud característica del electrodo que soporta el menisco (por ejemplo, el radio del tubo capilar  $r_c$ ):

$$V_{min} \sim \left( \frac{\gamma r_c}{\epsilon_0} \right)^{1/2}. \quad (2.1)$$

## Efecto de la presión: conos de Taylor curvados

En su modelo teórico ideal, Taylor [49] asume que la diferencia entre la presión en el líquido conductor y la presión en el medio aislante,  $\Delta p$ , es igual a cero. No obstante, en meniscos líquidos reales esta hipótesis quizá solo sea aproximadamente cierta cerca del vértice, pero no en otras zonas de la superficie del menisco y esto obliga a incluir el término de presión  $\Delta p$  dentro del análisis.

El papel que desempeña el término de presión  $\Delta p$  en la obtención del rango de voltajes y formas de meniscos líquidos que llevan a conos líquidos estables se deduce del análisis numérico que Pantano *et al.* [41] realizan en ausencia de carga espacial. De su análisis, se deduce que el término  $\Delta p$  está definitivamente relacionado con la curvatura del menisco: el caso  $\Delta p = 0$  da la forma perfectamente cónica de Taylor, el caso  $\Delta p < 0$  se obtiene en meniscos en punta cóncavos (curvados hacia fuera del eje del cono) y el caso  $\Delta p > 0$  se tienen en meniscos en punta convexos (curvados hacia el eje del cono). La existencia de estas tres curvaturas posibles se puede deducir de una forma natural generalizando la solución de Taylor de forma que incluya el término de presión [13].

## Régimen *cone-jet* y leyes de escala para el *jet*

El modo de funcionamiento de *cone-jet* o cono-chorro es el más habitual y útil por sus aplicaciones prácticas. Su fundamento teórico es sencillo de explicar [13]. Un líquido con una cierta conductividad eléctrica se inyecta al medio externo a través de un tubo capilar metálico. Entre este tubo y un electrodo lejano se aplica una diferencia de potencial. Esta diferencia de potencial origina un campo eléctrico en el líquido y en el medio exterior. El campo eléctrico induce una corriente eléctrica dentro del líquido, la cual da lugar a una cierta densidad superficial de carga sobre la interfase. Esta densidad de carga superficial produce, a su vez, un esfuerzo eléctrico que tiende a alargar la superficie en la dirección del campo. Cuando la diferencia de potencial

aplicada supera un cierto umbral, se forma un menisco en el extremo del tubo capilar. En una región intermedia entre el tubo capilar y la punta del menisco la variación de presión entre el líquido y el exterior es despreciable y, en consecuencia, el menisco adopta una forma cónica resultado del balance entre esfuerzos eléctricos y capilares sobre la interfase. No obstante, la velocidad del líquido aumenta cerca del vértice del menisco, lo que produce unas variaciones de presión entre el líquido y el medio externo. Esto desequilibra el balance de esfuerzos anterior y provoca que del vértice salga un chorro delgado de líquido (o *jet*) que transporta la carga eléctrica acumulada en la superficie. El campo eléctrico produce una fuerza tangencial sobre esta carga dando lugar a una tracción eléctrica que tiende a alargar el chorro. Frecuentemente, el chorro emitido rompe aguas abajo por inestabilidades capilares formando un spray de gotas o electrospray.

El régimen de cono-chorro ha sido ampliamente estudiado, tanto desde el punto de vista experimental, como desde el punto de vista teórico. Especialmente relevantes fueron los experimentos de J. Fernández de la Mora y I.G. Loscertales en electrosprays atmosféricos de líquidos con alta conductividad eléctrica [16]. Estos experimentos mostraron la independencia de las propiedades del spray con las variables electrostáticas (diferencia de potencial entre el tubo capilar y el electrodo extractor y la geometría de los electrodos) y aportaron leyes de escala para el diámetro del *jet*  $D_j$  y para la corriente eléctrica emitida  $I$ :

$$D_j = G(\epsilon) \left( \frac{Q \epsilon_0}{K} \right)^{1/3}, \quad I = g(\epsilon) (\gamma K Q)^{1/2}, \quad (2.2)$$

donde  $Q$  es el caudal del líquido inyectado,  $K$  es la conductividad del líquido,  $\gamma$  la tensión superficial del líquido y  $G(\epsilon)$  y  $g(\epsilon)$  son funciones que dependen sólo de la constante dieléctrica del líquido  $\epsilon$ . Las leyes de escala anteriores fueron racionalizadas por estos dos autores considerando el modelo de Taylor pero complementado con la hipótesis de un *sink flow* para el campo de velocidades del líquido.

Aunque el régimen de cono-chorro tiene la capacidad de producir electrosprays prácticamente monodispersos (esto es, sprays de gotas idénticas en tamaño, masa y carga) no es infrecuente encontrarse electrosprays polidispersos, es decir, sprays con dos tipos de poblaciones de gotas: las gotas principales (o de mayor tamaño, masa y carga) y las gotas secundarias (de menor tamaño, masa y carga). En el caso de los electrosprays polidispersos en vacío [23], puede observarse que el spray parece dividirse en dos haces coaxiales: uno interno (el cual lleva las gotas principales) y otro externo (el cual transporta las gotas secundarias).

## Otros regímenes de funcionamiento

Aunque el régimen de cono-chorro es el modo de funcionamiento más habitual, no es, sin embargo, el único. Todo lo contrario, existe una gran variedad de esquemas de funcionamiento. En este sentido, debemos destacar la clasificación de regímenes realizada por M. Cloupeau y F. Prunet-Foch [5] basada en el criterio de formación de las gotas. Según estos autores, hay dos posibles modos de funcionamiento:

- Modos *dripping*, en los que las gotas se forman en la superficie del menisco. Un caso límite del anterior es que las gotas se generen desde el propio vértice (modos *microdripping*), en cuyo caso las gotas producidas serán de menor tamaño.

- Modos *jetting*, en los que las gotas se forman al romperse un chorro. En este régimen se encuentra el modo *cone-jet*, explicado anteriormente, pero hay más. Por ejemplo, el régimen *multijet*, con varios chorros originados desde puntos distintos del menisco. El régimen *ramified jet*, con varios chorros que parten del chorro principal en distintas direcciones. Y el régimen *pulsed cone-jet*, en el cual el menisco alterna una forma redondeada y una forma de cono-chorro con emisión de gotas desde la punta del chorro. En el régimen *pulsed cone-jet*, la emisión de gotas puede ser controlada aplicando un campo eléctrico periódico en el tiempo y variando su amplitud [29].

Los dos regímenes anteriores son puros, pero también es frecuente encontrarse con regímenes mixtos que forman gotas según los dos mecanismos anteriores.

Además de los regímenes anteriores, existen otros en los que se produce evaporación de iones desde la interfase líquida. Esta situación se produce cuando el campo eléctrico en la vecindad del vértice es muy intenso [27]. Los líquidos usados como fuentes iónicas son metales líquidos (denominados *Liquid Metal Ion Sources* o LMISs) [44], aleaciones de metales líquidos (denominados *Liquid Alloy Ion Sources* o LAISs) [8, 9] o líquidos iónicos (llamados *Ionic Liquid Ion Sources* o ILISs) [38]. Los líquidos iónicos han sido especialmente investigados por sus aplicaciones en Electroquímica y en aplicaciones FIB y presentan la gran ventaja respecto de los metales líquidos de mantenerse en estado líquido a temperatura ambiente o menor [21].

## Propiedades de los electrosprays y modelos teóricos de análisis

Desde las observaciones iniciales realizadas por Zeleny y la explicación teórica posterior de Taylor, ha habido un considerable número de aportaciones relevantes sobre las propiedades y la estructura de los electrosprays (ver, entre otros muchos, [16], [48], [8, 9], [25], [23], [44], [38], etc.). Un punto a tener en cuenta es la distinción entre electrosprays en aire (o atmosféricos) y electrosprays en vacío, pues sus propiedades son diferentes [23]. En el caso de electrosprays en vacío, las gotas cargadas están sometidas sólo a fuerzas electrostáticas y la inercia de las gotas es importante y debe tenerse en cuenta. Por contra, en el caso de electrosprays en aire, las gotas cargadas están sometidas, tanto a fuerzas electrostáticas, como a fuerzas de rozamiento. Las fuerzas de fricción sobre las gotas de los electrosprays atmosféricos reducen su velocidad, aumentan la importancia relativa de la repulsión entre las gotas y aumentan la anchura del haz emitido.

Un tema de estudio de interés, por sus aplicaciones, es la forma del electrospray emitido en modo iónico y en vacío. Los experimentos de I. Romero-Sanz y J. Fernández de la Mora en LIMIs [44] a este respecto proporcionan medidas de la distribución angular de electrosprays y de sus resultados se parece concluir que la densidad de carga es muy pequeña en el eje del electrospray con un máximo desplazado de dicho eje (o “haz hueco”). No obstante, esta evidencia de “electrosprays huecos” es sólo indirecta. Los resultados experimentales de P. Lozano y M. Martínez Sánchez en ILISs [38], basados en medidas directas, muestran haces con máximo de carga en el eje. La explicación que dan estos autores sobre el aparente resultado de “haz hueco” observado por I. Romero-Sanz y J. Fernández de la Mora es que, por el motivo que sea, se rompe la simetría axial, es decir, el eje del haz observado no coincide con el eje axial del experimento, de modo que se observa un máximo de carga desplazado de la posición angular que se espera; de esta forma, se termina interpretando que se ha observado un “haz hueco” donde, en realidad,



solo hay un “haz no hueco” pero con el eje desplazado.

Por otra parte, experimentos con electrosprays en aire (ver fotografías en [12]) muestran que cuando se inyectan caudales pequeños se obtienen conos de Taylor con semiángulos próximos al ángulo de Taylor. No obstante, cuando el caudal inyectado se incrementa, se obtienen conos con semiángulos más pequeños. Un comportamiento similar se observa en experimentos con electrosprays en vacío. En este sentido, los experimentos de Driesel *et al.* [8, 9] en LAIs muestran la influencia de la carga espacial sobre la forma del menisco de conos de Taylor. En particular, estos autores hacen medidas del semiángulo del cono y, también, de la longitud y el diámetro del *jet* como función de la corriente eléctrica emitida. Ellos encuentran que el semiángulo del cono disminuye y la longitud y el diámetro del *jet* aumentan conforme aumenta la intensidad de la corriente emitida. La explicación cualitativa para el hecho de obtener conos líquidos de ángulo menor al aumentar la corriente está basada en que el spray emitido contiene carga del mismo signo que el cono líquido y, en consecuencia, la repulsión produce semiángulos del cono más pequeños que el ángulo de Taylor (ver sección 2.3).

Desde un punto de vista teórico, los análisis de Taylor [49] y de Pantano *et al.* [41] proporcionan modelos teóricos aproximadamente válidos sólo en el supuesto de despreciar los efectos de la carga espacial debidos al electrospray emitido. No obstante, como demuestran los resultados experimentales, estos efectos de carga espacial son especialmente importantes en la inmediata vecindad del vértice del cono y afectan a la forma del menisco líquido y deben tenerse en cuenta en cualquier modelo teórico de análisis del electrospray. En este sentido, conviene distinguir dos tipos de modelos:

- Modelos langrangianos o de partículas, en los que se considera que el electrospray es un sistema discreto de partículas cargadas. En estos modelos, la descripción se hace por medio de los vectores de posición y velocidad de las distintas partículas y la ecuación fundamental es la ecuación de Newton.
- Modelos eulerianos, basados en la hipótesis del continuo, lo que permite considerar que el electrospray es un sistema continuo de partículas. En estos modelos, la descripción del electrospray se hace introduciendo una función densidad numérica de partículas, junto con el campo de velocidades y el potencial eléctrico. Estos tres campos son función del tiempo y la posición y las ecuaciones fundamentales son la ecuación del momento, la ecuación de Poisson y la ecuación de continuidad.

En la literatura pueden encontrarse muchos análisis teóricos aplicados a electrosprays. Repase-mos algunos de ellos.

En 1992, J. Fernández de la Mora formula un modelo euleriano, válido para electrosprays atmosféricos con inercia despreciable [12]. En particular, el modelo proporciona una explicación analítica a los efectos de carga espacial sobre el semiángulo del cono asumiendo la hipótesis de que un electrospray cónico de gotas idénticas con inercia despreciable se origina en el vértice del cono líquido. De acuerdo a este modelo, el semiángulo del cono líquido sólo puede tomar valores por debajo del ángulo de Taylor. Además, del modelo se deducen relaciones matemáticas entre el semiángulo del spray emitido, el semiángulo del cono líquido y la corriente eléctrica emitida, las cuales muestran que valores más altos del semiángulo del spray y valores más bajos del semiángulo del cono líquido son obtenidos al aumentar la corriente emitida. Este modelo será analizado con más detalle en la sección 2.3. El caso de electrosprays atmosféricos con inercia

importante fue analizado en 1994 mediante un modelo lagrangiano por Gañán-Calvo *et al.* [22]. Este mismo caso (esto es, electrosprays atmosféricos con inercia importante) fue estudiado en 2012 usando un modelo Euleriano por F. Higuera [28], obteniendo resultados satisfactorios con un menor coste computacional que las simulaciones lagrangianas.

El trabajo de esta tesis responde a la necesidad de proporcionar una descripción teórica de la distribución espacial de carga emitida en modo iónico y en vacío, que complementen los trabajos experimentales y otros teóricos disponibles sobre la misma cuestión. Esta descripción será realizada usando el modelo euleriano simplificado propuesto en el año 2012 por J. Fernández de la Mora [15] para el análisis de la dispersión de iones en vacío, asumiendo simetría axial y estado estacionario. El modelo matemático se fundamenta en la hipótesis que considera un campo de velocidades irrotacional para las partículas emitidas, lo que supone una importante simplificación en el tratamiento matemático. La descripción detallada del problema que se desea investigar en esta tesis junto con las cuestiones concretas más importantes a las que se quiere dar respuesta se hace en la sección 2.4.

## 2.2. Potencial de Taylor

El modelo teórico que explica la formación de conos en líquidos conductores es debido a Taylor [49]. El resultado más relevante que se deduce de su análisis es que el único campo eléctrico posible que puede existir en equilibrio con la superficie de un líquido conductor cónico es el externo a un cono de semiángulo vertical de aproximadamente  $49,29^\circ$ .

La figura 2.2 muestra la geometría del problema de Taylor, el cual será analizado con detalle en esta sección. Consideremos un cono líquido supuesto conductor perfecto en un medio aislante (aire o vacío) y cargado a un voltaje positivo con respecto al infinito y supongamos que está en equilibrio exacto con el campo eléctrico creado por sí mismo. Sea  $\gamma$  la tensión superficial entre el líquido y el medio aislante. El objetivo es obtener el semiángulo del cono  $\alpha_T$  y el potencial eléctrico  $\phi_T$  en el medio externo al cono.

Usando coordenadas esféricas  $(r, \theta)$  y colocando el origen en el vértice del cono, el problema para la función  $\phi_T$  se reduce a resolver la ecuación de Laplace

$$\nabla^2 \phi_T = 0 \quad (2.3)$$

en  $r > 0$ ,  $0 < \theta < \pi - \alpha_T$  donde, como ya se ha mencionado, el ángulo  $\alpha_T$  debe ser obtenido como parte de la solución del problema, junto con las condiciones de contorno sobre la superficie del cono ( $\theta = \pi - \alpha_T$ ) y la condición de regularidad en el eje situado en el medio externo al cono ( $\theta = 0$ ). En primer lugar, las condiciones de contorno sobre la superficie del cono líquido están dadas por

- la condición de equipotencialidad del potencial eléctrico (hipótesis de conductor perfecto), la cuál, asumiendo que la superficie del cono está a potencial eléctrico igual a cero, se escribe como

$$\phi_T|_{(r, \theta = \pi - \alpha_T)} = 0, \quad (2.4)$$

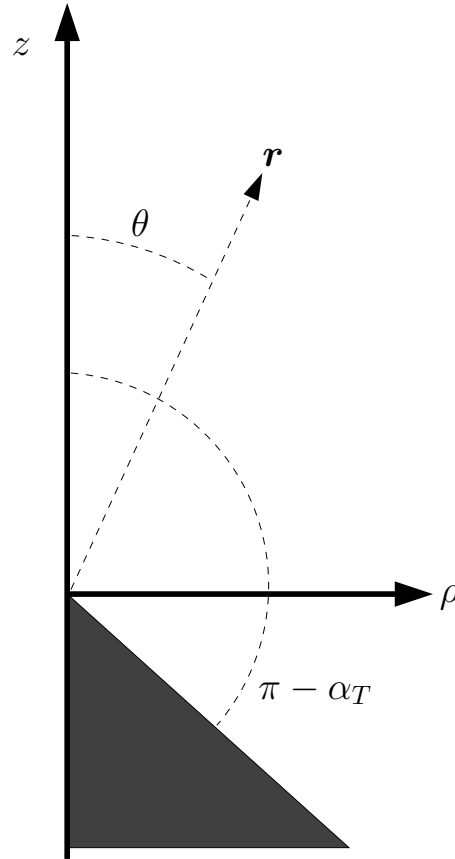


Figura 2.2: Esquema del problema de Taylor.

- y la condición de equilibrio mecánico en la superficie del cono

$$\frac{1}{2} \epsilon_0 (\nabla \phi_T)^2 \Big|_{(r, \theta = \pi - \alpha_T)} = \gamma \frac{\cot \alpha_T}{r}. \quad (2.5)$$

Por otra parte, la condición de regularidad en el eje de simetría está dada por la condición

$$\frac{\partial \phi_T}{\partial \theta} \Big|_{(r, \theta = 0)} = 0. \quad (2.6)$$

Para resolver el problema anterior, consideremos una solución autosemejante de la forma

$$\phi_T = \left( \frac{\gamma}{\epsilon_0} \right)^{1/2} r^\nu [a_T P_\nu(\cos \theta) + b_T Q_\nu(\cos \theta)], \quad (2.7)$$

donde  $\nu$  es un número real,  $P_\nu(x)$  y  $Q_\nu(x)$  denotan, respectivamente, las funciones de Legendre de primera y segunda especie de orden  $\nu$  [40] y  $a_T$  y  $b_T$  son constantes. Debemos encontrar ahora el número  $\nu$  y el valor de las constantes  $a_T$  y  $b_T$ . La condición de equilibrio mecánico en la superficie del cono (ecuación (2.5)) implica necesariamente que  $\nu = 1/2$  y la condición

de regularidad en el eje (ecuación (2.6)) lleva a que  $b_T = 0$ . Por otra parte, la condición de equipotencialidad en la superficie del cono (ecuación (2.4)) impone la condición

$$P_{1/2}(x_T) = 0, \quad (2.8)$$

donde  $x_T$  está definida por

$$x_T \equiv \cos(\pi - \alpha_T) = -\cos \alpha_T. \quad (2.9)$$

La ecuación (2.8) es una ecuación trascendente y su única solución en el intervalo  $[-1, 1]$  está dada por  $x_T \simeq -0,6522$ . De esta manera, la ecuación (2.9) fija el semiángulo del cono  $\alpha_T$

$$\alpha_T \simeq 49,29^\circ. \quad (2.10)$$

Por último, usando de nuevo la condición de equilibrio mecánico sobre la superficie del cono (ecuación (2.5)) obtenemos

$$a_T^2 = \frac{2 \cot \alpha_T}{(1 - x_T^2) P_{1/2}'^2(x_T)}. \quad (2.11)$$

Puesto que el cono líquido tiene polaridad positiva, las líneas de fuerza del campo eléctrico se deben originar en la superficie del cono; por esta razón, debemos elegir el valor negativo para  $a_T$  en la ecuación (2.11) y entonces,

$$a_T = -\frac{1}{P_{1/2}'(x_T)} \left( \frac{2 \cot \alpha_T}{1 - x_T^2} \right)^{1/2} \simeq -1,34593. \quad (2.12)$$

Resumiendo, el semiángulo del cono (o *ángulo de Taylor*) es  $\alpha_T \simeq 49,29^\circ$  y el potencial eléctrico externo al cono líquido (o *potencial de Taylor*)  $\phi_T$  está dado por

$$\phi_T(r, \theta) = a_T \left( \frac{\gamma}{\epsilon_0} \right)^{1/2} r^{1/2} P_{1/2}(\cos \theta) \quad (r \geq 0, \quad 0 \leq \theta \leq \pi - \alpha_T), \quad (2.13)$$

donde, para un cono líquido con polaridad positiva, el valor de  $a_T$  está determinado por la ecuación (2.12). Además, el campo eléctrico de Taylor (dado por  $\mathbf{E}_T = -\nabla \phi_T$ ) varía como  $r^{-1/2}$ , es decir, se hace infinito en la punta del cono. Finalmente, una vez determinado el potencial eléctrico, la densidad superficial de carga sobre la superficie del cono  $\omega_T$  se obtiene fácilmente a partir de la derivada normal del potencial de Taylor

$$\omega_T(r) = \epsilon_0 \frac{1}{r} \frac{\partial \phi_T}{\partial \theta} \Big|_{(r, \theta = \pi - \alpha_T)} = (\gamma \epsilon_0)^{1/2} \left( \frac{2 \cot \alpha_T}{r} \right)^{1/2}. \quad (2.14)$$

Como se esperaba, la densidad superficial de carga  $\omega_T$  es positiva. Debe notarse, además, que  $\omega_T$  es también infinita en el vértice del cono.

## 2.3. Modelo cónico en sprays atmosféricos

En la sección anterior hemos visto que el único cono líquido conductor posible en equilibrio mecánico exacto con su propio campo eléctrico debe tener un semiángulo  $\alpha_T \simeq 49,29^\circ$ . No obstante, experimentalmente se observa que líquidos con conductividad alta o moderada producen

con frecuencia conos con semiángulos menores que el ángulo de Taylor,  $\alpha_T$ . Una explicación a este hecho fue proporcionada por J. Fernández de la Mora [12] y se basa en que el spray de gotas emitido por el cono está cargado con el mismo signo de carga que el propio cono, y esto a su vez produce una repulsión eléctrica que conduce finalmente a ángulos de cono menores que el observado por Taylor. Su análisis será considerado con todo detalle a continuación.

Inicialmente, J. Fernández de la Mora intenta explicar la existencia de meniscos cónicos con ángulos diferentes al ángulo de Taylor dentro del propio análisis de Taylor. Esto pasa por relajar la condición de regularidad en el eje  $\theta = 0$  (ecuación (2.6)), lo que implica retener la función de Legendre  $Q_{1/2}(x)$  en la solución, permitiendo que el potencial eléctrico se haga infinito en el eje. De esta forma, denotando por  $\alpha$  el semiángulo vertical del cono líquido (en principio, arbitrario), el potencial eléctrico,  $\phi_\alpha$ , obtenido al resolver la ecuación de Laplace junto con las condiciones de equipotencialidad y de equilibrio mecánico sobre la superficie del cono vendrá dado por la función

$$\phi_\alpha(r, \theta) = - \left( \frac{\gamma}{\epsilon_0} \right)^{1/2} r^{1/2} p_\alpha(\cos \theta) \quad (r \geq 0, \quad 0 \leq \theta \leq \pi - \alpha), \quad (2.15)$$

donde la función  $p_\alpha(x)$  está dada por una combinación lineal de las funciones independientes de Legendre de orden  $1/2$ ,

$$p_\alpha(\cos \theta) = a_\alpha P_{1/2}(\cos \theta) + b_\alpha Q_{1/2}(\cos \theta), \quad (2.16)$$

y donde las constantes  $a_\alpha$  y  $b_\alpha$  se calculan imponiendo las condiciones de equipotencialidad y de equilibrio mecánico sobre la superficie del cono,

$$a_\alpha = -\sin^{1/2} 2\alpha Q_{1/2}(x_\alpha), \quad b_\alpha = \sin^{1/2} 2\alpha P_{1/2}(x_\alpha). \quad (2.17)$$

Puesto que en el desarrollo anterior se ha retenido la función  $Q_{1/2}(x)$ , la solución obtenida para  $\phi_\alpha$  es singular en el eje  $\theta = 0$ . Esta singularidad lleva asociada físicamente la correspondiente singularidad de la densidad de carga espacial sobre el eje  $\theta = 0$ , es decir, implica necesariamente una distribución lineal de carga distribuida a lo largo del eje  $\theta = 0$  con una cierta densidad,  $\varpi = dq/dr$ . El valor de esta densidad lineal de carga se obtiene fácilmente usando el teorema de Gauss aplicado a una superficie regular cerrada que englobe un volumen que incluya puntos del eje  $\theta = 0$  en su interior, pero por lo demás arbitraria, y recordando el comportamiento asintótico de las funciones  $P_{1/2}(x)$  y  $Q_{1/2}(x)$  en el eje  $x = 1$  [40]. Después de los cálculos, se encuentra que

$$\varpi(r) = -2\pi (\gamma \epsilon_0)^{1/2} \sin^{1/2} 2\alpha P_{1/2}(x_\alpha) r^{1/2}. \quad (2.18)$$

En consecuencia, la función  $\phi_\alpha$  obtenida representa físicamente el potencial eléctrico producido por un cono líquido conductor (con polaridad positiva) de semiángulo  $\alpha$  junto con una distribución lineal de carga situada sobre el eje  $\theta = 0$  y con densidad  $\varpi$  dada por (2.18). Esto parece mostrar que la existencia de ángulos de cono diferentes al de Taylor está directamente relacionada con la existencia de esta singularidad de carga sobre el eje. El paso siguiente sería justificar físicamente la presencia de esta singularidad lineal de carga. Como se comentó con anterioridad, los experimentos con electrosprays muestran a menudo que el líquido se extiende pasada la región cónica formando un largo filamento o *jet* a lo largo del eje  $\theta = 0$ . La singularidad lineal de carga existente sobre dicho eje parece ser una buena aproximación al *jet* y,

por esta razón, el razonamiento previo podría constituir una explicación al hecho de encontrar ángulos de cono diferentes al de Taylor. Es más, esta carga eléctrica distribuida sobre el eje  $\theta = 0$  es emitida desde el vértice del cono. Y puesto que el vértice emite carga del mismo signo que la propia polaridad del cono, es evidente que la densidad lineal de carga existente en el eje debe ser positiva. Por esta razón, se debe tener que  $\varpi > 0$  y esto a su vez (ver ecuación (2.18)) implica la condición  $P_{1/2}(x_\alpha) < 0$ . Usando el hecho [40] de que la función  $P_{1/2}(x)$  es estrictamente creciente en el intervalo  $[-1, 1]$  y teniendo en cuenta que  $x_T$  es el (único) cero de esta función en dicho intervalo (recordar ecuación (2.8)), lo anterior es equivalente a escribir que  $x_\alpha < x_T$ . Finalmente, en virtud de la ecuación (2.9) se llega al resultado  $\alpha < \alpha_T$ , es decir, físicamente sólo son posibles semiángulos de cono menores que el de Taylor.

Parece entonces que el razonamiento previo podría constituir una explicación plausible al hecho de encontrar ángulos de cono menores que el de Taylor. No obstante, la densidad lineal de carga  $\varpi$  varía como  $r^{1/2}$  (ecuación (2.18)) y las razones por las que la carga eléctrica se debería distribuir de esta particular forma a lo largo de la longitud del *jet* no son tan obvias. Incluso, en el caso de que una futura descripción analítica del *jet* justificara esta particular dependencia [12], esto implicaría un acoplamiento bastante complejo entre la estructura del cono y la región del vértice y lo que se observa experimentalmente es, de hecho, un acoplamiento bastante simple. A pesar de esto, este intento de explicar la existencia de ángulos de cono menores que el de Taylor dentro del análisis de Taylor proporciona una evidencia de que este hecho es consecuencia de la carga espacial emitida por el cono.

En 1992, el propio Fernández de la Mora establece un modelo [12] que, en cierto modo, está basado en la idea anterior, pero sustituyendo la singularidad lineal de carga sobre el eje por una distribución cónica de carga espacial con simetría esférica, la cual es emitida desde el vértice del cono. El modelo explica satisfactoriamente la existencia de semiángulos de cono menores que el de Taylor obteniendo, a la vez, una dependencia funcional entre la intensidad de corriente emitida por el electrospray y el semiángulo del cono que parece ajustarse bastante bien a lo que se encuentra en los experimentos. Este modelo sólo puede aplicarse a electrosprays atmosféricos de gotas con inercia despreciable.

La figura 2.3 ilustra la geometría del problema considerado por J. Fernández de la Mora. Un cono líquido conductor con semiángulo vertical  $\alpha$  y cargado a un potencial positivo con respecto al infinito está rodeado de un gas (por ejemplo, aire) en reposo en el infinito. El vértice de este cono emite estacionariamente un spray cónico opuesto al cono líquido (por el vértice), con semiángulo vertical  $\zeta$  y formado por gotas idénticas con carga eléctrica (positiva)  $e$ , las cuales supondremos que no se evaporan una vez emitidas; esto es, por hipótesis, el spray ocupa la región cónica definida por  $r > 0$ ,  $0 \leq \theta \leq \zeta$ , mientras que en la región  $r > 0$ ,  $\zeta < \theta < \pi - \alpha$  no hay spray. Se asumirá la hipótesis del continuo, con lo que se supondrá que el sistema puede describirse de una forma euleriana por medio de tres campos: la densidad numérica de gotas  $n$ , el potencial eléctrico  $\phi$  y el campo de velocidad de las gotas  $\mathbf{v}$ . Se asumirá también la hipótesis de que las gotas tienen inercia y difusividad despreciables, con lo que su velocidad  $\mathbf{v}$  depende linealmente del campo eléctrico  $\mathbf{E} = -\nabla\phi$  a través de una constante de proporcionalidad dada por la movilidad eléctrica  $ke$

$$\mathbf{v} = ke\mathbf{E}. \quad (2.19)$$

Por último, el electrospray, en su movimiento, transporta una corriente cuya intensidad se denotará por  $I$ .

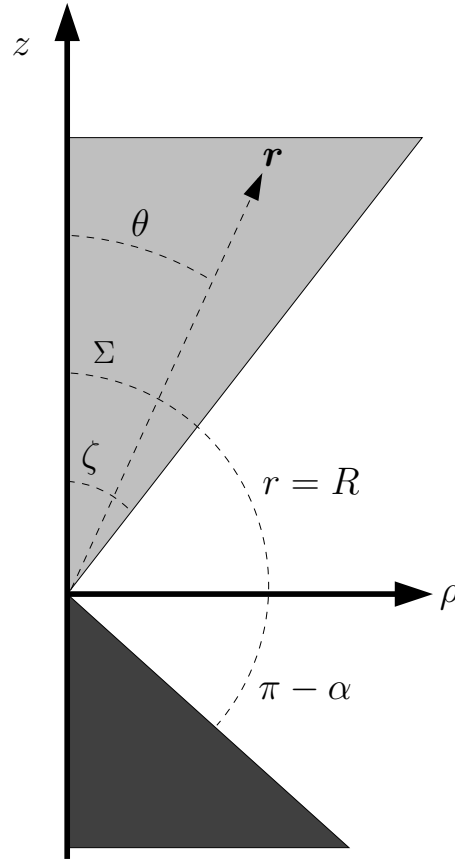


Figura 2.3: Modelo cónico de un electropray.

El objetivo de este problema es obtener los tres campos que permitan describir el electropray: la densidad de gotas  $n$ , el potencial eléctrico  $\phi$  y el campo de velocidades  $\mathbf{v}$ . Además, el problema presente tiene tres parámetros: el semiángulo del cono líquido  $\alpha$ , el semiángulo del spray cónico emitido  $\zeta$  y la corriente total emitida  $I$ . Se verá que, en realidad, el problema tiene un sólo grado de libertad, lo que hace que, fijado un parámetro (por ejemplo, el ángulo del cono líquido  $\alpha$ ) podamos obtener los otros dos (el ángulo del spray  $\zeta$  y la corriente del electropray  $I$ ) como parte de la solución del problema.

Las ecuaciones de este problema son entonces la ecuación de Poisson

$$\nabla^2 \phi = -\frac{en}{\epsilon_0}, \quad (2.20)$$

y la ecuación de continuidad

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = 0, \quad (2.21)$$

donde  $\mathbf{J}$  es el vector densidad de corriente. Las dos ecuaciones anteriores deben considerarse en la región  $r > 0$ ,  $0 < \theta < \pi - \alpha$ . Pero, por hipótesis, este dominio se divide en dos regiones distintas.

- En la región  $r > 0$ ,  $0 < \theta < \zeta$ , tenemos  $n \neq 0$  y por lo tanto  $\mathbf{J} = en\mathbf{v}$ . Entonces, usando la hipótesis (2.19), la ecuación de continuidad (2.21) puede escribirse en la forma

$$\nabla \cdot (n\nabla\phi) = 0. \quad (2.22)$$

- En la región externa  $r > 0$ ,  $\zeta < \theta < \pi - \alpha$ , tenemos, por hipótesis,  $n = 0$ . Entonces, la ecuación de Poisson (2.20) se reduce a la ecuación de Laplace; además,  $\mathbf{J} = \mathbf{0}$  y la ecuación de continuidad (2.21) se cumple automáticamente.
- Sobre la frontera del spray  $r > 0$ ,  $\theta = \zeta$ , debemos imponer la continuidad del potencial eléctrico  $\phi$  y del campo eléctrico  $\mathbf{E}$ .

En resumen, el problema se reduce a resolver sólo dos ecuaciones (ecuación de Poisson (2.20) y ecuación de continuidad (2.22)) para obtener sólo dos campos escalares:  $n$  y  $\phi$ . Notar que, debido a la discontinuidad que presenta la función  $n$ , la solución de las ecuaciones (2.20) y (2.21) ha de entenderse necesariamente en sentido de distribuciones.

Las condiciones de contorno para este problema deben ser, otra vez, la condición de equipotencialidad del potencial eléctrico y la condición de equilibrio mecánico sobre la superficie del cono

$$\phi|_{(r,\theta=\pi-\alpha)} = 0, \quad \frac{1}{2}\epsilon_0 (\nabla\phi)^2 \Big|_{(r,\theta=\pi-\alpha)} = \gamma \frac{\cot\alpha}{r}, \quad (2.23)$$

a las que hay que añadir la correspondiente condición de regularidad para cada uno de los dos campos escalares  $\phi$  y  $n$  en el eje  $\theta = 0$

$$\frac{\partial\phi}{\partial\theta} \Big|_{(r,\theta=0)} = 0, \quad \frac{\partial n}{\partial\theta} \Big|_{(r,\theta=0)} = 0. \quad (2.24)$$

Por último, integrando la ecuación de continuidad a través de cualquier superficie regular cerrada  $\Sigma$  tal que englobe completamente el vértice del cono (desde el cual se emite la carga), se obtiene la condición

$$I = \int_{\Sigma} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} \, da = -k e^2 \int_{\Sigma} n \nabla\phi \cdot \mathbf{n} \, da, \quad (2.25)$$

donde  $\mathbf{n}$  es el vector unitario y normal a la superficie  $\Sigma$  y dirigido hacia el exterior; la ecuación anterior impone la condición de conservación de la carga eléctrica.

Para resolver el problema anterior, se buscan soluciones separables de las ecuaciones (2.20) y (2.22) para los dos campos escalares  $\phi$  y  $n$  de la forma

$$\phi = - \left( \frac{\gamma}{\epsilon_0} \right)^{1/2} r^{1/2} p(\cos\theta), \quad (2.26)$$

$$en = (\gamma \epsilon_0)^{1/2} r^{-3/2} N(\cos\theta). \quad (2.27)$$

En este problema resulta útil usar la variable angular  $x \equiv \cos\theta$ , en la cual, la superficie del cono líquido vendrá definida por  $x_{\alpha} \equiv \cos(\pi - \alpha) = -\cos\alpha$  y la superficie del spray emitido por  $x_{\zeta} \equiv \cos\zeta$ . Escribamos a continuación el problema correspondiente para las funciones angulares  $p(x)$  y  $N(x)$ .

En primer lugar, introduciendo (2.26) y (2.27) en la ecuación (2.20), obtenemos la EDO

$$\frac{3}{4}p + \frac{d}{dx} \left[ (1-x^2) \frac{dp}{dx} \right] = N, \quad (2.28)$$

que debe considerarse en el intervalo  $x_{\alpha} < x < 1$ . La subdivisión del dominio del problema en región de spray y región externa induce la correspondiente subdivisión en el intervalo angular.



- En el subintervalo  $x_\zeta < x < 1$ , se tiene  $N \neq 0$ . Así, después de introducir (2.26) y (2.27) en la ecuación (2.22), se obtiene la EDO

$$\frac{d}{dx} \left[ (1 - x^2) N \frac{dp}{dx} \right] = 0. \quad (2.29)$$

- En el subintervalo  $x_\alpha < x < x_\zeta$ , se tiene  $N = 0$ . Entonces, la ecuación (2.28) se reduce a la ecuación de Legendre de orden  $1/2$ .
- En el punto  $x = x_\zeta$ , se tiene que imponer la continuidad de la función  $p(x)$  y de su derivada  $p'(x)$ .

Las condiciones de contorno sobre la superficie del cono  $x = x_\alpha$  (2.23) imponen que

$$p(x_\alpha) = 0, \quad p'(x_\alpha) = \left( \frac{2 \cot \alpha}{1 - x_\alpha^2} \right)^{1/2}, \quad (2.30)$$

y la condiciones de regularidad para los campos  $\phi$  y  $n$  en el eje  $x = 1$  se traducen en

$$\lim_{x \rightarrow 1^-} \left[ (1 - x^2)^{1/2} \frac{dp}{dx} \right] = 0, \quad \lim_{x \rightarrow 1^-} \left[ (1 - x^2)^{1/2} \frac{dN}{dx} \right] = 0. \quad (2.31)$$

Por último, escribamos la condición de conservación de la carga (ecuación (2.25)) en términos de la variable angular  $x$ . Para evaluar la integral se elige, por sencillez, la superficie esférica  $\Sigma$  (ver figura 2.3) definida por  $r = R$ ,  $0 \leq \theta \leq \pi - \alpha$  (con  $R > 0$ ). Tras hacer el cálculo, se obtiene el resultado

$$I = \pi k e \gamma \int_{x_\zeta}^1 p(x) N(x) dx. \quad (2.32)$$

Un resultado relevante que se deduce fácilmente de lo anterior es que los tres campos  $n$ ,  $\phi$  y  $\mathbf{v}$  deben tener uniformidad angular en la región que contiene al electrospray. Para demostrar esto, consideremos en primer lugar la ecuación angular de continuidad (2.29). Integrando se obtiene  $(1 - x^2) N p' = \text{constante}$ . Aplicando ahora la condición de regularidad para las funciones  $p(x)$  y  $N(x)$  (ecuación (2.31)), se tiene que el valor de la constante es cero, es decir  $(1 - x^2) N p' = 0$ . En el intervalo  $x_\zeta \leq x \leq 1$  se tiene, por hipótesis, que la función  $N(x) \neq 0$  lo que implica necesariamente que  $p'(x) = 0$ , es decir, la función  $p(x) = \text{constante}$ . Usando ahora la ecuación angular de Poisson (2.28), se deduce también que la función  $N(x) = \text{constante}$  en dicho intervalo. En resumen, asumiendo las hipótesis del problema, se llega a que en el intervalo  $x_\zeta \leq x \leq 1$  las funciones angulares  $p(x)$  y  $N(x)$  deben ser necesariamente constantes. Esto implica que los tres campos  $n$ ,  $\phi$  y  $\mathbf{v}$  deben ser independientes de la variable angular  $\theta$  en la región  $r > 0$ ,  $0 \leq \theta \leq \zeta$ , es decir, deben tener simetría esférica, tal como se quería probar. En su artículo [12], J. Fernández de la Mora introduce la propiedad de simetría esférica de los campos como una hipótesis más de su modelo. No obstante, como acabamos de ver, dicha propiedad se deduce necesariamente de las condiciones impuestas en el problema.

Teniendo en cuenta lo anterior, en el intervalo  $x_\zeta \leq x \leq 1$ , podemos poner

$$p = p_0, \quad N = N_0, \quad (2.33)$$

donde  $p_0$  y  $N_0$  son constantes. Podemos relacionar las dos constantes usando la ecuación angular de Poisson (2.28)

$$N_0 = \frac{3}{4}p_0. \quad (2.34)$$

En el intervalo  $x_\alpha < x < x_\zeta$ , la función  $p(x)$  cumple la ecuación de Legendre de orden 1/2

$$\frac{3}{4}p + \frac{d}{dx} \left[ (1-x^2) \frac{dp}{dx} \right] = 0, \quad (2.35)$$

la cual debe resolverse junto con las dos condiciones de contorno sobre la superficie del cono  $x = x_\alpha$  (ecuación (2.30)). Este problema es el mismo que teníamos para la función  $p_\alpha(x)$  y ya lo tenemos resuelto (ecuaciones (2.16) y (2.17)). Así, en el intervalo  $x_\alpha \leq x < x_\zeta$ , se tiene

$$p(x) = -\sin^{1/2} 2\alpha \left[ Q_{1/2}(x_\alpha) P_{1/2}(x) - P_{1/2}(x_\alpha) Q_{1/2}(x) \right]. \quad (2.36)$$

Se puede obtener ahora la relación entre el ángulo de spray  $\zeta$  y el ángulo del cono  $\alpha$ . En efecto, por hipótesis, la función  $p(x)$  tiene derivada continua en el punto  $x = x_\zeta$ ; entonces, tendremos necesariamente que  $p'(x_\zeta) = 0$ . Esta condición unida a la condición dada por  $p(x_\alpha) = 0$  (recordar ecuación (2.30)) lleva directamente a que

$$P'_{1/2}(x_\zeta) Q_{1/2}(x_\alpha) - P_{1/2}(x_\alpha) Q'_{1/2}(x_\zeta) = 0, \quad (2.37)$$

la cual también puede obtenerse derivando en (2.36) e igualando el resultado a cero. La ecuación (2.37) permite obtener el valor de  $x_\zeta$  a partir del valor de  $x_\alpha$ , es decir, da el valor del semiángulo del spray  $\zeta$  como función del semiángulo del cono  $\alpha$ .

De la relación anterior (ecuación (2.37)) se deduce que sólo pueden ser admisibles físicamente ángulos del cono líquido menores que el ángulo de Taylor. En efecto, teniendo en cuenta [40] que  $Q_{1/2}(x) = (-\pi/2)P_{1/2}(-x)$ , la relación (2.37) puede escribirse en la forma

$$\frac{P'_{1/2}(-x_\zeta)}{P'_{1/2}(x_\zeta)} = -\frac{P_{1/2}(-x_\alpha)}{P_{1/2}(x_\alpha)}. \quad (2.38)$$

Recordando que la función  $P_{1/2}(x)$  es estrictamente creciente en el intervalo  $[-1, 1]$  y que  $-1 < x_\alpha < 0$  se obtiene inmediatamente que  $x_\alpha < x_T$  donde  $x_T$  es el cero de la función  $P_{1/2}(x)$  (ecuación (2.8)). De aquí se infiere que

$$\alpha < \alpha_T \simeq 49,29^\circ, \quad (2.39)$$

como se había adelantado.

Se puede obtener ahora una relación entre la constante  $p_0$  y el valor de los ángulos del cono y del spray. En efecto, usando la continuidad de la función  $p(x)$  en el punto  $x = x_\zeta$ , se tendrá que  $p_0 = p(x_\zeta)$  y, teniendo en cuenta (2.36), se obtiene finalmente

$$p_0 = \sin^{1/2} 2\alpha \left[ P_{1/2}(x_\alpha) Q_{1/2}(x_\zeta) - Q_{1/2}(x_\alpha) P_{1/2}(x_\zeta) \right]. \quad (2.40)$$

Por último, utilizando la ecuación (2.32) se llega a la siguiente expresión para la corriente emitida  $I$

$$\tilde{I} \equiv \frac{I}{2\pi k e \gamma} = \frac{3}{8} p_0^2 (1 - \cos \zeta), \quad (2.41)$$

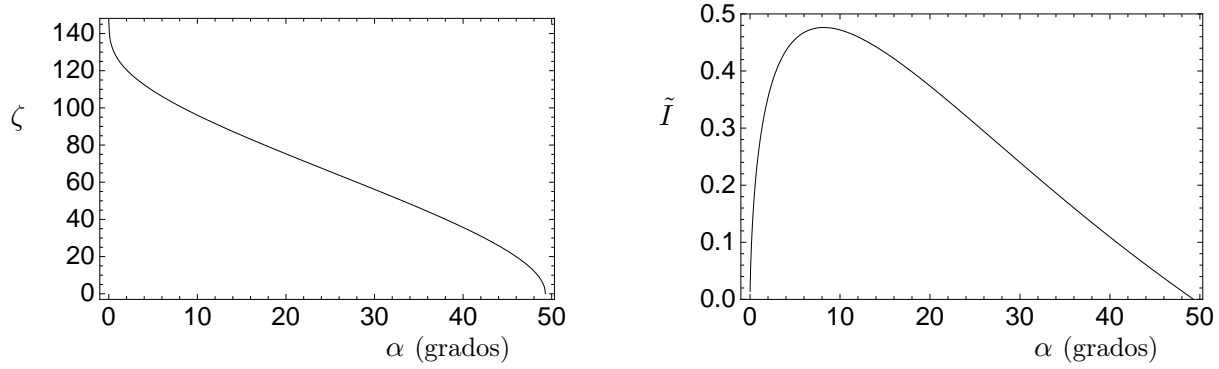


Figura 2.4: Semiángulo (en grados) del spray  $\zeta$  (izquierda) y corriente emitida (sin dimensiones)  $\tilde{I}$  (derecha) como función del semiángulo del cono líquido  $\alpha$ .

en la cual se ha definido (por conveniencia) el valor adimensional de la corriente  $\tilde{I}$ .

Todo el desarrollo anterior proporciona un método que permite resolver completamente el problema, el cual, como habíamos anunciado, tiene un grado de libertad. Una posible estrategia de cálculo sería la siguiente:

1. Fijar el valor del semiángulo del cono  $\alpha < \alpha_T$ .
2. Calcular el semiángulo del spray  $\zeta$  por medio de la ecuación (2.37) o (2.38).
3. Calcular las constantes  $p_0$  y  $N_0$  usando las ecuaciones (2.40) y (2.34) con lo que las funciones angulares  $p(x)$  y  $N(x)$  quedan completamente determinadas (usar en particular la ecuación (2.36) para obtener la función  $p(x)$  en el intervalo  $x_\alpha \leq x < x_\zeta$ ).
4. Obtener el potencial eléctrico  $\phi$  y la densidad de gotas  $n$  usando las ecuaciones (2.26) y (2.27) respectivamente. Una vez computado el campo eléctrico  $\mathbf{E} = -\nabla\phi$ , el campo de velocidades  $\mathbf{v}$  se obtiene por medio de (2.19).
5. Computar la intensidad de la corriente transportada por el electrospray  $I$  usando la ecuación (2.41).

En la figura 2.4 se muestra el valor del semiángulo del spray  $\zeta$  como función del semiángulo del cono líquido  $\alpha$  usando la relación (2.37). Como era de esperar, sólo para valores del ángulo  $\alpha$  que sean menores que el ángulo de Taylor  $\alpha_T \simeq 49,29^\circ$  se puede encontrar una dirección (definida por  $\theta = \zeta$ ) tal que el campo eléctrico  $\mathbf{E}$  sea radial. Dicha dirección define la frontera física del spray emitido. Por otra parte, la figura 2.4 muestra también la relación entre la corriente (adimensional) emitida  $\tilde{I}$  y el ángulo  $\alpha$  que se obtiene por medio de la ecuación (2.41).

Como resumen, el modelo cónico de J. Fernández de la Mora explica con éxito la formación de conos líquidos con ángulos menores al de Taylor. La validez de los resultados obtenidos (ver figura 2.4) y su comparación con los que se encuentran experimentalmente se detalla en [12]. Se puede resaltar que en los experimentos se observa siempre una región de transición entre el spray emitido y el cono líquido. No obstante, en líquidos muy conductores, esta región de transición

se acorta de forma que el spray tiene la apariencia de un cono cuyo vértice parece confundirse con el propio vértice del cono líquido. Además, la relación entre el ángulo del spray y el ángulo del cono están en muy buen acuerdo con lo que se observa experimentalmente en el intervalo  $32^\circ < \alpha < 46^\circ$ , rango en el cual el cono es estable y el spray es visible; en particular, para este rango, la corriente aumenta al disminuir el ángulo del cono, lo cual también era también un resultado esperado. Debemos recordar que el modelo cónico de J. Fernández de la Mora no puede aplicarse ni a conos líquidos en vacío ni a electrosprays de gotas con inercia significativa. El caso opuesto, esto es, electrosprays en vacío formados por gotas con inercia importante será considerado en este trabajo.

## 2.4. Problema que se desea resolver

Nuestro trabajo se centra en el análisis teórico de la distribución de carga espacial emitida por electrosprays en vacío en régimen estacionario. La figura 2.5 muestra un esquema del montaje experimental correspondiente a un electrospray en vacío [23]. Tenemos un líquido conductor con tensión superficial  $\gamma$  dentro de un tubo capilar metálico de radio  $r_c$  en el interior de una cámara en vacío. Sobre el tubo se aplica un potencial positivo  $v_e$  con respecto a un electrodo extractor a tierra. El electrodo extractor se encuentra separado del vértice del cono por una distancia  $l_e$ . Cuando el potencial  $v_e$  supera un cierto umbral,  $v_e > V_{min}$ , el líquido forma un cono de Taylor y rompe en gotas desde el vértice formando el electrospray.

El análisis teórico del electrospray se hará admitiendo cinco hipótesis fundamentales, las cuales se mantendrán a lo largo de todo el trabajo. Estas hipótesis son las siguientes:

1. Emisión en régimen estacionario.
2. Líquido infinitamente conductor.
3. Electrospray monodisperso, es decir, todas las gotas emitidas son idénticas con masa  $m_d$  y carga (positiva)  $e$ . Además, asumiremos que las gotas no se evaporan una vez emitidas.
4. Hipótesis del continuo, la cual permite describir el electrospray usando un modelo euleriano.
5. Electrospray axisimétrico, es decir, todos los campos son independientes del ángulo azimutal.

Hay que resaltar que las hipótesis anteriores conducen a una descripción muy simplista del sistema, pues estamos obviando por completo el complejo proceso de la formación de las gotas. Este proceso es el que determina finalmente el tamaño y la masa de las gotas y la velocidad con la que son emitidas [13], [22], [23]. No obstante, estas hipótesis son necesarias para simplificar la parte matemática del problema. En particular, la hipótesis de líquido conductor perfecto permite desacoplar el problema externo al cono líquido del problema en la fase líquida. En efecto, dentro de la fase líquida el campo eléctrico es nulo y la interfase es una superficie equipotencial. De esta forma, el análisis del electrospray requiere resolver sólo el problema en la región externa al cono y la hipótesis de conductor perfecto proporciona una condición de contorno para dicho problema.

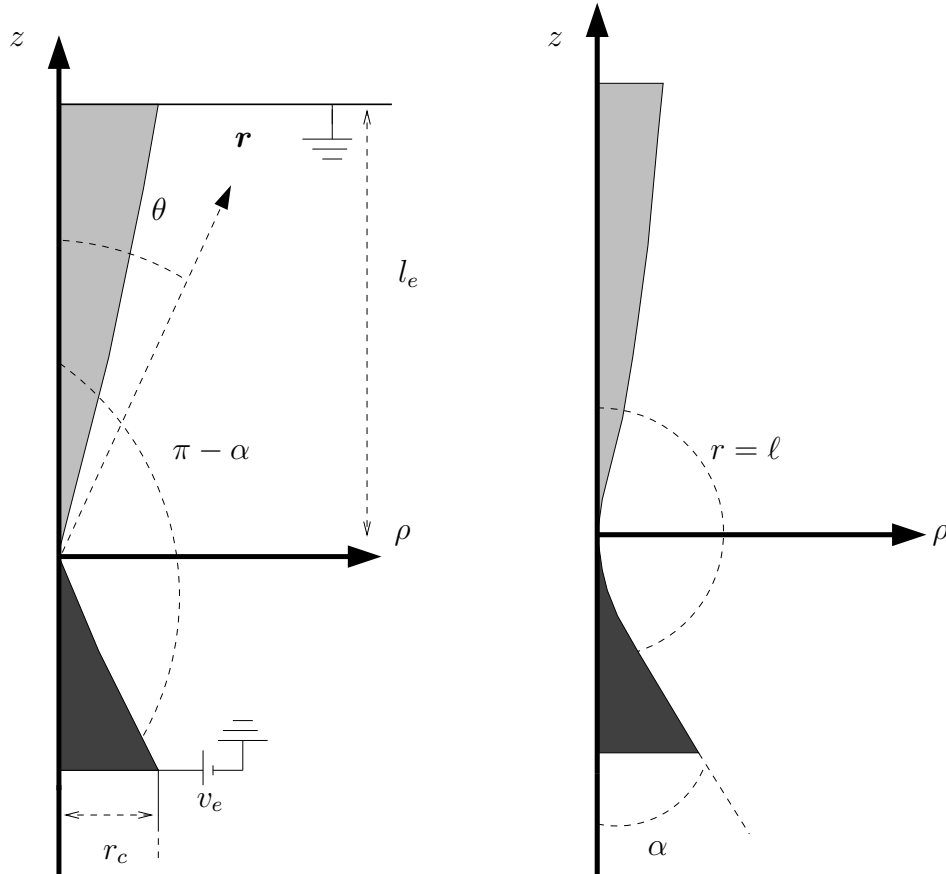


Figura 2.5: Esquema de un electro-spray en vacío (izquierda) y detalle de la región de carga espacial (derecha)

El análisis euleriano del electro-spray en régimen estacionario se hace por medio de tres campos dependientes sólo de la posición. Estos campos son la densidad numérica de gotas  $n(\mathbf{r})$ , el campo de velocidades del electro-spray  $\mathbf{v}(\mathbf{r})$  y el potencial eléctrico  $\phi(\mathbf{r})$ , donde  $\mathbf{r}$  es el vector de posición referido a un cierto origen. La hipótesis de electro-spray axisimétrico implica que los campos sólo tienen dos coordenadas espaciales independientes. En particular, en este trabajo usaremos coordenadas esféricas  $(r, \theta)$ , coordenadas cilíndricas  $(\rho, \theta)$ , o de manera alternativa cualquier par de coordenadas dadas por funciones invertibles de las anteriores.

El modelo euleriano que describe el electro-spray consiste en un conjunto de tres ecuaciones en derivadas parciales para los tres campos  $n$ ,  $\mathbf{v}$  y  $\phi$  y que deberán de acompañarse de las correspondientes condiciones de contorno y de regularidad. Las ecuaciones fundamentales que se deben considerar son:

- las ecuaciones de movimiento de cada gota en el electro-spray, las cuales están dadas por la ecuación del momento

$$m_d \left( \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right) = -e \nabla \phi, \quad (2.42)$$

la cual, asumiendo estado estacionario, se simplifica a

$$m_d(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} + e \nabla \phi = 0, \quad (2.43)$$

- la ecuación de Poisson

$$\nabla^2 \phi = -\frac{en}{\epsilon_0}, \quad (2.44)$$

- y la ecuación de continuidad

$$\nabla \cdot (en\mathbf{v}) = 0. \quad (2.45)$$

Teniendo en cuenta la simetría del problema, tenemos cuatro funciones incógnitas: la densidad de gotas,  $n$ , las dos componentes del campo de velocidades,  $\mathbf{v} = (v_r, v_\theta) = (v_\rho, v_z)$ , y el potencial eléctrico,  $\phi$ . De esta forma, las ecuaciones (2.42)-(2.42) constituyen un sistema completo de EDPs porque proporcionan cuatro ecuaciones (las dos ecuaciones independientes del momento (2.43), la ecuación de Poisson (2.44) y la ecuación de continuidad (2.45)) para las cuatro funciones incógnitas del problema.

Como ya se ha comentado, las ecuaciones anteriores deben suplementarse con las condiciones de contorno que deben ser satisfechas sobre las superficies que limitan el dominio físico del sistema. Estas superficies incluyen la interfase líquida, el tubo capilar, el electrodo extractor y paredes laterales de la cámara. Por otra parte, dada la condición de axisimetría, deberán imponerse también las correspondientes condiciones de regularidad de los campos sobre el eje de simetría  $z$ . Por otra parte, asumiremos en todo este trabajo que la corriente total emitida por el electrospray  $I$  es conocida. Así, la condición de conservación de la carga eléctrica impone la condición adicional

$$I = \int_S \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} \, da, \quad (2.46)$$

donde  $\mathbf{J} = en\mathbf{v}$  es el vector densidad de corriente,  $S$  es una superficie regular que englobe por completo el vértice del cono, pero por lo demás arbitraria, y  $\mathbf{n}$  es el vector normal unitario a la superficie  $S$  y tomado hacia afuera de la superficie.

Los experimentos con electrosprays en vacío (ver, entre otros, [8, 9]) muestran que la forma cónica es, en realidad, modificada cerca del vértice del cono y esto ocurre como consecuencia de los efectos de carga espacial [15]. Los efectos de carga espacial son dominantes dentro de una muy pequeña vecindad de radio  $\ell$  alrededor del vértice del cono. Esta pequeña región se denomina *región de carga espacial* (ver figura 2.5) y está caracterizada por una significativa repulsión coulombiana [23]. Esto quiere decir que dentro de la región de carga espacial el campo eléctrico externo es despreciable comparado con el campo eléctrico producido por la distribución de carga espacial. La longitud  $\ell$  (denominada *space charge length* o *longitud de carga espacial*) es desconocida a priori y deberá ser obtenida como parte de la solución del problema. Conforme aumenta la distancia al vértice, los efectos de carga espacial se van haciendo menos dominantes de forma que las trayectorias de las gotas tienden a una forma asintótica determinada sólo por el campo externo del cono líquido.

En consecuencia, lo anterior esto añade una nueva dificultad porque la interfase líquida desconocida debe ser también obtenida como parte de la solución. La interfase desconocida y el campo eléctrico  $\mathbf{E}$  deben satisfacer la condición de equilibrio mecánico [13]

$$\gamma \nabla \cdot \mathbf{n} - \frac{1}{2} \epsilon_0 (\nabla \phi \cdot \mathbf{n})^2 = \Delta p, \quad (2.47)$$

donde  $\mathbf{n}$  es la normal positiva a la interfase y  $\Delta p$  es la diferencia entre la presión en el líquido conductor y la presión externa (la cual debe obtenerse también del análisis).

En resumen, con las hipótesis asumidas, el sistema tiene cuatro parámetros físicos independientes:  $m_d$ ,  $e$ ,  $\gamma$  y  $I$ , los cuales se supondrán conocidos en todo el trabajo. El análisis del electrospray se hace por medio de tres campos,  $n$ ,  $\mathbf{v}$  y  $\phi$ , que dependen sólo de la posición y se asume que el sistema tiene simetría azimutal. Estos tres campos, junto con la forma de la interfase líquida, constituyen las funciones incógnitas del problema y están relacionadas por las ecuaciones fundamentales (2.42)-(2.42) y (2.47), las cuales deberán acompañarse de las correspondientes condiciones de contorno y regularidad.

## Descripción del problema y metodología

El problema general que se va a estudiar en este trabajo consiste en el análisis euleriano de la distribución de carga espacial emitida por *vaporización iónica* desde la superficie de un cono de Taylor en vacío. El fundamento del fenómeno de la vaporización iónica es la emisión de iones desde la superficie de un cuerpo conductor (sólido o líquido) inducida por el campo eléctrico externo creado por una diferencia de potencial entre dicho cuerpo y un electrodo lejano. De esta forma, los iones se mueven bajo la acción conjunta del campo externo y el que crea la propia distribución de carga espacial. Este movimiento de iones origina una corriente eléctrica, cuya intensidad se hace mayor conforme disminuye el campo eléctrico sobre la superficie emisora. La emisión en el límite en el que el campo sobre la superficie de emisión tienda a cero se denomina *emisión limitada por carga espacial* y, en este límite, la intensidad de corriente alcanza su valor máximo.

El fenómeno de la vaporización iónica es fácil de explicar y bien conocido en diodos o sistemas formados por dos electrodos metálicos con geometrías sencillas (ver capítulo 3). Por contra, cuando la emisión de iones ocurre desde la interfase líquida de un cono de Taylor, la complejidad es enorme, incluso admitiendo las cinco hipótesis mencionadas anteriormente y que vamos a considerar a lo largo del trabajo. En particular, la complejidad es debida a cuatro motivos:

1. La dificultad de las ecuaciones.
2. Las singularidades geométricas existentes.
3. La disparidad de escalas de longitud.
4. La existencia de una interfase desconocida (la superficie del menisco cónico) que debe obtenerse como parte de la solución.

En primer lugar, las ecuaciones fundamentales (ecuaciones (2.43)-(2.45)) son suficientemente conocidas. No obstante, su dificultad es considerable pues sólo la ecuación de Poisson (2.44) es lineal. Por esta razón, el sistema de ecuaciones anterior no es susceptible de ser resuelto de manera analítica y sólo podrá ser abordado numéricamente. En segundo lugar, hay que añadir otra dificultad originada por la geometría del problema. En efecto, hay dos tipos singularidades geométricas que han de resolverse de forma analítica antes de iniciar la resolución numérica del problema. La primera singularidad está localizada en el vértice del cono, la cual induce

el correspondiente comportamiento singular de los campos y/o sus derivadas espaciales en dicho punto. Y la otra singularidad se encuentra sobre la línea de anclaje del menisco cónico con el tubo capilar. En tercer lugar, es de resaltar la diferencia tan grande entre las escalas de longitud que existen en el problema. Para hacernos una idea [15], la longitud de carga espacial  $\ell$  puede llegar a ser entre dos y tres órdenes de magnitud más pequeña que el radio del tubo capilar  $r_c$ . Esta disparidad de escalas dificulta enormemente el tratamiento numérico del problema. Por último, la superficie del cono líquido es modificada por efectos de carga espacial y su forma debe obtenerse del análisis. De esta manera, la dinámica del electro spray y la forma de la interfase líquida son, estrictamente hablando, dos problemas acoplados que deben resolverse conjuntamente, lo cual constituye, sin duda, la principal dificultad. Estas dificultades nos obligan a buscar más hipótesis que faciliten la resolución del problema.

Como ya se ha dicho, la mayor dificultad estriba en que la propia superficie emisora es desconocida y debe encontrarse como parte de la solución del problema. A lo largo de este trabajo admitiremos que la forma geométrica de la interfase líquida es perfectamente cónica, con un semiángulo  $\alpha$  que debe obtenerse como parte de la solución. Esto equivale a imponer que el término de presión,  $\Delta p$ , que aparece en la ecuación de equilibrio mecánico o de balance sobre la interfase líquida (ecuación (2.47)) es nulo,  $\Delta p = 0$ . Esto supone una simplificación notable porque se desacopla el problema de la dinámica del electro spray del problema de la forma de la interfase, y el análisis se centra sólo en la dinámica del electro spray. De esta forma, la mencionada condición de equilibrio mecánico (2.47) (con  $\Delta p = 0$ ) pasa a ser, en realidad, una condición de contorno más del problema, la cual es prescrita sobre la superficie del cono (que es conocida a priori). Esta hipótesis puede justificarse en el hecho de que el acoplamiento entre los dos problemas (dinámica del electro spray y forma de la interfase) es pequeño [22], [41] y esto posibilita que ambos puedan resolverse aproximadamente de una forma independiente. En cualquier caso, se debe tener presente que la resolución rigurosa del problema requeriría obtener el término  $\Delta p$  y, por tanto, la forma de la interfase líquida como parte de la solución.

Por otra parte, asumiremos la hipótesis fundamental por la cual el campo de velocidades del electro spray es irrotacional, es decir, deriva del gradiente de un campo escalar  $\psi$

$$\mathbf{v} = \nabla\psi, \quad (2.48)$$

el cual se denominará potencial de velocidad. De esta forma, la ecuación del momento (2.43), que implica automáticamente la ecuación de conservación de la energía, la ecuación de Poisson (2.44) y la ecuación de continuidad (2.45) forman un sistema de EDPs para sólo tres campos escalares:  $n$ ,  $\phi$  and  $\psi$ . Por lo tanto, admitiendo la hipótesis (2.48), el conocimiento de los tres campos escalares,  $n$ ,  $\phi$  y  $\psi$ , es suficiente para la descripción completa del electro spray. Esto, desde luego, supone una notable simplificación desde el punto de vista matemático y es la base del Modelo Euleriano Simplificado (SEM) [32] que será usado para resolver el problema. La validez de la hipótesis (2.48) será justificada en el capítulo 3.

Finalmente, el análisis no abarcará todo el dominio del problema, sino que se centrará en la región espacial que abarca distancias del vértice mucho menores que las dimensiones del capilar,  $r \ll r_c$  (ver figura 2.5, derecha), en la cual los efectos de carga espacial no son despreciables y necesariamente deben tenerse en cuenta. Esto es equivalente a considerar que el electrodo extractor está en el infinito y que la interfase líquida del cono de Taylor tiene extensión infinita. De esta forma, las condiciones de contorno sobre el electrodo extractor deben sustituirse por condiciones de campo lejano que sean apropiadas en el problema. Además, en el subdominio



de interés ( $r \ll r_c$ ) no existe ninguna longitud geométrica característica y, por tanto, deberá buscarse una escala característica que esté basada en los parámetros físicos del sistema:  $\gamma$ ,  $e$ ,  $I$ ,  $m_d$ .

Los objetivos más importantes que persigue el estudio de este problema son los siguientes:

1. Obtener la longitud de carga espacial  $\ell$ .
2. Conocer la dependencia espacial de los campos.
3. Analizar los efectos de carga espacial sobre el ángulo del cono líquido.
4. Analizar la distribución estadística de la carga espacial, cerca y lejos del vértice.
5. Encontrar la forma geométrica del electrospray y, en particular, la forma de las trayectorias de las gotas.
6. Estudiar si el tipo de emisión que estudiamos en este trabajo está limitada por carga espacial.

A pesar de las hipótesis simplificadoras que acabamos de introducir, el problema presenta aún dificultades de índole matemático que imposibilitan la resolución analítica del mismo. Es más, por lo dicho antes, la existencia de la singularidad geométrica que existe en el vértice obliga a que el problema se deba resolver en dos partes separadas:

- En una primera parte, debemos obtener analíticamente el comportamiento singular de los campos en la inmediata vecindad del vértice del cono. Esta parte del problema se denominará en este trabajo *parte singular*.
- La forma de los campos cerca del vértice, obtenida en la parte anterior, se debe usar para iniciar la integración numérica que permita prolongar la solución a regiones más extensas. Esta parte del problema se denominará en el trabajo *parte regular*.

La formulación matemática del SEM para el problema se hará en el capítulo 3. La parte singular se abordará con todo detalle en los capítulos 5 y 6, y se resolverá admitiendo que el comportamiento de los tres campos escalares en la proximidad del vértice puede describirse por medio de soluciones separables en coordenadas esféricas  $(r, \theta)$  con leyes de potencias para la coordenada radial  $r$ . Por su parte, la parte regular se tratará en el capítulo 7 y se llevará a cabo por medio del algoritmo en diferencias finitas. La descripción detallada del algoritmo numérico se verá en el capítulo 4, al estudiar la dispersión numérica de carga procedente de un cono de Taylor *redondeado*. En este problema se supone que el cono de Taylor finaliza en un casquete esférico, desde el cual se supone se emite la carga con un perfil prescrito. De esta forma, se evita la singularidad geométrica y el problema es puramente numérico. El algoritmo numérico usado en este problema se aplicará en el capítulo 7 para resolver la parte regular del problema.

# Capítulo 3

## Modelo Euleriano Simplificado (SEM)

### 3.1. Justificación y ecuaciones fundamentales

Es bien conocido [46] que la emisión de carga eléctrica desde superficies conductoras ocurre bajo la influencia de campos eléctricos intensos (*emisión por efecto de campo*) o altas temperaturas (*emisión térmica*). En particular, el problema que se investiga en este trabajo consiste en la vaporización iónica en conos de Taylor inducida por campos externos y, por tanto, corresponde físicamente a un problema de emisión por efecto de campo.

El fundamento de un problema de emisión por efecto campo es muy simple y se puede resumir de la siguiente manera. Consideremos dos superficies conductoras en vacío (o electrodos) y entre las que se establece una diferencia de potencial, aplicada por ejemplo mediante una batería. Entre los electrodos existe, entonces, un campo eléctrico. Bajo ciertas circunstancias, el campo eléctrico puede “extraer” iones de un electrodo y acelerarlos hacia el otro. Esta distribución de cargas en movimiento crea una corriente eléctrica entre los dos electrodos y, a su vez, la nube de cargas determina el potencial eléctrico en la región del espacio entre los electrodos. Cuando la densidad de carga se incrementa, el campo extractor sobre la superficie emisora disminuye. Es claro que debe existir una densidad de carga espacial máxima que produzca tal repulsión que impida la emisión de más carga; en estas condiciones, el campo eléctrico extractor sobre el electrodo emisor será nulo y la corriente eléctrica será máxima. Esta corriente máxima se llama *corriente limitada por distribución de carga espacial*. La meta del problema es la descripción de la distribución de la carga espacial entre los dos electrodos, lo cual (desde un punto de vista euleriano) pasa por obtener tres campos: densidad de carga espacial, potencial eléctrico y campo de velocidades.

Una vez resuelto el problema se debe obtener la relación que existe entre la corriente eléctrica y la diferencia de potencial aplicada, en particular, en el caso de corriente limitada por la carga espacial. Esta relación se aplica, en la práctica, en Electrónica y en técnicas de detección de señales y puede ser formalmente encontrada sea cual sea la geometría de los electrodos. La relación es bien conocida para el caso de geometrías sencillas: por ejemplo, el caso del diodo plano (los electrodos son plano-paralelos) [4], [34], el diodo esférico (los electrodos son esferas concéntricas) [36] y el diodo cilíndrico (los electrodos son superficies cilíndricas) [35]. En estos casos el problema es unidimensional (1D), lo que hace que sea sencillo de resolver.

La emisión desde un cono de Taylor en vacío es un problema en dos dimensiones (2D) y, por tanto, mucho más complejo de resolver desde un punto de vista matemático. No obstante, el problema matemático en sistemas 2D se puede simplificar asumiendo la hipótesis de que el campo de velocidades sea irrotacional [15], es decir, deriva de un potencial escalar (o potencial de velocidad), pues, en tal caso, el problema matemático se reduce a la obtención de sólo tres campos escalares: la densidad de carga espacial, el potencial eléctrico y el potencial de velocidad. Este es el fundamento del *Modelo Euleriano Simplificado* o abreviadamente SEM y será usado para resolver el problema propuesto en este trabajo (ver sección 3.3). Es importante señalar que el SEM no es exclusivo de los electrosprays sino que puede ser aplicado a otros sistemas con la única condición de que el campo de velocidades sea irrotacional (ver, por ejemplo, [3] y [19]). Por esta razón, la formulación matemática de dicho modelo se hará de una forma completamente general (ver debajo).

La descripción euleriana en régimen estacionario de un sistema arbitrario de partículas idénticas con carga eléctrica  $e$  y masa  $m_d$  se obtiene, como es bien sabido, mediante tres campos: la densidad numérica de iones  $n(\mathbf{r})$  (la cual, por definición, es siempre una función positiva), el potencial eléctrico  $\phi(\mathbf{r})$  y el campo de velocidades  $\mathbf{v}(\mathbf{r})$  los cuales serán sólo función del vector posición  $\mathbf{r}$  referido a un cierto origen. Las ecuaciones fundamentales del modelo euleriano están dadas por la ecuación del momento

$$m_d \left( \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right) = e\mathbf{E}, \quad (3.1)$$

la cual, en régimen estacionario, se reduce a

$$m_d (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} - e\mathbf{E} = 0, \quad (3.2)$$

la ecuación de Poisson

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{en}{\epsilon_0}, \quad (3.3)$$

y la ecuación de continuidad

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = 0, \quad (3.4)$$

donde

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi \quad (3.5)$$

es el campo eléctrico y

$$\mathbf{J} = en\mathbf{v} \quad (3.6)$$

es el vector densidad de corriente. Las ecuaciones anteriores proporcionan entonces un sistema de EDPs para los tres campos:  $n$ ,  $\phi$  y  $\mathbf{v}$ . El problema matemático consiste básicamente en la resolución de las ecuaciones (3.2)-(3.4) con (3.5) y (3.6) a las que habrá que añadir las correspondientes condiciones de contorno, las cuales se fijarán una vez conocida la geometría del problema particular a resolver.

Usando la conocida identidad vectorial [40]

$$\frac{1}{2} \nabla v^2 = \mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{v}) + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v}, \quad (3.7)$$

y teniendo en cuenta (3.5), la ecuación del momento (3.2) se escribe

$$\nabla \left( \frac{1}{2} m_d v^2 + e\phi \right) = m_d \mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{v}). \quad (3.8)$$

Supongamos ahora que el campo de velocidades  $\mathbf{v}$  es irrotacional, esto es

$$\nabla \times \mathbf{v} = \mathbf{0}. \quad (3.9)$$

Lo anterior (3.9) es equivalente a afirmar que el campo de velocidades  $\mathbf{v}$  deriva del gradiente de un campo escalar  $\psi$

$$\mathbf{v} = \nabla\psi, \quad (3.10)$$

el cual será denominado *potencial de velocidad*. De esta forma, la ecuación del momento se reduce a

$$\nabla \left( \frac{1}{2} m_d v^2 + e\phi \right) = \mathbf{0}, \quad (3.11)$$

lo que implica necesariamente la ecuación de conservación de la energía

$$\frac{1}{2} m_d v^2 + e\phi = \text{constante}. \quad (3.12)$$

Por tanto, asumiendo la hipótesis (3.10) se simplifica el análisis euleriano del sistema porque encontramos que el conocimiento de los tres campos escalares  $n$ ,  $\phi$  y  $\psi$  es suficiente para obtener la descripción Euleriana del sistema. Las tres ecuaciones que determinan los tres campos escalares anteriores están dadas por:

- la ecuación de conservación de la energía

$$\frac{1}{2} m_d (\nabla\psi)^2 + e\phi = \text{constante}, \quad (3.13)$$

- la ecuación de Poisson

$$\nabla^2 \phi = -\frac{en}{\epsilon_0}, \quad (3.14)$$

- y la ecuación de continuidad

$$\nabla \cdot (en \nabla\psi) = 0. \quad (3.15)$$

La hipótesis (3.10) junto con el sistema de ecuaciones en derivadas parciales (3.13)-(3.15) constituyen las ecuaciones fundamentales del Modelo Euleriano Simplificado o SEM. Como ya se ha dicho, este sistema de ecuaciones deberá resolverse junto con condiciones de contorno apropiadas, las cuales se podrán prescribir una vez conocido el problema particular que se esté estudiando. Por supuesto, la aplicación del SEM está supeditada al cumplimiento de la hipótesis (3.10), la cual, entonces, debe ser justificada en el problema concreto considerado.

## 3.2. Aplicación en geometrías sencillas

En los casos de configuración con simetría plana, esférica y cilíndrica, la simetría del sistema implica automáticamente que el campo de velocidades  $\mathbf{v}$  es irrotacional y la aplicación del SEM con los tres campos escalares ( $n$ ,  $\phi$  y  $\psi$ ) es posible. No obstante, en los tres casos el problema es unidimensional (1D) y el campo de velocidades tiene una sola componente. Por esta razón, el uso del potencial de velocidad  $\psi$  en dichos casos no aporta nada y es totalmente innecesario. Los problemas de emisión por efecto de campo en superficies sólidas metálicas con simetría plana (diodo plano), esférica (diodo esférico) y cilíndrica (diodo cilíndrico) son bien conocidos y constituyen una motivación al problema central de este trabajo. Por este motivo, serán analizados con detalle a continuación.

### 3.2.1. Diodo plano

La figura 3.1 muestra el esquema de un diodo plano. El dispositivo está formado por dos placas conductoras, plano-paralelas (en vacío) separadas por una distancia  $L$  y entre las que se establece una diferencia de potencial  $V$  (con  $V > 0$ ). Desde el ánodo se emiten iones con masa  $m_d$ , carga positiva  $e > 0$  y con velocidad inicial nula hacia el cátodo. Es claro que en esta configuración sólo hay una coordenada espacial independiente (por ejemplo, la coordenada cartesiana  $z$ ) y la velocidad de los iones está en dicha dirección, es decir  $\mathbf{v}(z) = v(z) \mathbf{u}_z$ , donde  $\mathbf{u}_z$  es el vector unitario en la dirección y sentido de  $z$ . En total, el análisis euleriano de este sistema se hace por medio de tres funciones escalares dependientes sólo de dicha coordenada:  $n(z)$ ,  $\phi(z)$  y  $v(z)$ .

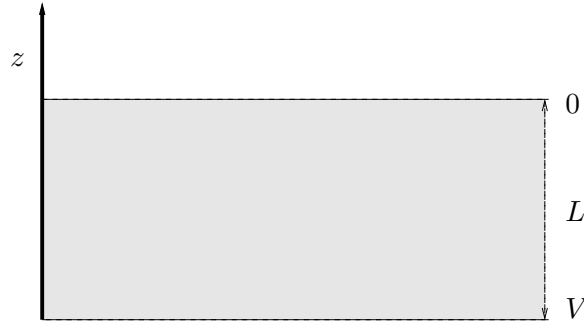


Figura 3.1: Diodo plano.

En esta configuración, la ecuación de conservación de la energía (3.12) (tener en cuenta que  $\nabla \times \mathbf{v} = \mathbf{0}$ ), la ecuación de Poisson (3.14) y la ecuación de continuidad (3.15) se deben considerar en la región  $0 < z < L$  para determinar las tres funciones  $n(z)$ ,  $\phi(z)$  y  $v(z)$  y adoptan una forma muy sencilla. En primer lugar, la ecuación de Poisson (3.14) se reduce a

$$\frac{d^2\phi}{dz^2} = -\frac{en}{\epsilon_0}, \quad (3.16)$$

la ecuación de conservación de la energía (3.12) lleva a

$$\frac{1}{2}m_d v^2 + e\phi = eV, \quad (3.17)$$

donde estamos tomando origen de potenciales en el cátodo y finalmente, de la ecuación de continuidad (3.15) obtenemos

$$J = env = \text{constante}, \quad (3.18)$$

donde  $J$  representa el módulo de la densidad de corriente. Así pues, el problema tiene realmente un grado de libertad dado por el parámetro  $J$ .

Las ecuaciones anteriores se pueden desacoplar fácilmente; en particular, después de operar, obtenemos que el potencial eléctrico  $\phi$  cumple la siguiente ecuación

$$\frac{d^2\phi}{dz^2} = -\frac{J}{\epsilon_0} \sqrt{\frac{m_d}{2e}} (V - \phi)^{-1/2}, \quad (3.19)$$

la velocidad  $v$  está dada por

$$v = \sqrt{\frac{2e}{m_d}} (V - \phi)^{1/2}, \quad (3.20)$$

y la densidad de carga se calcula mediante

$$en = J \sqrt{\frac{m_d}{2e}} (V - \phi)^{-1/2}. \quad (3.21)$$

Las condiciones de contorno del problema se fijan prescribiendo, por una parte, el potencial eléctrico y su gradiente sobre el electrodo emisor o ánodo ( $z = 0$ )

$$\phi(0) = V, \quad (3.22)$$

$$\frac{d\phi}{dz}(0) = -E_0, \quad (3.23)$$

donde  $E_0 > 0$  es el módulo del campo eléctrico extractor, y por otra, el potencial eléctrico sobre el cátodo ( $z = L$ )

$$\phi(L) = 0. \quad (3.24)$$

En total, fijando la magnitud del campo extractor  $E_0$ , debemos obtener las tres funciones incógnitas  $n(z)$ ,  $\phi(z)$  y  $v(z)$  y el valor de la densidad de corriente  $J$ . Para resolver este problema es útil formularlo en forma adimensional. Para ello, introducimos las siguientes variables sin dimensiones

$$Z \equiv \frac{z}{L}, \quad j \equiv \frac{JL^2}{\epsilon_0 V^{3/2}} \sqrt{\frac{m_d}{2e}}, \quad \Phi \equiv j^{-2/3} \frac{V - \phi}{V}, \quad p \equiv j^{-2/3} \frac{E_0 L}{V}. \quad (3.25)$$

Entonces, en las nuevas variables tenemos el siguiente problema para  $\Phi$

$$\frac{d^2\Phi}{dZ^2} = \Phi^{-1/2} \quad (0 < Z < 1), \quad \Phi(0) = 0, \quad \frac{d\Phi}{dZ}(0) = p, \quad (3.26)$$

con  $p \geq 0$  y del que una vez resuelto, obtenemos

$$j = \Phi^{-3/2}(1), \quad (3.27)$$

$$\phi(z) = V (1 - j^{2/3} \Phi(z/L)), \quad (3.28)$$

$$v(z) = j^{1/3} \sqrt{\frac{2e}{m_d}} V^{1/2} \Phi^{1/2}(z/L), \quad (3.29)$$

$$en(z) = j^{2/3} \frac{\epsilon_0 V}{L^2} \Phi^{-1/2}(z/L), \quad (3.30)$$

$$J = j \frac{\epsilon_0 V^{3/2}}{L^2} \sqrt{\frac{2e}{m_d}}, \quad (3.31)$$

para un campo extractor dado por

$$E_0 = p \frac{V}{L} j^{2/3}. \quad (3.32)$$

El plan entonces es resolver el problema definido por (3.26) para cada valor del parámetro  $p$ , lo que permite obtener el valor de la densidad de corriente  $J$  y los tres campos  $\phi(z)$ ,  $v(z)$  y  $n(z)$  por medio de (3.27)-(3.31) para el valor del campo extractor  $E_0$  dado por (3.32).

Resolvamos primero el caso trivial en el que no exista carga espacial, esto es,  $n(z) = 0$ . Este caso es resoluble analíticamente como veremos a continuación. En efecto, como no existe corriente eléctrica entre las placas, sólo debemos obtener la distribución del potencial eléctrico  $\phi(z)$ ; así, la ecuación de Poisson (3.16) se reduce a la ecuación de Laplace y todo lo que hay que hacer es resolver

$$\frac{d^2\phi}{dz^2} = 0 \quad (0 < z < L), \quad \phi(0) = V, \quad \phi(L) = 0. \quad (3.33)$$

Después de una sencilla integración, encontramos

$$\phi(z) = V \left(1 - \frac{z}{L}\right) \quad (0 \leq z \leq L), \quad (3.34)$$

es decir, obtenemos que la distribución del potencial eléctrico es lineal.

Como hemos visto, para el caso en el que exista carga espacial debemos resolver el problema (3.26) para cada valor de  $p$ . El problema es de orden dos, pero es posible integrar una vez y reducir el orden. En efecto, multiplicando los dos miembros de la EDO de (3.26) por  $2d\Phi/dZ$ , integrando y aplicando la correspondiente condición de contorno para  $d\Phi/dZ$  se obtiene el siguiente problema de orden uno para  $\Phi(z)$

$$\frac{d\Phi}{dZ} = \sqrt{4\Phi^{1/2} + p^2} \quad (0 < Z < 1), \quad \Phi(0) = 0. \quad (3.35)$$

El caso límite de corriente máxima (o corriente limitada por la carga espacial) se resuelve ahora de forma muy sencilla. En este caso,  $p = 0$  y el problema (3.35) tiene solución analítica dada por

$$\Phi(Z) = \left(\frac{3}{2}\right)^{4/3} Z^{4/3} \quad (0 \leq Z \leq 1), \quad (3.36)$$

de donde  $j = 4/9$  y entonces,

$$\phi(z) = V \left[1 - \left(\frac{z}{L}\right)^{4/3}\right] \quad (0 \leq z \leq L), \quad (3.37)$$

$$v(z) = \sqrt{\frac{2e}{m_d}} V^{1/2} \left(\frac{z}{L}\right)^{2/3} \quad (0 \leq z \leq L), \quad (3.38)$$

$$en(z) = \frac{4}{9} \frac{\epsilon_0 V}{L^2} \left(\frac{z}{L}\right)^{-2/3} \quad (0 < z \leq L), \quad (3.39)$$

$$J = \frac{4}{9} \frac{\epsilon_0 V^{3/2}}{L^2} \sqrt{\frac{2e}{m_d}}. \quad (3.40)$$

La ecuación (3.40) es conocida como ley de Child-Langmuir para el diodo plano [4], [34]. Es importante resaltar la relación no lineal que se obtiene entre la corriente eléctrica y el potencial.

Finalmente, para el caso  $p > 0$ , el problema dado por (3.35) debe abordarse numéricamente. En particular, la tabla 3.1 muestra el valor del parámetro  $j$  obtenido para algunos valores del

$p$	0	1	2	3
$j$	$\frac{4}{9}$	0,3234	0,2052	0,1384
$\frac{E_0}{VL^{-1}}$	0	0,4712	0,6958	0,8028

Tabla 3.1: Resultados numéricos obtenidos para el diodo plano.

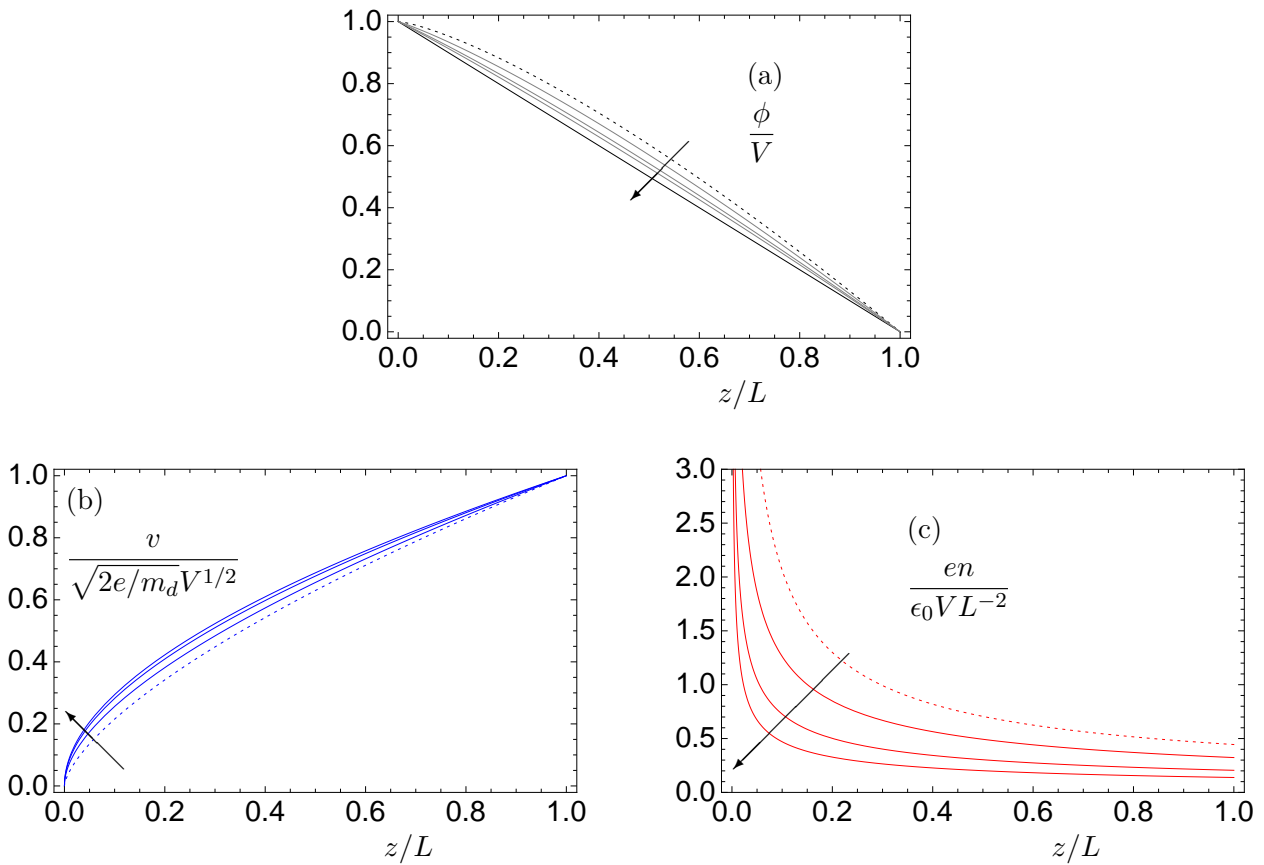


Figura 3.2: Funciones  $\phi$ ,  $v$  y  $n$  (sin dimensiones) para los valores del campo extractor (adimensional)  $E_0/(VL^{-1})$  de la tabla 3.1. El sentido de la flecha en cada gráfica indica el orden creciente de los valores del campo extractor adimensional. La curva punteada representa el caso de corriente máxima. En (a), se representa también el caso trivial en el que no existe carga espacial.



parámetro  $p$ . La figura 3.2 representa las gráficas de las funciones  $\phi$ ,  $v$  y  $en$  (sin dimensiones) como función de la coordenada espacial (adimensional)  $Z = z/L$  para los valores del campo eléctrico extractor (adimensional)  $E_0/(VL^{-1})$  que se muestran en dicha tabla. Como se puede apreciar, la densidad de carga se hace infinita sobre la placa emisora, lo cual ya podía anticiparse a partir de la ecuación (3.18). Por otra parte, el potencial eléctrico es una función decreciente de  $z$  indicando, como era esperable, que el campo eléctrico tiene la dirección positiva del eje  $z$ . Notar, por último, que la velocidad de los iones es positiva indicando que su movimiento ocurre en la dirección y sentido del eje  $z$ , es decir, desde el ánodo al cátodo, lo cual también se esperaba al tener los iones carga positiva y ser emitidos con velocidad inicial nula desde el ánodo.

### 3.2.2. Diodo esférico

La figura 3.3 muestra el esquema de un diodo esférico. En este caso, el diodo está formado por dos placas conductoras, esféricas concéntricas de radios  $r_0$  y  $r_1$  (con  $r_0 < r_1$ ). Como antes, se asume que desde el ánodo se emiten iones positivos con velocidad inicial igual a cero hacia el cátodo. En esta configuración la coordenada espacial independiente es la coordenada esférica radial  $r$ , y la velocidad de los iones está dada por  $\mathbf{v}(r) = v(r) \mathbf{u}_r$ , donde  $\mathbf{u}_r$  es el vector unitario correspondiente a la coordenada  $r$ . Así, el análisis euleriano del sistema se hace por medio de tres funciones escalares dependientes sólo de dicha coordenada:  $n(r)$ ,  $\phi(r)$  y  $v(r)$ .

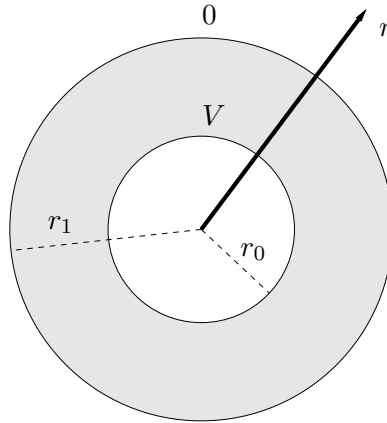


Figura 3.3: Diodo esférico.

Como en el caso anterior el campo de velocidades es irrotacional y, por lo tanto, la ecuación de conservación de la energía (3.12), la ecuación de Poisson (3.14) y la ecuación de continuidad (3.15) se deben considerar en la región  $r_0 < r < r_1$  para determinar las tres funciones  $n(r)$ ,  $\phi(r)$  y  $v(r)$ . La ecuación de Poisson (3.14) se reduce a

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d\phi}{dr} \right) = -\frac{en}{\epsilon_0}, \quad (3.41)$$

la ecuación de conservación de la energía (3.12) conduce a

$$\frac{1}{2} m_d v^2 + e\phi = eV, \quad (3.42)$$

donde (otra vez) estamos tomando origen de potenciales en el cátodo y de la ecuación de continuidad (3.15) sacamos

$$r^2 env = i = \text{constante}, \quad (3.43)$$

donde  $i \equiv I/(4\pi)$  siendo  $I$  la corriente total emitida (es decir,  $i$  representa físicamente la corriente emitida por unidad de ángulo sólido). Así pues, el problema tiene un grado de libertad dado, en este caso, por el parámetro  $i$ .

Las ecuaciones anteriores se pueden desacoplar fácilmente; después de operar, obtenemos que el potencial eléctrico  $\phi$  cumple la siguiente ecuación diferencial

$$\frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d\phi}{dr} \right) = -\frac{i}{\epsilon_0} \sqrt{\frac{m_d}{2e}} (V - \phi)^{-1/2}, \quad (3.44)$$

la velocidad  $v$  está dada por

$$v = \sqrt{\frac{2e}{m_d}} (V - \phi)^{1/2}, \quad (3.45)$$

y la densidad de carga se obtiene mediante

$$en = \frac{i}{r^2} \sqrt{\frac{m_d}{2e}} (V - \phi)^{-1/2}. \quad (3.46)$$

Las condiciones de contorno del problema se fijan prescribiendo, por una parte, el potencial eléctrico y su gradiente sobre el electrodo emisor o ánodo ( $r = r_0$ )

$$\phi(r_0) = V, \quad (3.47)$$

$$\frac{d\phi}{dr}(r_0) = -E_0, \quad (3.48)$$

donde  $E_0 > 0$  es el módulo del campo eléctrico extractor, y por otra, el potencial eléctrico sobre el cátodo ( $r = r_1$ )

$$\phi(r_1) = 0. \quad (3.49)$$

En total, fijando la magnitud del campo extractor  $E_0$ , debemos obtener las tres funciones incógnitas  $n(r)$ ,  $\phi(r)$  y  $v(r)$  y el valor del parámetro  $i$ . Como en el caso anterior, es útil formular el problema en forma adimensional. Para ello, introducimos las siguientes variables sin dimensiones

$$X \equiv \ln \frac{r}{r_0}, \quad j \equiv \frac{i}{\epsilon_0 V^{3/2}} \sqrt{\frac{m_d}{2e}}, \quad \Phi \equiv j^{-2/3} \frac{V - \phi}{V}, \quad p \equiv j^{-2/3} \frac{E_0 r_0}{V}. \quad (3.50)$$

Entonces, en las nuevas variables tenemos el siguiente problema para  $\Phi$

$$\Phi^{1/2} \left( \frac{d^2 \Phi}{dX^2} + \frac{d\Phi}{dX} \right) = 1 \quad (0 < X < X_1), \quad \Phi(0) = 0, \quad \frac{d\Phi}{dX}(0) = p, \quad (3.51)$$

con  $p \geq 0$  y donde hemos definido  $X_1 \equiv \ln(r_1/r_0)$ . Una vez resuelto este problema, obtenemos

$$j = \Phi^{-3/2}(X_1), \quad (3.52)$$

$$\phi(r) = V \left( 1 - j^{2/3} \Phi \left( \ln \frac{r}{r_0} \right) \right), \quad (3.53)$$

$$v(r) = j^{1/3} \sqrt{\frac{2e}{m_d}} V^{1/2} \Phi^{1/2} \left( \ln \frac{r}{r_0} \right), \quad (3.54)$$

$$en(r) = j^{2/3} \frac{\epsilon_0 V}{r^2} \Phi^{-1/2} \left( \ln \frac{r}{r_0} \right), \quad (3.55)$$

$$i = j \epsilon_0 V^{3/2} \sqrt{\frac{2e}{m_d}}, \quad (3.56)$$

para un campo extractor dado por

$$E_0 = p \frac{V}{r_0} j^{2/3}. \quad (3.57)$$

El objetivo es resolver el problema definido por (3.51) para cada valor del parámetro  $p$ . Esto permite obtener, para cada valor del campo extractor  $E_0$  dado por (3.57), el valor de la intensidad (por unidad de ángulo sólido)  $i$  y los tres campos  $\phi(r)$ ,  $v(r)$  y  $n(r)$  por medio de (3.52)-(3.56). En particular, la densidad de corriente sobre el electrodo emisor (ánodo)  $J_a$  se calcula así:

$$J_a \equiv J(r_0) = \frac{i}{r_0^2} = j \frac{\epsilon_0 V^{3/2}}{r_0^2} \sqrt{\frac{2e}{m_d}}. \quad (3.58)$$

La ecuación (3.58) para el caso de corriente limitada por la carga espacial (es decir,  $p = 0$ ) es la ley de Child-Langmuir para el diodo esférico [36].

En el caso trivial en el que no exista carga espacial (es decir,  $n(r) = 0$ ) sólo debemos obtener el potencial eléctrico  $\phi(r)$ ; así, la ecuación de Poisson (3.41) se reduce a la ecuación de Laplace y queda el problema

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d\phi}{dr} \right) = 0 \quad (r_0 < r < r_1), \quad \phi(r_0) = V, \quad \phi(r_1) = 0. \quad (3.59)$$

El problema (3.59) tiene solución analítica dada por

$$\phi(r) = V \frac{r_0}{r_1 - r_0} \left( \frac{r_1}{r} - 1 \right) \quad (r_0 \leq r \leq r_1). \quad (3.60)$$

En el supuesto en el que exista carga espacial debemos resolver el problema (3.51) para cada valor de  $p$ . El problema no es susceptible de ser resuelto de manera analítica y debe abordarse numéricamente. Una dificultad que nos encontramos es que este problema es singular en  $X = 0$  y, por esta razón, la singularidad debe ser resuelta analíticamente antes de iniciar la correspondiente integración numérica. Es claro que cuando  $X \rightarrow 0_+$  entonces  $d\Phi/dX \ll d^2\Phi/dX^2$ . Usando este hecho, tenemos que el problema (3.51) cerca de la singularidad se reduce al siguiente

$$\frac{d^2\Phi}{dX^2} \simeq \Phi^{-1/2}, \quad \Phi(0) = 0, \quad \frac{d\Phi}{dX}(0) = p. \quad (3.61)$$

La EDO de (3.61) puede ser integrada de una forma análoga a lo que hacíamos en el caso del diodo plano para reducir el orden del problema dando

$$\frac{d\Phi}{dX} \simeq \sqrt{4\Phi^{1/2} + p^2}. \quad (3.62)$$

$p$	0	1	20	100
$j$	0,0835	0,0790	0,009972	0,0009907
$\frac{E_0}{Vr_0^{-1}}$	0	0,1842	0,9266	0,9938

Tabla 3.2: Resultados numéricos obtenidos para el diodo esférico en el caso  $r_1/r_0 = 1000$ .

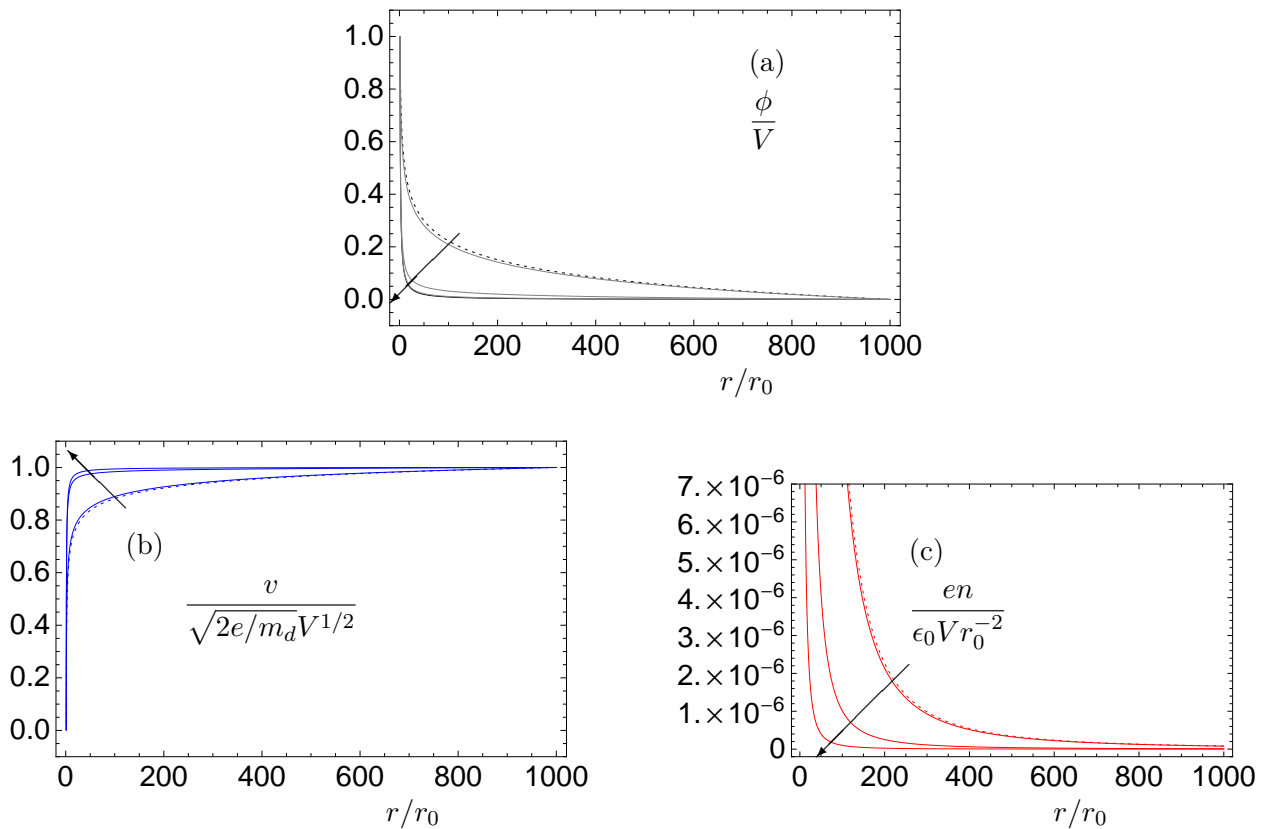


Figura 3.4: Funciones  $\phi$ ,  $v$  y  $n$  (sin dimensiones) para los valores del campo extractor (adimensional)  $E_0/(Vr_0^{-1})$  de la tabla 3.2 (caso  $r_1/r_0 = 1000$ ). El sentido de la flecha en cada gráfica indica el orden creciente de los valores del campo extractor adimensional. La curva punteada representa el caso de corriente máxima. En (a), se representa también el caso trivial en el que no existe carga espacial.

Integrando otra vez, se obtiene finalmente que si  $X \rightarrow 0_+$  entonces

$$6x \simeq p^3 + (2\Phi^{1/2} - p^2) (4\Phi^{1/2} - p^2)^{1/2}. \quad (3.63)$$

En total, debemos resolver numéricamente el problema definido por (3.51) tomando las condiciones iniciales en un valor  $X = 0 + \epsilon$  con  $\epsilon \ll 1$  con  $\Phi$  dado por (3.63) y  $d\Phi/dX$  dado por (3.62). En el caso límite de corriente limitada por la carga espacial ( $p = 0$ ), las condiciones iniciales en  $X = 0 + \epsilon$  se reducen a

$$\Phi(0 + \epsilon) \simeq \left(\frac{3}{2}\right)^{4/3} \epsilon^{4/3}, \quad \frac{d\Phi}{dX}(0 + \epsilon) \simeq 2^{2/3} \cdot 3^{1/3} \epsilon^{1/3}. \quad (3.64)$$

Es claro que el valor de  $j$  para cada valor de  $p$  (ver ecuación (3.52)) depende sólo de la razón del radio del cátodo y del ánodo ( $r_1/r_0$ ). Como ejemplo, mostramos el caso  $r_1/r_0 = 1000$  (ver tabla 3.2 y figura 3.4). La razón de esta elección es porque corresponde a condiciones realistas para un electrospray de un líquido altamente conductor [14]. Por otra parte, el valor  $\epsilon = 10^{-10}$  es usado en todos los resultados numéricos obtenidos. Otra vez (como se esperaba), la densidad de carga se hace infinita sobre el electrodo emisor, el potencial eléctrico es una función decreciente de  $r$  (es decir, el campo eléctrico tiene la dirección y sentido del vector  $\mathbf{u}_r$ ) y la velocidad de los iones es positiva (indicando que su movimiento ocurre desde el ánodo al cátodo). Resultados similares se obtienen para otros valores del cociente  $r_1/r_0$ .

Es importante notar que, en el caso del diodo plano (sección 3.2.1), todo queda determinado conociendo la masa  $m_d$  y la carga  $e$  de los iones, la diferencia de potencial entre las dos placas  $V$  y la distancia entre ellas  $L$  (observar, en particular, la ley de Child-Langmuir (ecuación 3.40)). En el caso del diodo esférico, recordando que  $j$  (para cada valor de  $p$ ) es función sólo de  $r_1/r_0$ , es evidente que todo queda determinado una vez fijemos la masa  $m_d$  y la carga  $e$  de los iones, la diferencia de potencial  $V$  entre las dos superficies y sus respectivos radios ( $r_0$  y  $r_1$ ). Para el caso particular de corriente máxima o corriente limitada por la carga espacial, el valor de  $j$  está tabulado numéricamente para un amplio rango de valores del cociente  $r_1/r_0$  (ver [36] y [55]).

### 3.2.3. Diodo cilíndrico

La figura 3.5 muestra el esquema de un diodo cilíndrico, el cual está formado por dos placas conductoras, cilíndricas concéntricas de radios  $\rho_0$  y  $\rho_1$  (con  $\rho_0 < \rho_1$ ). Como en los dos casos precedentes, se supone que desde el ánodo se emiten iones positivos con velocidad igual a cero hacia el cátodo. En esta configuración, la coordenada cilíndrica radial  $\rho$  es la coordenada independiente y, entonces, la velocidad de los iones está en dicha dirección,  $\mathbf{v}(\rho) = v(\rho) \mathbf{u}_\rho$ , donde  $\mathbf{u}_\rho$  denota el vector unitario correspondiente a la coordenada  $\rho$ . Por tanto, el análisis euleriano del sistema se hace por medio de las tres funciones escalares  $n(\rho)$ ,  $\phi(\rho)$  y  $v(\rho)$ .

En la configuración cilíndrica, la ecuación de conservación de la energía (3.12) (tener en cuenta que, de nuevo,  $\nabla \times \mathbf{v} = \mathbf{0}$ ), la ecuación de Poisson (3.14) y la ecuación de continuidad (3.15) se deben considerar en la región  $\rho_0 < \rho < \rho_1$  para determinar las tres funciones  $n(\rho)$ ,  $\phi(\rho)$  y  $v(\rho)$ . La ecuación de Poisson (3.14) se reduce ahora a

$$\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left( \rho \frac{d\phi}{d\rho} \right) = -\frac{en}{\epsilon_0}; \quad (3.65)$$

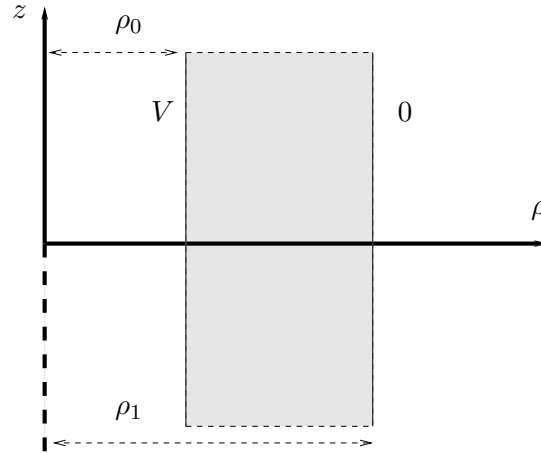


Figura 3.5: Diodo cilíndrico.

tomando origen de potenciales en el cátodo, la ecuación de conservación de la energía (3.12) lleva a

$$\frac{1}{2}m_d v^2 + e\phi = eV, \quad (3.66)$$

y, finalmente, de la ecuación de continuidad (3.15) obtenemos

$$2\pi\rho env = i = \text{constante}, \quad (3.67)$$

donde ahora  $i$  representa físicamente la corriente total emitida por unidad de longitud en la dirección axial. Por tanto, como en los casos anteriores, el problema tiene un grado de libertad dado por el parámetro  $i$ .

Las ecuaciones anteriores se pueden desacoplar de forma que, tras operar convenientemente, se obtiene que el potencial eléctrico  $\phi$  cumple la siguiente ecuación diferencial

$$\frac{d}{d\rho} \left( \rho \frac{d\phi}{d\rho} \right) = -\frac{i}{2\pi\epsilon_0} \sqrt{\frac{m_d}{2e}} (V - \phi)^{-1/2}, \quad (3.68)$$

la velocidad  $v$  está dada otra vez por

$$v = \sqrt{\frac{2e}{m_d}} (V - \phi)^{1/2}, \quad (3.69)$$

y la densidad de carga se obtiene por medio de

$$en = \frac{i}{2\pi\rho} \sqrt{\frac{m_d}{2e}} (V - \phi)^{-1/2}. \quad (3.70)$$

Las condiciones de contorno del problema se fijan prescribiendo, por una parte, el potencial eléctrico y su gradiente sobre el ánodo ( $\rho = \rho_0$ )

$$\phi(\rho_0) = V, \quad (3.71)$$

$$\frac{d\phi}{d\rho}(\rho_0) = -E_0, \quad (3.72)$$

donde  $E_0 > 0$  es el módulo del campo eléctrico extractor, y por otra, el potencial eléctrico sobre el cátodo ( $\rho = \rho_1$ )

$$\phi(\rho_1) = 0. \quad (3.73)$$

En total, fijando la magnitud del campo extractor  $E_0$ , la meta es obtener las tres funciones incógnitas  $n(\rho)$ ,  $\phi(\rho)$  y  $v(\rho)$  y el valor del parámetro  $i$ . Como en los casos anteriores, es útil escribir el problema en forma adimensional. Para ello, introducimos las siguientes variables sin dimensiones

$$X \equiv \frac{\rho}{\rho_0}, \quad j \equiv \frac{i\rho_0}{2\pi\epsilon_0 V^{3/2}} \sqrt{\frac{m_d}{2e}}, \quad \Phi \equiv j^{-2/3} \frac{V - \phi}{V}, \quad p \equiv j^{-2/3} \frac{E_0 \rho_0}{V}. \quad (3.74)$$

Entonces, en las nuevas variables tenemos el siguiente problema para  $\Phi$

$$\frac{d}{dX} \left( X \frac{d\Phi}{dX} \right) = \Phi^{-1/2} \quad (1 < X < X_1), \quad \Phi(1) = 0, \quad \frac{d\Phi}{dX}(1) = p, \quad (3.75)$$

con  $p \geq 0$  y, donde ahora,  $X_1 \equiv \rho_1/\rho_0$ . Una vez resuelto este problema, obtenemos

$$j = \Phi^{-3/2}(X_1), \quad (3.76)$$

$$\phi(\rho) = V (1 - j^{2/3} \Phi(\rho/\rho_0)), \quad (3.77)$$

$$v(\rho) = j^{1/3} \sqrt{\frac{2e}{m_d}} V^{1/2} \Phi^{1/2}(\rho/\rho_0), \quad (3.78)$$

$$en(\rho) = j^{2/3} \frac{\epsilon_0 V}{\rho_0 \rho} \Phi^{-1/2}(\rho/\rho_0), \quad (3.79)$$

$$i = 2\pi j \frac{\epsilon_0 V^{3/2}}{\rho_0} \sqrt{\frac{2e}{m_d}}, \quad (3.80)$$

para un campo extractor dado por

$$E_0 = p \frac{V}{\rho_0} j^{2/3}. \quad (3.81)$$

El objetivo, entonces, es resolver el problema dado por (3.75) para cada valor del parámetro  $p$ . Esto permite calcular, para cada valor del campo extractor  $E_0$  dado por (3.81), el valor de la intensidad (por unidad de longitud axial)  $i$  y los tres campos  $\phi(\rho)$ ,  $v(\rho)$  y  $n(\rho)$  a través de (3.76)-(3.80). En particular, podemos obtener la densidad de corriente sobre el electrodo emisor (ánodo)  $J_a$

$$J_a \equiv J(\rho_0) = \frac{i}{2\pi\rho_0} = j \frac{\epsilon_0 V^{3/2}}{\rho_0^2} \sqrt{\frac{2e}{m_d}}. \quad (3.82)$$

La ecuación (3.82) para el caso de corriente limitada por la carga espacial ( $p = 0$ ) es la ley de Child-Langmuir para el diodo cilíndrico [35].

En el caso trivial en el que no exista carga espacial ( $n(\rho) = 0$ ) sólo debemos obtener el potencial eléctrico  $\phi(\rho)$ ; entonces, la ecuación de Poisson (3.65) se reduce a la ecuación de Laplace y queda

$$\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left( \rho \frac{d\phi}{d\rho} \right) = 0 \quad (\rho_0 < \rho < \rho_1), \quad \phi(\rho_0) = V, \quad \phi(\rho_1) = 0. \quad (3.83)$$

El problema (3.83) tiene solución analítica dada por

$$\phi(\rho) = \frac{V}{\ln(\rho_0/\rho_1)} \ln \frac{\rho}{\rho_1} \quad (\rho_0 \leq \rho \leq \rho_1). \quad (3.84)$$

En el caso tal que exista carga espacial debemos resolver el problema (3.75) para cada valor de  $p$  de una forma numérica. Como en el caso anterior, el problema es singular en  $X = 1$  y la singularidad debe ser resuelta analíticamente para iniciar la correspondiente integración numérica. Para resolver la singularidad podemos proceder como hicimos en el caso del diodo esférico. No obstante, en este caso vamos a obtener directamente el comportamiento asintótico de la función  $\Phi(X)$  en el límite  $X \rightarrow 1_+$ . Así, asumamos que en una pequeña vecindad del punto  $X = 1$  con  $X > 1$ , la función  $\Phi$  pueda ser aproximada por

$$\Phi(X) \simeq \Phi_0(X - 1) + \Phi_1(X - 1)^\lambda, \quad (3.85)$$

donde  $\Phi_1 \neq 0$  y además (recordando que  $\Phi(1) = 0$ )  $\lambda > 0$  y  $\lambda \neq 1$ . El comportamiento asintótico cerca de  $X = 1$  se obtiene introduciendo (3.85) en la EDO de (3.75) y considerando sólo los términos dominantes en el límite  $X \rightarrow 1_+$ . Como veremos a continuación, según se anule o no el coeficiente  $\Phi_0$ , tenemos dos posibles comportamientos asintóticos.

- Si  $\Phi_0 = 0$ , es fácil ver que la única opción consistente es  $\lambda = 4/3$  y  $\Phi_1 = (3/2)^{4/3}$ . Por tanto, si  $X \rightarrow 1_+$  entonces

$$\Phi(X) \simeq \left(\frac{3}{2}\right)^{4/3} (X - 1)^{4/3}. \quad (3.86)$$

- Supongamos ahora que  $\Phi_0 \neq 0$ . En este caso, después de introducir (3.85) en la EDO (aproximando el término  $\Phi^{-1/2}$  por  $\Phi_0^{-1/2}(X - 1)^{-1/2} - (1/2)\Phi_1\Phi_0^{-3/2}(X - 1)^{\lambda-3/2}$ ), se obtiene que el único comportamiento asintótico consistente corresponde a  $\lambda = 3/2$  y  $\Phi_1 = (4/3)\Phi_0^{-1/2}$ . Así, si  $X \rightarrow 1_+$  entonces

$$\Phi(X) \simeq \Phi_0(X - 1) + \frac{4}{3}\Phi_0^{-1/2}(X - 1)^{3/2}. \quad (3.87)$$

Por tanto, la integración numérica del problema (3.75) se debe iniciar en un punto  $X = 1 + \epsilon$  con  $\epsilon \ll 1$  considerando que el comportamiento asintótico de  $\Phi$  en dicho punto viene dado por (3.86) en el caso de corriente máxima ( $p = 0$ ) ó por (3.87) en el caso  $p > 0$  (poniendo  $\Phi_0 = p$ ).

Como en el caso anterior, el valor de  $j$  para cada valor de  $p$  (ecuación (3.76)) depende sólo de la razón del radio del cátodo y del ánodo ( $\rho_1/\rho_0$ ). Como ejemplo, se muestra el caso  $\rho_1/\rho_0 = 3$  (ver tabla 3.3 y figura 3.6). El valor  $\epsilon = 10^{-9}$  es usado en todos los resultados numéricos. Como era esperable, la densidad de carga es (otra vez) infinita sobre el electrodo emisor. Resultados similares se obtienen para otros valores del cociente  $\rho_1/\rho_0$ .

Notar también que, puesto que  $j$  (para cada valor de  $p$ ) es función sólo de  $\rho_1/\rho_0$ , todo queda determinado una vez fijemos la masa  $m_d$  y la carga  $e$  de los iones, la diferencia de potencial  $V$  entre las dos superficies y sus respectivos radios ( $\rho_0$  y  $\rho_1$ ). En el caso particular de corriente máxima o corriente limitada por la carga espacial, el valor de  $j$  también está tabulado numéricamente para un amplio rango de valores del cociente  $\rho_1/\rho_0$  (ver [35] y [55]).



$p$	0	1	2	3
$j$	0,2865	0,2263	0,1552	0,1094
$\frac{E_0}{V\rho_0^{-1}}$	0	0,3713	0,5775	0,6863

Tabla 3.3: Resultados numéricos obtenidos para el diodo cilíndrico en el caso  $\rho_1/\rho_0 = 3$ .

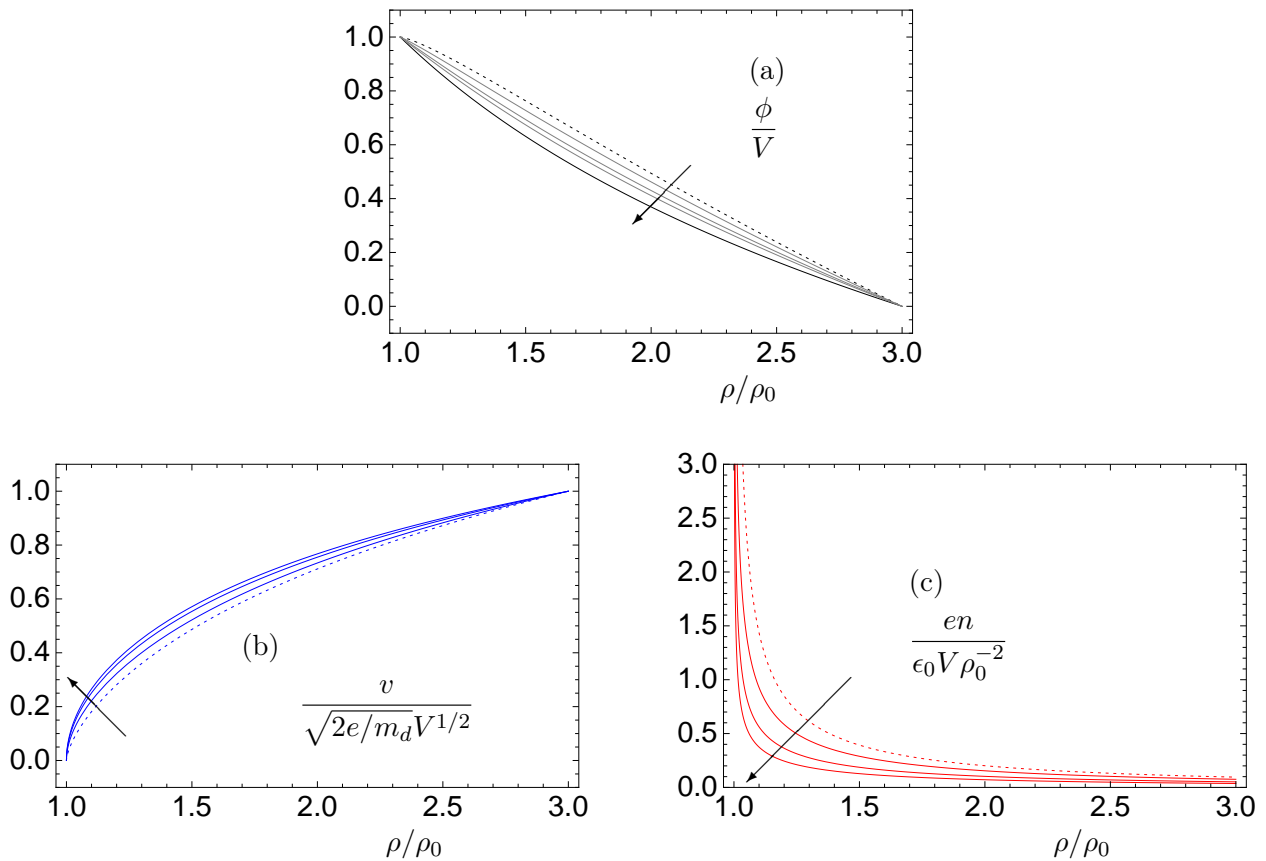


Figura 3.6: Funciones  $\phi$ ,  $v$  y  $n$  (sin dimensiones) para los valores del campo extractor (adimensional)  $E_0/(V\rho_0^{-1})$  de la tabla 3.3 (caso  $\rho_1/\rho_0 = 3$ ). El sentido de la flecha en cada gráfica indica el orden creciente de los valores del campo extractor adimensional. La curva punteada representa el caso de corriente máxima. En (a), se representa también el caso trivial en el que no existe carga espacial.

### 3.3. Formulación matemática en un cono líquido

En los problemas de emisión por efecto de campo en configuración plana, esférica y cilíndrica que se acaban de analizar, la inmensa simetría existente posibilita que el análisis euleriano se obtenga por medio de sólo tres funciones escalares  $n$ ,  $\phi$  y  $v$  dependientes de sólo una coordenada espacial. Es más, en los tres casos, el campo de velocidades es irrotacional y, en consecuencia, la ecuación de conservación de la energía (3.12), la ecuación de Poisson (3.14) y la ecuación de continuidad (3.15) forman un sistema completo de EDPs para determinar las tres funciones escalares  $n$ ,  $\phi$  y  $v$ .

El tema central de esta tesis es la emisión de electrosprays desde conos de Taylor en vacío. La descripción del problema general ya se trató en el capítulo anterior (ver sección 2.4). A diferencia de los problemas sencillos que se han estudiado en la sección anterior, el problema que nos ocupa en el presente trabajo es un problema 2D lo que, en principio, dificulta la resolución matemática. A continuación, formularemos matemáticamente el problema y justificaremos la validez del SEM en dicho problema (ver debajo). De esta forma, la descripción euleriana del sistema se obtiene con los tres campos escalares  $n$ ,  $\phi$  y  $\psi$ , lo que supone una notable simplificación matemática del problema.

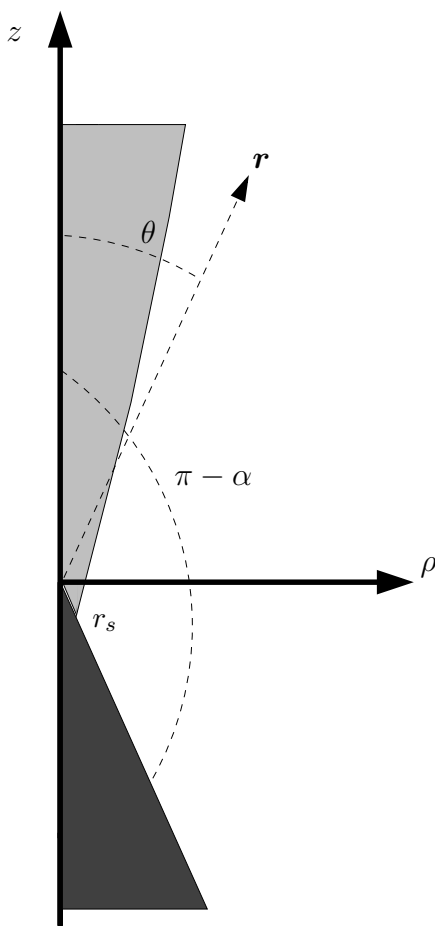


Figura 3.7: Esquema del problema y notación

La figura 3.7 muestra un esquema de la geometría del problema ideal considerado en el presente trabajo [32]. Un cono de Taylor de un líquido infinitamente conductor y tensión superficial  $\gamma$ , cargado a un potencial positivo respecto al infinito, está en vacío. Un electrospray se emite estacionariamente desde una pequeña parte de la superficie lateral cercana al vértice ( $r \leq r_s$ ) al vacío (ver debajo). Se asumirá que el electrospray es monodisperso, es decir, todas las gotas emitidas son idénticas con masa  $m_d$  y carga positiva  $e$ . Además, asumiremos que las gotas parten del cono con la misma velocidad y no se evaporan una vez que son emitidas. Se asumirá que el electrospray es axisimétrico. En particular, las coordenadas esféricas  $(r, \theta)$  serán usadas en todo el problema (despreciando la dependencia con el ángulo azimutal). Supondremos, además, que la interfase líquida tiene una forma cónica, con semiángulo vertical  $\alpha$ . Por otra parte, en el presente trabajo asumiremos que el electrospray parte de una *superficie de emisión*, dada por la vecindad del vértice del cono. Es decir, la superficie de emisión está definida por  $r \leq r_s$ ,  $\theta = \pi - \alpha$ , donde  $\alpha$  es el semiángulo del cono y  $r_s$  define el tamaño de la superficie de emisión (ver figura 3.7). Como se mostrará en este trabajo, ambos valores,  $\alpha$  y  $r_s$ , los cuales deben ser computados como parte de la solución, están afectados por efectos de carga espacial.

### 3.3.1. Validez del SEM

La descripción euleriana del electrospray se obtiene, en principio, por medio de tres campos: la densidad numérica de gotas  $n(\mathbf{r})$ , el campo de velocidades  $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ , y el potencial eléctrico  $\phi(\mathbf{r})$ , donde  $\mathbf{r}$  es el vector de posición referido al vértice del cono. Demostraremos que, con las hipótesis que se han asumido, el campo de velocidades del electrospray  $\mathbf{v}(\mathbf{r})$  es irrotacional; de esta forma, quedará justificado el uso del SEM en el problema que acabamos de formular.

En primer lugar, la ecuación del momento (3.8) es completamente general y determina el movimiento (en estado estacionario) de cada gota en el electrospray. Consideremos una trayectoria cualquiera y formemos el producto escalar de la ecuación (3.8) con el vector unitario y tangente a la trayectoria en cada punto; este vector será designado por  $\mathbf{l}$ . Como es bien sabido, la proyección del gradiente del campo escalar  $(1/2)m_d v^2 + e\phi$  en la dirección de  $\mathbf{l}$  es la derivada del campo escalar en dicha dirección y, por otra parte, el vector  $\mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{v})$  es perpendicular a  $\mathbf{v}$  y su proyección en la dirección de  $\mathbf{l}$  es cero. Es decir,

$$\frac{\partial}{\partial l} \left( \frac{1}{2} m_d v^2 + e\phi \right) = 0. \quad (3.88)$$

La ecuación (3.88) expresa la conservación de la energía mecánica total para la trayectoria considerada, esto es, la expresión  $(1/2)m_d v^2 + e\phi$  es constante a lo largo de dicha trayectoria:

$$\frac{1}{2} m_d v^2 + e\phi = \text{constante}, \quad (3.89)$$

donde la constante en la ecuación anterior depende, en principio, de la trayectoria particular elegida, es decir, toma valores distintos para las distintas trayectorias del electrospray. Ahora bien, por hipótesis, todas las gotas del electrospray se separan de la superficie de emisión con la misma velocidad inicial y la superficie del cono es equipotencial (hipótesis del conductor perfecto) y, en consecuencia, encontramos que la constante de la ecuación (3.89) es la misma para todas las trayectorias. Entonces, la ecuación del momento (3.8) lleva a que  $\mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{v}) =$

0 lo cual, junto con la suposición de electrospray axisimétrico, implica inmediatamente que  $\nabla \times \mathbf{v} = \mathbf{0}$ , es decir, el campo de velocidades del electrospray  $\mathbf{v}$  es irrotacional, como queríamos demostrar.

En resumen, el campo  $\mathbf{v}$  está dado por el gradiente de un campo escalar  $\psi$  (ecuación (3.10)) y, como ya se había adelantado, la descripción euleriana del electrospray se obtiene por medio de sólo tres campos escalares:  $n$ ,  $\phi$  y  $\psi$ . De esta forma, las tres ecuaciones que determinan los tres escalares están dadas por la ecuación de conservación de la energía (3.13), la ecuación de Poisson (3.14) y la ecuación de continuidad (3.15) y se deben considerar en la región externa al cono. En particular, asumiendo que la superficie del cono está a potencial eléctrico cero y que las gotas son emitidas con velocidad de inyección nula, la ecuación de conservación de la energía se reduce a

$$\frac{1}{2}m_d(\nabla\psi)^2 + e\phi = 0. \quad (3.90)$$

Las condiciones de contorno necesarias para resolver el anterior sistema de EDPs están dadas por las condiciones de contorno sobre la superficie del cono ( $\theta = \pi - \alpha$ ) y la condición de contorno para el potencial eléctrico a grandes distancias del vértice del cono. En particular, las condiciones de contorno sobre la superficie del cono son:

- la condición de equipotencialidad del potencial eléctrico  $\phi$

$$\phi|_{(r,\theta=\pi-\alpha)} = 0, \quad (3.91)$$

- la condición de equilibrio mecánico

$$\frac{1}{2}\epsilon_0 E^2 \Big|_{(r,\theta=\pi-\alpha)} = \gamma \frac{\cot \alpha}{r}, \quad (3.92)$$

donde  $\mathbf{E} = -\nabla\phi$  es el campo eléctrico,

- y la condición de equipotencialidad del potencial de velocidad  $\psi$

$$\psi|_{(r,\theta=\pi-\alpha)} = 0. \quad (3.93)$$

Por otra parte, la condición de campo lejano debe fijarse en el infinito y puede consistir en prescribir el potencial eléctrico  $\phi$  (*condición de Dirichlet*) o su derivada  $\partial\phi/\partial r$  (*condición de Neumann*) o una condición mixta (condición Dirichlet en una porción del contorno y Neumann en el resto). En cualquier caso, la condición de campo lejano que se prescriba debe ser una condición con sentido físico en el problema. Volveremos a esta cuestión más adelante.

Por hipótesis, el electrospray es axisimétrico; así, los tres campos escalares deben cumplir las conocidas condiciones de regularidad sobre el semieje positivo ( $\theta = 0$ ), es decir:

$$\frac{\partial\phi}{\partial\theta} \Big|_{(r,\theta=0)} = 0, \quad \frac{\partial\psi}{\partial\theta} \Big|_{(r,\theta=0)} = 0, \quad \frac{\partial n}{\partial\theta} \Big|_{(r,\theta=0)} = 0. \quad (3.94)$$

Finalmente, asumiendo que la corriente eléctrica total emitida por el electrospray es  $I$ , la conservación de la carga eléctrica impone la condición adicional

$$I = \int_S \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} \, da, \quad (3.95)$$

donde  $\mathbf{J} = env$  es el vector densidad de corriente,  $S$  es una superficie regular arbitraria que engloba por completo la superficie de emisión y  $\mathbf{n}$  es la normal positiva a  $S$ .

Como caso particular, en la ausencia de carga espacial (es decir,  $n = 0$ ), el semiángulo del cono  $\alpha$  es igual al ángulo de Taylor  $\alpha_T$  (ecuación (2.10)) y la solución del sistema anterior está dada por el potencial de Taylor  $\phi_T$  (ecuación (2.13)).

Obviamente, el caso no trivial ( $n \neq 0$ ) no es tan sencillo. A pesar de la simplificación que supone el uso del SEM, la complejidad matemática es aún grande, debido a la no linealidad que presenta el sistema de ecuaciones. En particular, la ecuación de conservación de la energía tiene una no linealidad cuadrática en el término de energía cinética, que es proporcional al cuadrado del módulo del gradiente de  $\psi$ . La ecuación de continuidad, por su parte, tiene una no linealidad cuadrática, dada por el producto del gradiente de  $\psi$  por la función  $n$ . En consecuencia, el problema no admite solución analítica y sólo es susceptible de resolverse por medio de procedimientos numéricos. Es más, puesto que la corriente total emitida  $I$  debe tener un valor no nulo y finito y la velocidad con la que se emite la carga desde la superficie de emisión es cero, de la ecuación (3.95) se infiere inmediatamente que la densidad numérica  $n$  debe ser infinita sobre dicha superficie. Esta singularidad de la carga espacial debe resolverse de forma analítica (parte singular del problema) antes de iniciar la correspondiente integración numérica (parte regular).

### 3.3.2. Escalas características y formulación adimensional

Una vez justificada la validez del SEM debemos buscar un sistema de unidades apropiado al problema presente que permita escribir el SEM en forma adimensional.

En el presente trabajo consideramos el comportamiento del sistema en la región  $r \ll l_e$  o, equivalentemente,  $r \ll r_c$  (ver figura 2.5), en la cual los efectos de carga espacial no son despreciables y deben tenerse en cuenta. En este sentido, es útil escribir el SEM en forma adimensional, escalando todas las magnitudes físicas con sus correspondientes valores característicos en la región de carga espacial (ver sección 2.4). Así, definimos  $\ell$  como la longitud característica definida por el tamaño de la región de carga espacial,  $E_{sc}$  como el campo eléctrico característico en esta región,  $v_{sc}$  como la velocidad del spray característica,  $\psi_{sc}$  (respectivamente  $\phi_{sc}$ ) como la escala del potencial de velocidad (respectivamente eléctrico) característico y  $n_{sc}$  como la escala de la densidad numérica característica. Puesto que la región de carga espacial es mucho más pequeña que el diámetro interno del tubo capilar, no hay una longitud geométrica característica en esta región. Entonces, definiremos la longitud característica  $\ell$  a partir de los parámetros físicos en el problema, es decir,  $\gamma$ ,  $e$ ,  $I$ ,  $m_d$  (ver debajo), y estableceremos un sistema de unidades basado en este conjunto de parámetros.

Las unidades características se pueden obtener a partir del siguiente análisis de órdenes de magnitudes. Primero, el campo eléctrico característico  $E_{sc}$  se determina mediante el balance entre fuerzas eléctricas y tensión superficial a una longitud característica  $\ell$ :  $E_{sc} \equiv [\gamma/(\epsilon_0 \ell)]^{1/2}$ . La escala del potencial eléctrico característico en esta región está dada entonces por:  $\phi_{sc} \equiv E_{sc} \ell$ . El valor característico de la velocidad  $v_{sc}$  se obtiene de la ecuación de conservación de la energía:  $v_{sc} \equiv (e \phi_{sc} / m_d)^{1/2}$ . La escala de la carga eléctrica característica  $Q_{sc}$  se define como la carga eléctrica necesaria para producir un campo eléctrico de orden  $E_{sc}$  en una longitud  $\ell$ :  $Q_{sc} \equiv \epsilon_0 E_{sc} \ell^2$ . El valor característico de la densidad numérica  $n_{sc}$  se define entonces por:

Magnitud	Definición	Valor característico
Campo electrico	$E_{sc} = [\gamma/(\epsilon_0\ell)]^{1/2}$	$E_{sc} = \gamma e^{1/3} \epsilon_0^{-1/3} I^{-2/3} m_d^{-1/3}$
Potencial electrico	$\phi_{sc} = E_{sc}\ell$	$\phi_{sc} = I^{2/3} m_d^{1/3} \epsilon_0^{-2/3} e^{-1/3}$
Velocidad	$v_{sc} = (e\phi_{sc}/m_d)^{1/2}$	$v_{sc} = e^{1/3} I^{1/3} \epsilon_0^{-1/3} m_d^{-1/3}$
Potencial de velocidad	$\psi_{sc} = \ell v_{sc}$	$\psi_{sc} = I^{5/3} m_d^{1/3} \epsilon_0^{-2/3} \gamma^{-1} e^{-1/3}$
Carga electrica	$Q_{sc} = \epsilon_0 E_{sc} \ell^2$	$Q_{sc} = I^2 m_d \gamma^{-1} e^{-1}$
Densidad numérica	$n_{sc} = Q_{sc}/(e\ell^3)$	$n_{sc} = \epsilon_0 \gamma^2 I^{-2} m_d^{-1}$
Tiempo	$t_{sc} = Q_{sc}/I$	$t_{sc} = I m_d \gamma^{-1} e^{-1}$
Longitud	$\ell = v_{sc} t_{sc}$	$\ell = I^{4/3} m_d^{2/3} \epsilon_0^{-1/3} \gamma^{-1} e^{-2/3}$

Tabla 3.4: Sistema de unidades características basado en el conjunto de parámetros físicos independientes del problema:  $\gamma$ ,  $e$ ,  $I$ ,  $m_d$ .

$en_{sc} \equiv Q_{sc}/\ell^3$ . El valor característico del tiempo es simplemente:  $t_{sc} \equiv Q_{sc}/I$ . Finalmente, la longitud característica  $\ell$  se define como:  $\ell \equiv v_{sc} t_{sc}$ , de donde deducimos

$$\ell = \frac{I^{4/3} m_d^{2/3}}{\epsilon_0^{1/3} \gamma e^{2/3}}, \quad (3.96)$$

la cual también puede ser obtenida a partir del análisis dimensional. Las definiciones y valores de todas las escalas características en la región dominada por los efectos de carga espacial están resumidas en la tabla 3.4.

Como ya hemos mencionado, el valor de  $\ell$  es extremadamente pequeño [15]. Esto puede ser comprobado comparando su valor con el diámetro externo del tubo capilar (cuyo valor típico es aproximadamente  $30 \mu\text{m}$ ). Considerando los siguientes valores típicos de los parámetros del electrospray:  $I = 200 \text{ nA}$ ,  $\gamma = 0,04 \text{ N m}^{-1}$  y  $e/m_d = 1942 \text{ C kg}^{-1}$  en una solución de acetato de amonio, que corresponden a una gota de densidad  $1 \text{ g cm}^{-3}$  y  $15 \text{ nm}$  de radio cargada al límite de Rayleigh, computando  $\ell$  por medio de la ecuación (3.96), obtenemos el resultado  $\ell \approx 900 \text{ nm}$ , es decir, solo 0,03 veces el diámetro externo del tubo capilar.

La versión adimensional del presente SEM se obtiene introduciendo los campos escalares adimensionales  $\tilde{n} \equiv n/n_{sc}$ ,  $\tilde{\phi} \equiv \phi/\phi_{sc}$  y  $\tilde{\psi} \equiv \psi/\psi_{sc}$  en las ecuaciones (3.13)-(3.15). El resultado es:

$$\frac{1}{2} \left( \tilde{\nabla} \tilde{\psi} \right)^2 + \tilde{\phi} = 0, \quad (3.97)$$

$$\tilde{\nabla}^2 \tilde{\phi} = -\tilde{n}, \quad (3.98)$$

$$\tilde{\nabla} \cdot \left( \tilde{n} \tilde{\nabla} \tilde{\psi} \right) = 0, \quad (3.99)$$

donde, usamos “tildes” para denotar variables adimensionales en el sistema de unidades características que acabamos de definir. Esta notación será usada a lo largo de todo el trabajo. En particular,  $\tilde{\mathbf{r}} \equiv \mathbf{r}/\ell$  denota el vector de posición en forma adimensional y  $\tilde{\nabla}$  denota el

operador gradiente aplicado a las correspondientes coordenadas espaciales adimensionales. Las ecuaciones anteriores (3.97)-(3.99) deben considerarse en la región  $\tilde{r} > 0$ ,  $0 < \theta < \pi - \alpha$ .

De una forma similar, la versión adimensional de las condiciones de contorno en  $\theta = \pi - \alpha$  (ecuaciones (3.91)-(3.93)), está dada por

$$\tilde{\phi}\Big|_{(\tilde{r}, \theta = \pi - \alpha)} = 0, \quad \frac{1}{2} \left( \frac{1}{\tilde{r}} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial \theta} \right)^2 \Big|_{(\tilde{r}, \theta = \pi - \alpha)} = \frac{\cot \alpha}{\tilde{r}}, \quad \tilde{\psi}\Big|_{(\tilde{r}, \theta = \pi - \alpha)} = 0. \quad (3.100)$$

Por otra parte, las condiciones de regularidad sin dimensiones en  $\theta = 0$  (ecuación (3.94)) son

$$\frac{\partial \tilde{n}}{\partial \theta} \Big|_{(\tilde{r}, \theta = \pi - \alpha)} = 0, \quad \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial \theta} \Big|_{(\tilde{r}, \theta = \pi - \alpha)} = 0, \quad \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \theta} \Big|_{(\tilde{r}, \theta = \pi - \alpha)} = 0. \quad (3.101)$$

Además, la condición adimensional (3.95) se escribe como

$$2\pi \int_0^{\pi - \alpha} \tilde{n}(\tilde{r}_s, \theta) \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tilde{r}} \Big|_{(\tilde{r}_s, \theta)} \tilde{r}_s^2 \sin \theta \, d\theta = 1, \quad (3.102)$$

donde hemos elegido una capa esférica de radio adimensional  $\tilde{r}_s \equiv r_s/\ell$  para evaluar la integral de superficie.

# Capítulo 4

## Aplicación del SEM para la dispersión de carga en un cono redondeado

### 4.1. Geometría y condiciones de contorno

En el capítulo anterior se formuló matemáticamente el problema que se desea resolver en este trabajo (ver sección 3.3). Ya advertimos entonces que la densidad de carga se hace infinita sobre la superficie de emisión, lo que obliga a resolver esta singularidad antes de iniciar la integración numérica. Dicha singularidad debe resolverse de forma analítica y esta cuestión será estudiada con detalle más adelante (ver capítulo 5).

Como paso intermedio para la descripción del electrospray por medio del SEM, se plantea primero el problema numérico de un cono de Taylor *redondeado*, lo que permite eliminar la parte singular del problema. En particular, aproximaremos el vértice del cono de Taylor por una pequeña superficie esférica con un cierto radio finito y asumiremos que toda la carga es emitida desde dicha superficie con una cierta velocidad inicial no nula conocida. De esta forma, prescribiendo la densidad de carga sobre dicha superficie, podemos analizar cómo se dispersa la carga usando el SEM, lo cual puede hacerse de una forma numérica. Precisamente, el principal objetivo de este capítulo es la puesta a punto de un código numérico en diferencias finitas de orden dos, el cual será usado posteriormente (ver capítulo 7) para resolver la parte regular del problema formulado en la sección 3.3, una vez haya sido resuelta la parte singular de dicho problema.

El esquema del problema numérico del cono redondeado se muestra en la figura 4.1. Consideramos un cono de Taylor con un semiángulo vertical igual al ángulo de Taylor  $\alpha_T = 49,29^\circ$ . Supondremos que la superficie del cono consta realmente de un tronco de cono terminado en un casquete esférico de radio  $r_0$ , el cual es tangente al tronco. Asumiremos que las gotas son emitidas radialmente desde la superficie del casquete con la misma velocidad de inyección  $v_i \neq 0$ . Se supondrá, además, que la densidad numérica de gotas  $n$  sobre la superficie del casquete (o *superficie de emisión*) es prescrita, es decir, está dada por una cierta función (positiva) conocida del ángulo  $\theta$ , la cual será denotada por  $n_0(\theta)$ . Finalmente, lejos de la superficie esférica de emisión, admitiremos que el potencial eléctrico  $\phi$  está dado por el potencial de Taylor  $\phi_T$ . Con estas hipótesis, nuestro objetivo es obtener vía SEM (es claro que su uso en este problema está justificado) las tres funciones escalares  $n$ ,  $\phi$  y  $\psi$  que determinan el análisis euleriano del



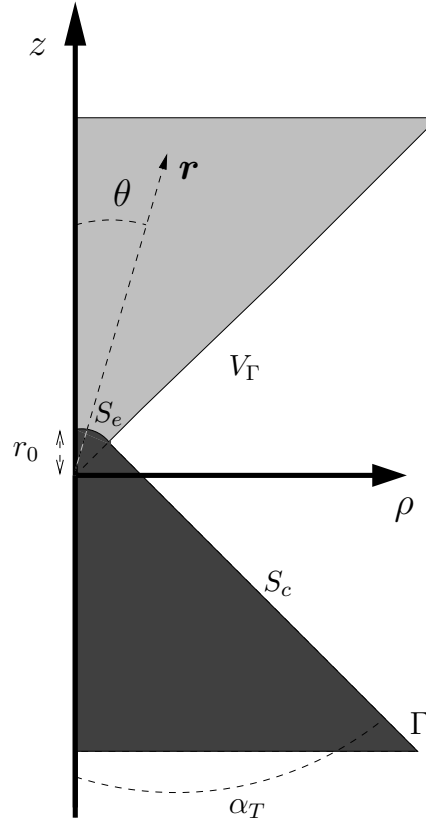


Figura 4.1: Esquema del problema.

sistema.

En este problema, denotaremos por  $S_e$  la superficie del casquete esférico desde la cual se emite la carga, por  $S_c$  la superficie del tronco de cono y por  $\Gamma$  la superficie completa del cono de Taylor redondeado (es decir,  $\Gamma = S_e \cup S_c$ ); además,  $V_\Gamma$  denotará la región externa a la superficie  $\Gamma$  (ver figura 4.1). El problema matemático se reduce entonces a resolver las ecuaciones del SEM (3.13)-(3.15) en la región  $V_\Gamma$ ,

$$\frac{1}{2} \left( \tilde{\nabla} \tilde{\psi} \right)^2 + \tilde{\phi} = \frac{1}{2} \tilde{v}_i^2, \quad (4.1)$$

donde estamos asumiendo origen de potenciales sobre la superficie  $\Gamma$ ,

$$\tilde{\nabla}^2 \tilde{\phi} = -\tilde{n}, \quad (4.2)$$

$$\tilde{\nabla} \cdot \left( \tilde{n} \tilde{\nabla} \tilde{\psi} \right) = 0, \quad (4.3)$$

las cuales deben estar acompañadas por las correspondientes condiciones de contorno sobre la superficie  $\Gamma$  y las condiciones de campo lejano (ver debajo).

Las condiciones de contorno que se deben prescribir sobre la superficie del cono  $\Gamma$  son:

- la condición de equipotencialidad del potencial eléctrico

$$\tilde{\phi} \Big|_{\Gamma} = 0, \quad (4.4)$$

- la condición de equipotencialidad del potencial de velocidad

$$\tilde{\psi}\Big|_{\Gamma} = 0, \quad (4.5)$$

- el perfil de carga emitido

$$\tilde{n}|_{S_e} = \tilde{n}_0, \quad \tilde{\mathbf{J}}\Big|_{S_e} = 0, \quad (4.6)$$

donde  $\tilde{\mathbf{J}} = \tilde{n}\tilde{\mathbf{v}}$  es el vector densidad de corriente escrito sin dimensiones.

Por otra parte, puesto que la ecuación de Poisson (4.2) es una ecuación diferencial de segundo orden, se necesita una condición adicional, la cual está dada por la condición de campo lejano para el potencial eléctrico  $\phi$ . En este sentido, asumiremos (por hipótesis) que a grandes distancias de la superficie de emisión  $S_e$ , el potencial eléctrico  $\phi$  tiende al potencial de Taylor  $\phi_T$  (ecuación (2.13)):

$$\tilde{\phi}\Big|_{r \rightarrow \infty} = \tilde{\phi}_T. \quad (4.7)$$

Debemos notar que la forma adimensional del potencial de Taylor viene dada por

$$\tilde{\phi}_T(\tilde{r}, \theta) = a_T \tilde{r}^{1/2} P_{1/2}(\cos \theta) \quad (\tilde{r} \geq 0, \quad 0 \leq \theta \leq \pi - \alpha_T), \quad (4.8)$$

donde  $a_T \approx -1,34593$  (ecuación (2.12)).

Finalmente, por hipótesis, la corriente eléctrica total emitida por el electrospray  $I$  es conocida, lo que proporciona una condición más al problema. Recordando que la carga es emitida radialmente desde la superficie  $S_e$  con velocidad  $v_i$ , obtenemos que dicha condición está dada por

$$1 = \tilde{v}_i \int_{S_e} \tilde{n}_0 \, da. \quad (4.9)$$

Debemos notar que la ecuación (4.9) impone, en realidad, una condición que debe cumplir la función  $n_0$ . Además, dado que la función  $n_0$  no puede tomar valores negativos, dicha ecuación implica que la velocidad de inyección  $v_i$  no puede ser nula.

El problema definido por las ecuaciones (4.1-4.9) está bien formulado desde un punto de vista matemático y es susceptible de resolverse numéricamente, como se verá pronto. Por otra parte, debemos notar que la aproximación realizada en la geometría del problema supone sólo una simplificación matemática que tiene por objeto posibilitar la resolución numérica del problema sin necesidad de resolver la singularidad existente en el vértice del cono. Además, como ya se habrá advertido, la condición de equilibrio mecánico sobre la superficie del cono líquido no está siendo considerada. No obstante, a pesar de estas simplificaciones, este modelo de cono redondeado debe proporcionar una buena aproximación a la forma en que la carga eléctrica se dispersa una vez es emitida desde el cono.

## 4.2. Descomposición del dominio

Debemos elegir ahora las coordenadas apropiadas para la resolución del problema que hemos propuesto en la sección anterior. En particular, vamos a descomponer el dominio  $V_{\Gamma}$  en dos

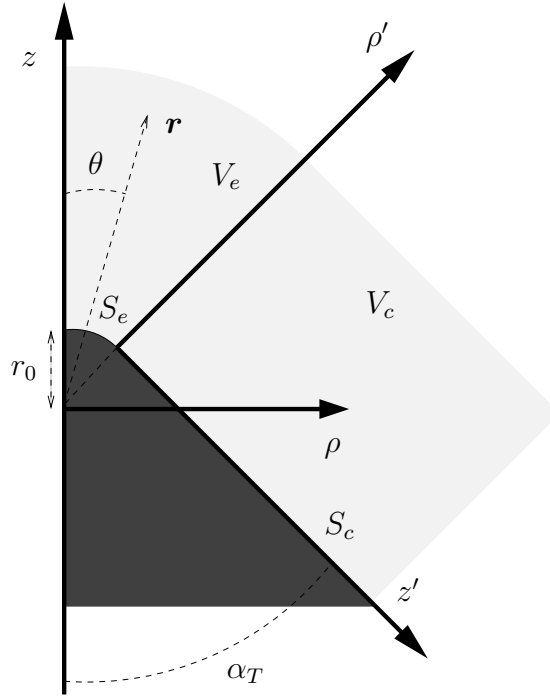


Figura 4.2: Descomposición del dominio y coordenadas usadas en el problema.

subregiones, en cada una de las cuales elegiremos una pareja de coordenadas independientes de forma que las condiciones de contorno tengan una forma matemática sencilla.

La figura 4.2 muestra la descomposición del dominio  $V_\Gamma$  y las coordenadas elegidas para el problema. En primer lugar, vamos a descomponer la región  $V_\Gamma$  como unión de dos regiones:  $V_e$  y  $V_c$ , cuya definición es como sigue.

- La región  $V_e$  es la región subtendida por la superficie  $S_e$ . En esta región se usarán las coordenadas esféricas usuales  $(r, \theta)$ . Así, la región  $V_e$  está definida por  $r > r_0$ ,  $0 \leq \theta \leq \pi/2 - \alpha_T$ .
- La región  $V_c$  es la región subtendida por la superficie  $S_c$ . En esta región se usarán coordenadas cilíndricas rotadas  $(\rho', z')$  (ver figura 4.2). Entonces, la región  $V_c$  viene dada en las nuevas coordenadas cilíndricas rotadas por  $\rho' > 0$ ,  $z' \geq 0$ .

Las nuevas coordenadas  $(\rho', z')$  se obtienen por traslación más rotación de las coordenadas cilíndricas usuales  $(\rho, z)$ . En el apéndice A se obtienen las ecuaciones que permiten la transformación de unas a otras coordenadas (ecuaciones (A.7) y (A.8)) y las ecuaciones de transformación de las componentes de un vector (ecuaciones (A.11) y (A.12)), así como las fórmulas que permiten calcular el gradiente de un campo escalar, la divergencia de un campo vectorial y el laplaciano de un campo escalar en las coordenadas rotadas  $(\rho', z')$  (tabla A.1). En particular, las ecuaciones de transformación de  $(\rho, z)$  a  $(\rho', z')$  están dadas por

$$\rho' = \cos \alpha_T \rho + \sin \alpha_T z - r_0, \quad z' = \sin \alpha_T \rho - \cos \alpha_T z, \quad (4.10)$$

y las ecuaciones de la transformación inversa son

$$\rho = \cos \alpha_T \rho' + \sin \alpha_T z' + \cos \alpha_T r_0, \quad z = \sin \alpha_T \rho' - \cos \alpha_T z' + \sin \alpha_T r_0. \quad (4.11)$$

Veamos ahora qué forma adoptan las ecuaciones y las condiciones del contorno del problema presente en las dos regiones definidas. Veamos primero la forma del problema en la región formada por  $V_e$  junto con la superficie  $S_e$ , esto es, la definida en coordenadas esféricas por  $r \geq r_0$ ,  $0 \leq \theta \leq \pi/2 - \alpha_T$ . Las ecuaciones (4.1)-(4.3) toman la forma

$$\left( \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tilde{r}} \right)^2 + \frac{1}{\tilde{r}^2} \left( \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \theta} \right)^2 + 2\tilde{\phi} = \tilde{v}_i^2, \quad (4.12)$$

$$\frac{1}{\tilde{r}^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{r}} \left( \tilde{r}^2 \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial \tilde{r}} \right) + \frac{1}{\tilde{r}^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial \theta} \right) + \tilde{n} = 0, \quad (4.13)$$

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{r}} \left( \tilde{r}^2 \tilde{n} \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tilde{r}} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \tilde{n} \sin \theta \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \theta} \right) = 0, \quad (4.14)$$

y deben considerarse en  $\tilde{r} > \tilde{r}_0$ ,  $0 < \theta < \pi/2 - \alpha_T$ . Por otra parte, las condiciones de contorno (4.4)-(4.6) sobre la superficie  $r = r_0$ ,  $0 < \theta < \pi/2 - \alpha_T$  están dadas por

$$\tilde{\phi} \Big|_{(\tilde{r}=\tilde{r}_0, 0 < \theta < \pi/2 - \alpha_T)} = 0, \quad \tilde{\psi} \Big|_{(\tilde{r}=\tilde{r}_0, 0 < \theta < \pi/2 - \alpha_T)} = 0, \quad \tilde{n} \Big|_{(\tilde{r}=\tilde{r}_0, 0 < \theta < \pi/2 - \alpha_T)} = \tilde{n}_0(\theta), \quad (4.15)$$

donde la función  $\tilde{n}_0(\theta)$  prescrita debe cumplir la condición (4.9), dada por

$$2\pi \tilde{r}_0^2 \tilde{v}_i \int_0^{\pi/2 - \alpha_T} \tilde{n}_0(\theta) \sin \theta \, d\theta = 1. \quad (4.16)$$

Por hipótesis, el electrospray es axisimétrico; por esta razón, los tres campos escalares deben cumplir las condiciones de regularidad sobre el semieje  $r > r_0$ ,  $\theta = 0$ :

$$\frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial \theta} \Big|_{(\tilde{r} > \tilde{r}_0, \theta=0)} = 0, \quad \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \theta} \Big|_{(\tilde{r} > \tilde{r}_0, \theta=0)} = 0, \quad \frac{\partial \tilde{n}}{\partial \theta} \Big|_{(\tilde{r} > \tilde{r}_0, \theta=0)} = 0. \quad (4.17)$$

Finalmente, tenemos la condición de campo lejano en el infinito (4.7),

$$\tilde{\phi} \Big|_{(\tilde{r} \rightarrow \infty, 0 < \theta < \pi/2 - \alpha_T)} = \tilde{\phi}_T \Big|_{(\tilde{r} \rightarrow \infty, 0 < \theta < \pi/2 - \alpha_T)}. \quad (4.18)$$

Veamos ahora la forma del problema en la región formada por  $V_c$  junto con la superficie  $S_c$ , esto es, la definida en coordenadas cilíndricas rotadas por  $\rho' \geq 0$ ,  $z' \geq 0$ . Para obtener la forma de las ecuaciones (4.1)-(4.3) en esta región, debemos usar las fórmulas para el cálculo de los operadores diferenciales en las coordenadas cilíndricas rotadas (tabla A.1). En particular, dichas ecuaciones adoptan la forma

$$\left( \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tilde{\rho}'} \right)^2 + \left( \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tilde{z}'} \right)^2 + 2\tilde{\phi} = \tilde{v}_i^2, \quad (4.19)$$

$$\frac{\partial^2 \tilde{\phi}}{\partial \tilde{\rho}'^2} + \frac{\partial^2 \tilde{\phi}}{\partial \tilde{z}'^2} + \frac{1}{\tilde{\rho}' + \tan \alpha_T \tilde{z}' + \tilde{r}_0} \left( \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial \tilde{\rho}'} + \tan \alpha_T \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial \tilde{z}'} \right) + \tilde{n} = 0, \quad (4.20)$$

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}'} \left( \tilde{n} \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tilde{\rho}'} \right) + \frac{1}{\tilde{\rho}' + \tan \alpha_T \tilde{z}' + \tilde{r}_0} \tilde{n} \left( \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tilde{\rho}'} + \tan \alpha_T \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tilde{z}'} \right) + \frac{\partial}{\partial \tilde{z}'} \left( \tilde{n} \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tilde{z}'} \right) = 0, \quad (4.21)$$

y deben considerarse en  $\tilde{\rho}' > 0$ ,  $\tilde{z}' > 0$ . Las condiciones de contorno (4.4)-(4.6) sobre la superficie  $\rho' = 0$ ,  $z' > 0$  se reducen a

$$\tilde{\phi} \Big|_{(\tilde{\rho}'=0, \tilde{z}'>0)} = 0, \quad \tilde{\psi} \Big|_{(\tilde{\rho}'=0, \tilde{z}'>0)} = 0, \quad \tilde{\mathbf{J}} \Big|_{(\tilde{\rho}'=0, \tilde{z}'>0)} = 0. \quad (4.22)$$

Por último, la condición de campo lejano en el infinito (dada por (4.7)), se escribe ahora en la forma

$$\tilde{\phi} \Big|_{(\tilde{\rho}' \rightarrow \infty, \tilde{z}' > 0)} = \tilde{\phi}_T \Big|_{(\tilde{\rho}' \rightarrow \infty, \tilde{z}' > 0)}, \quad \tilde{\phi} \Big|_{(\tilde{\rho}' > 0, \tilde{z}' \rightarrow \infty)} = \tilde{\phi}_T \Big|_{(\tilde{\rho}' > 0, \tilde{z}' \rightarrow \infty)}. \quad (4.23)$$

En este problema estamos usando el método de la descomposición del dominio en dos regiones. La frontera común de estas dos regiones es una superficie cónica que puede definirse de forma sencilla, tanto en coordenadas esféricas por  $r \geq r_0$ ,  $\theta = \pi/2 - \alpha_T$ , como en las coordenadas cilíndricas rotadas por  $\rho' \geq 0$ ,  $z' = 0$ . Sobre esta frontera común se deben imponer las condiciones de continuidad de los tres campos escalares y de sus derivadas en la dirección normal.

### 4.2.1. Cambio de variable y mallado

Como ya se ha comentado anteriormente, el problema que hemos formulado en la sección 4.1 puede resolverse por métodos numéricos. En particular, implementaremos un algoritmo numérico basado en el método de diferencias finitas. Toda la cuestión relativa al algoritmo numérico en diferencias finitas para el problema presente se tratará con todo detalle en la próxima sección. No obstante, como paso previo, debemos discretizar el dominio del problema con el fin de hacerlo apto para el tratamiento numérico. Esto permitirá, en particular, obtener el mallado de puntos para las correspondientes ecuaciones en diferencias finitas del SEM.

En nuestro problema particular, la discretización del dominio ofrece dos dificultades:

1. El dominio del problema  $V_\Gamma$  no está acotado y ello imposibilita, en particular, que podamos prescribir la condición de contorno en el infinito (dada por la ecuación (4.7)).
2. Con el fin de que nuestro algoritmo numérico simule condiciones realistas de electrospray, debemos considerar que el radio del casquete  $r_0$  sea muy pequeño. Así, el campo eléctrico sobre la superficie de emisión alcanza valores muy grandes, ya que los gradientes son muy intensos, y ello exige que cerca de dicha superficie debamos considerar una alta resolución, lo que implica un alto coste computacional.

Analicemos con detalle estas dos dificultades y cómo poder solventarlas. Una forma de abordar la primera dificultad es considerar una subregión acotada  $U_\Gamma$  dentro del dominio  $V_\Gamma$  y resolver numéricamente el problema en esta subregión; de esta forma, el valor de los campos

fuera de la subregión  $U_\Gamma$  puede ser obtenido de forma aproximada usando extrapolación. En nuestro caso, vamos a considerar la subregión  $U_\Gamma = U_e \cup U_c$  donde  $U_e$  es la subregión de  $V_e$  definida por  $r_0 < r \leq r_1$ ,  $0 \leq \theta \leq \pi/2 - \alpha_T$  y  $U_c$  es la subregión de  $V_c$  definida por  $0 < \rho' \leq r_2$ ,  $0 \leq z' \leq r_2$  y donde  $r_1 \gg r_0$  (pero finito) es una cierta longitud fijada y  $r_2 = r_1 - r_0$ . De esta forma, la condición de contorno de campo lejano (dada por las ecuaciones (4.18) y (4.23)) se sustituye respectivamente por

$$\tilde{\phi} \Big|_{(\tilde{r}=\tilde{r}_1, 0 < \theta < \pi/2 - \alpha_T)} = \tilde{\phi}_T \Big|_{(\tilde{r}=\tilde{r}_1, 0 < \theta < \pi/2 - \alpha_T)}, \quad (4.24)$$

y

$$\tilde{\phi} \Big|_{(\tilde{\rho}'=\tilde{r}_2, \tilde{z}'>0)} = \tilde{\phi}_T \Big|_{(\tilde{\rho}'=\tilde{r}_2, \tilde{z}'>0)}, \quad \tilde{\phi} \Big|_{(\tilde{\rho}'>0, \tilde{z}'=\tilde{r}_2)} = \tilde{\phi}_T \Big|_{(\tilde{\rho}'>0, \tilde{z}'=\tilde{r}_2)}. \quad (4.25)$$

La segunda dificultad tiene su origen en la naturaleza del problema que estamos considerando. En nuestro caso, pretendemos que este problema sea una aproximación al correspondiente que consiste en la emisión de carga eléctrica desde un cono líquido perfecto. Una forma de hacer esto es considerar el radio de la superficie de emisión  $r_0$  muy pequeño. En el caso límite  $r_0 \rightarrow 0$ , el potencial eléctrico  $\phi$  debería variar como  $r^{1/2}$  y entonces el campo eléctrico debería variar como  $r^{-1/2}$  con la correspondiente singularidad en  $r = 0$ . En nuestro caso, el radio  $r_0$  tiene un valor mayor que cero pero muy pequeño, con lo que se espera que el campo eléctrico sobre la superficie de emisión sea grande. Por esta razón, para minimizar los errores, debemos aumentar la resolución espacial (esto es, considerar una discretización más fina), tanto más cuanto menor sea el valor de  $r_0$ . Pero esto implica lógicamente un aumento de la cantidad de cálculo. Una posibilidad para resolver esta dificultad es considerar un mallado no uniforme [20] de forma que se considere una discretización más fina cerca de la superficie de emisión; no obstante, esta posibilidad complica la programación del código numérico y no vamos a considerarla. Una posibilidad equivalente a la anterior consiste en mantener el mallado uniforme en todo el dominio pero con previo cambio de variable en la coordenada radial. De esta forma, aún manteniendo el mallado uniforme, computamos el valor de los campos en un mayor número de nodos conforme nos acercamos a la superficie de emisión. Esta solución es la que vamos usar para resolver el problema presente.

En particular, teniendo en cuenta la dependencia  $r^{1/2}$ , introducimos la nueva coordenada (sin dimensiones)  $w$  definida por el siguiente cambio de variable en la coordenada radial  $\tilde{r}$ :

$$w \equiv \tilde{r}^{1/2}. \quad (4.26)$$

Esto implica, a su vez, el correspondiente cambio de variable en la coordenada  $\rho'$ ; esto es, debemos introducir la nueva coordenada (adimensional)  $u$  por cambio de variable en la coordenada  $\tilde{\rho}'$ ; este cambio de variable se deduce de

$$w_0 + u = (\tilde{\rho}' + \tilde{r}_0)^{1/2} \quad (\tilde{\rho}' \geq 0), \quad (4.27)$$

donde  $w_0 = \tilde{r}_0^{1/2}$ . Es decir, la definición del cambio de variable es

$$u \equiv (\tilde{\rho}' + \tilde{r}_0)^{1/2} - w_0 \quad (\tilde{\rho}' \geq 0). \quad (4.28)$$

Las transformaciones inversas son

$$\tilde{r} = w^2 \quad (w \geq 0), \quad (4.29)$$

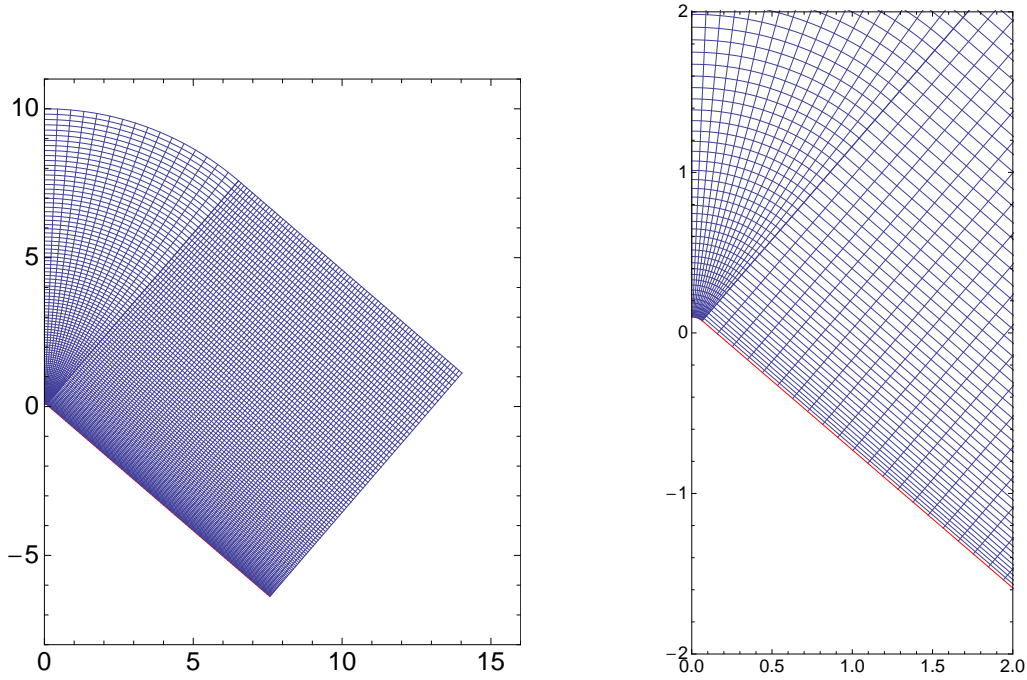


Figura 4.3: Mallado en diferencias finitas generado con los siguientes valores:  $\tilde{r}_0 = 0,1$ ,  $\tilde{r}_1 = 10$ ,  $n_w = 99$ ,  $n_\theta = 16$  y  $n_{z'} = 80$ . Los pasos obtenidos con estos valores son  $h_w = 0,029$ ,  $h_\theta = 0,0444$  y  $h_{z'} = 0,1238$ . A la derecha, detalle cerca de la superficie del cono.

y

$$\tilde{\rho}' = (w_0 + u)^2 - \tilde{r}_0 \quad (u \geq 0). \quad (4.30)$$

Las variables independientes (sin dimensiones) del problema son entonces  $(w, \theta)$  en la subregión  $U_e$  y  $(u, \tilde{z}')$  en la subregión  $U_c$ . El dominio completo del problema numérico en estas variables está dado por la unión de las regiones  $w_0 \leq w \leq w_1$ ,  $0 \leq \theta \leq \pi/2 - \alpha_T$ , donde  $w_1 = \tilde{r}_1^{1/2}$  y  $0 \leq u \leq w_2$ ,  $0 \leq \tilde{z}' \leq \tilde{r}_2$ , con  $w_2 = w_1 - w_0$ . Ahora, tenemos que discretizar el dominio usando un mallado uniforme en dichas variables.

- En la región  $w_0 \leq w \leq w_1$ ,  $0 \leq \theta \leq \pi/2 - \alpha_T$  se consideran  $n_w + 1$  puntos o nodos en la dirección radial  $r$ , con paso  $h_w$  definido por

$$h_w \equiv \frac{w_1 - w_0}{n_w}, \quad (4.31)$$

y  $n_\theta + 1$  nodos en la dirección angular  $\theta$  con paso  $h_\theta$  definido por

$$h_\theta \equiv \frac{\pi/2 - \alpha_T}{n_\theta}. \quad (4.32)$$

Así, el conjunto de nodos en esta región está dado por los puntos  $(w = w_i, \theta = \theta_j)$  donde

$$w_i = w_0 + i h_w \quad (i = 0, 1, 2, \dots, n_w), \quad (4.33)$$

$$\theta_j = j h_\theta \quad (j = 0, 1, 2, \dots, n_\theta). \quad (4.34)$$

- En la región definida por  $0 \leq u \leq w_2$ ,  $0 \leq \tilde{z}' \leq \tilde{r}_2$  se consideran  $n_w + 1$  nodos en la dirección correspondiente a  $\rho'$ , con paso  $h_u$  dado por

$$h_u \equiv \frac{w_2}{n_u} = \frac{w_1 - w_0}{n_w} = h_w, \quad (4.35)$$

y  $n_{z'} + 1$  nodos en la dirección de la coordenada  $z'$ , con paso  $h_{z'}$  definido por

$$h_{z'} \equiv \frac{\tilde{r}_2}{n_{z'}}. \quad (4.36)$$

Como era de esperar (ver ecuación (4.35)), obtenemos pasos iguales en ambas variables:  $h_u = h_w$ . En particular, el conjunto de nodos en esta región está dado por los puntos  $(u = u_i, \tilde{z}' = z'_j)$  donde

$$u_i = i h_w \quad (i = 0, 1, 2, \dots, n_w), \quad (4.37)$$

$$z'_j = j h_{z'} \quad (j = 0, 1, 2, \dots, n_{z'}). \quad (4.38)$$

Debemos notar que el mallado puede ser construido una vez fijemos los números  $n_w$ ,  $n_\theta$  y  $n_{z'}$ ; y, por construcción, los nodos  $(w_i, \theta_{n_\theta})$  coinciden físicamente con los nodos  $(u_i, z'_0)$ .

En la figura 4.3 se representa el mallado en diferencias finitas que resulta en las variables primitivas del problema  $(\tilde{r}, \theta)$  y  $(\tilde{\rho}', \tilde{z}')$  tras el correspondiente cambio de variable para el caso  $\tilde{r}_0 = 0,1$  y  $\tilde{r}_1 = 10$  y obtenido con los valores  $n_w = 99$ ,  $n_\theta = 16$  y  $n_{z'} = 80$ . Como se observa en la figura, se genera un mallado no uniforme en la variable radial (en particular, el paso mínimo en la dirección  $\tilde{r}$  es 0,019 y el paso máximo es 0,181).

### 4.3. Método numérico

El objetivo ahora es implementar un algoritmo numérico que permita computar los tres campos escalares  $(\tilde{\phi}, \tilde{\psi}$  y  $\tilde{n})$  y, con ello, resolver el problema. En particular, el algoritmo está basado en el método de diferencias finitas [45]. En principio, el algoritmo que vamos a implementar es válido para el problema presente del cono redondeado. No obstante, es fácilmente adaptable a otros problemas con geometrías descritas en coordenadas esféricas y que presenten simetría azimutal. En particular, más adelante (ver capítulo 7) usaremos el mismo algoritmo (sin modificaciones importantes) para estudiar la dispersión de carga en un cono de Taylor sin redondear.

En el problema presente, tenemos que resolver un sistema de tres ecuaciones en derivadas parciales (ecuación de conservación de la energía, ecuación de Poisson y ecuación de continuidad) para obtener los tres campos escalares: densidad numérica de gotas  $\tilde{n}$ , potencial eléctrico  $\tilde{\phi}$  y potencial de velocidad  $\tilde{\psi}$  (ecuaciones (4.12)-(4.14) y ecuaciones (4.19)-(4.21)); esto permite obtener finalmente el campo eléctrico  $\tilde{\mathbf{E}}$

$$\tilde{\mathbf{E}} = -\tilde{\nabla}\tilde{\phi}, \quad (4.39)$$

y el campo de velocidades  $\tilde{\mathbf{v}}$

$$\tilde{\mathbf{v}} = \tilde{\nabla}\tilde{\psi}. \quad (4.40)$$



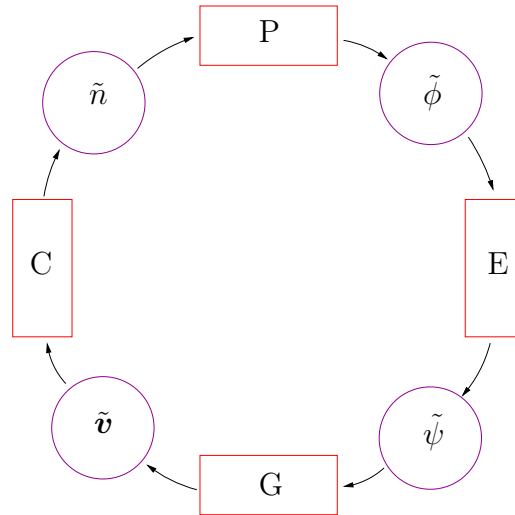


Figura 4.4: Esquema del algoritmo numérico.

La resolución numérica del problema mediante un esquema en diferencias finitas pasa, evidentemente, por discretizar las tres ecuaciones anteriores con objeto de aproximarlas por las respectivas ecuaciones en diferencias finitas. Es claro que la complejidad matemática de las tres ecuaciones se traduce en una mayor complejidad algebraica de las correspondientes ecuaciones en diferencias finitas. Además, las tres ecuaciones están acopladas (cada una involucra a dos campos) de manera no lineal y eso implica, a su vez, el acoplamiento de las correspondientes ecuaciones en diferencias. Todo esto trae consigo un alto coste computacional.

El tratamiento numérico de este problema se puede facilitar considerablemente si lo desacoplamos en cuatro problemas numéricos independientes, cada uno de los cuáles permita el cálculo de uno sólo de los campos conocido el otro. Estos cuatro problemas numéricos son los siguientes:

- El *problema Poisson* (P), el cual consiste en resolver la ecuación de Poisson para calcular el potencial eléctrico  $\tilde{\phi}$  si conocemos la densidad de gotas  $\tilde{n}$ .
- El *problema Energía* (E), el cual consiste en resolver la ecuación de la energía para calcular el potencial de velocidad  $\tilde{\psi}$  si conocemos el potencial eléctrico  $\tilde{\phi}$ .
- El *problema Gradiente* (G), el cual consiste en calcular el campo de velocidades  $\tilde{v}$  a partir del potencial de velocidad  $\tilde{\psi}$  por medio de la ecuación (4.40).
- El *problema Continuidad* (C), el cual consiste en resolver la ecuación de continuidad para calcular la densidad numérica de gotas  $\tilde{n}$  si conocemos el campo de velocidades  $\tilde{v}$ .

La figura 4.4 muestra el esquema del algoritmo numérico que usaremos para resolver el problema. El algoritmo está basado en un método iterativo que permita obtener, de forma sucesiva, cada uno de los campos resolviendo numéricamente el problema correspondiente hasta conseguir convergencia, es decir, que la diferencia de los campos entre dos iteraciones consecutivas sea menor que una cierta cantidad fijada de antemano (dicha cantidad se denomina *cota de error*).

### 4.3.1. Formulación en la variable escalada

El algoritmo numérico consiste en resolver (de forma iterada) cuatro problemas independientes (ver figura 4.4) mediante diferencias finitas. Y como ya se comentó, usaremos un mallaado uniforme en las variables  $(w, \theta)$  y  $(u, \tilde{z}')$ . Esto pasa, primero, por escribir las ecuaciones en dichas variables. El cambio sólo afecta a las variables  $\tilde{r}$  y  $\tilde{\rho}'$  y se deduce con facilidad usando la regla de la cadena. En particular, con respecto a la variable  $\tilde{r}$ ,

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{r}} = \frac{1}{2w} \frac{\partial}{\partial w}, \quad \frac{\partial^2}{\partial \tilde{r}^2} = \frac{1}{4w^2} \left( \frac{\partial^2}{\partial w^2} - \frac{1}{w} \frac{\partial}{\partial w} \right), \quad (4.41)$$

y con respecto a la variable  $\tilde{\rho}'$

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}'} = \frac{1}{2(u + w_0)} \frac{\partial}{\partial u}, \quad \frac{\partial^2}{\partial \tilde{\rho}'^2} = \frac{1}{4(u + w_0)^2} \left( \frac{\partial^2}{\partial u^2} - \frac{1}{u + w_0} \frac{\partial}{\partial u} \right). \quad (4.42)$$

Veamos primero la formulación matemática de los cuatro problemas en las nuevas variables como paso previo a su discretización.

#### Formulación del *problema Poisson*

El problema para la ecuación de Poisson consta de las ecuaciones (4.13) y (4.20) junto con la condición de equipotencialidad del potencial eléctrico sobre la superficie del cono (ecuaciones (4.15) y (4.22)), la condición de regularidad en el semieje de simetría (ecuación (4.17)) y las condiciones de campo lejano (ecuaciones (4.24) y (4.25)). A estas ecuaciones hay que añadir las condiciones de continuidad sobre la frontera común de las dos subregiones.

Usando (4.41) en la ecuación (4.13) y (4.42) en la ecuación (4.20), obtenemos la ecuación de Poisson en las nuevas variables  $(w, \theta)$  y  $(u, \tilde{z}')$ :

$$\frac{1}{4w^2} \frac{\partial^2 \tilde{\phi}}{\partial w^2} + \frac{3}{4w^3} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial w} + \frac{1}{w^4} \frac{\partial^2 \tilde{\phi}}{\partial \theta^2} + \frac{\cot \theta}{w^4} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial \theta} + \tilde{n} = 0 \quad (w_0 < w < w_1, 0 < \theta < \pi/2 - \alpha_T), \quad (4.43)$$

y

$$\frac{1}{4(u + w_0)^2} \frac{\partial^2 \tilde{\phi}}{\partial u^2} + \left[ \frac{1}{2(u + w_0) [(u + w_0)^2 + \tilde{z}' \tan \alpha_T]} - \frac{1}{4(u + w_0)^3} \right] \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial u} + \frac{\partial^2 \tilde{\phi}}{\partial \tilde{z}'^2} + \frac{\tan \alpha_T}{(u + w_0)^2 + \tilde{z}' \tan \alpha_T} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial \tilde{z}'} + \tilde{n} = 0 \quad (0 < u < w_2, 0 < \tilde{z}' < \tilde{r}_2). \quad (4.44)$$

Las condiciones de contorno sobre la superficie del cono (ecuaciones (4.15) y (4.22)) están dadas por

$$\tilde{\phi} \Big|_{(w=w_0, 0 < \theta < \pi/2 - \alpha_T)} = 0, \quad (4.45)$$

y

$$\tilde{\phi} \Big|_{(u=0, 0 < \tilde{z}' < \tilde{r}_2)} = 0. \quad (4.46)$$

La condición de regularidad en el semieje de simetría (ecuación (4.17)) se escribe

$$\left. \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial \theta} \right|_{(w_0 < w < w_1, \theta=0)} = 0. \quad (4.47)$$

Las condiciones de campo lejano (4.24) y (4.25) son

$$\tilde{\phi} \Big|_{(w=w_1, 0 < \theta < \pi/2 - \alpha_T)} = \tilde{\phi}_T \Big|_{(w=w_1, 0 < \theta < \pi/2 - \alpha_T)}, \quad (4.48)$$

y

$$\tilde{\phi} \Big|_{(u=w_2, 0 < \tilde{z}' < \tilde{r}_2)} = \tilde{\phi}_T \Big|_{(u=w_2, 0 < \tilde{z}' < \tilde{r}_2)}, \quad \tilde{\phi} \Big|_{(0 < u < w_2, \tilde{z}' = \tilde{r}_2)} = \tilde{\phi}_T \Big|_{(0 < u < w_2, \tilde{z}' = \tilde{r}_2)}. \quad (4.49)$$

Por último, sobre la frontera común de las dos subregiones debemos imponer las correspondientes condiciones de continuidad del potencial eléctrico y de su derivada en la dirección normal. En particular, la continuidad del campo  $\tilde{\phi}$  se expresa como

$$\tilde{\phi} \Big|_{(w_0 < w < w_1, \theta = \pi/2 - \alpha_T)} = \tilde{\phi} \Big|_{(0 < u < w_2, \tilde{z}' = 0)} \quad (4.50)$$

y la continuidad de la derivada de  $\tilde{\phi}$  en la dirección normal implica

$$\left. \frac{1}{w^2} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial \theta} \right|_{(w_0 < w < w_1, \theta = \pi/2 - \alpha_T)} = \left. \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial \tilde{z}'} \right|_{(0 < u < w_2, \tilde{z}' = 0)}. \quad (4.51)$$

### Formulación del problema *Energía*

El problema para la ecuación de la conservación de la energía consta de las ecuaciones (4.12) y (4.19) junto con la condición de equipotencialidad del potencial de velocidad sobre la superficie del cono (ecuaciones (4.15) y (4.22)) y la condición de regularidad en el semieje de simetría (ecuación (4.17)). Además, hay que considerar las condiciones de continuidad sobre la frontera común de las dos subregiones.

Aplicando (4.41) en la ecuación (4.12) y (4.42) en la ecuación (4.19) se obtiene la ecuación de conservación de la energía en las nuevas variables  $(w, \theta)$  y  $(u, \tilde{z}')$ :

$$\frac{1}{4w^2} \left( \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial w} \right)^2 + \frac{1}{w^4} \left( \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \theta} \right)^2 + 2\tilde{\phi} = \tilde{v}_i^2 \quad (w_0 < w < w_1, 0 < \theta < \pi/2 - \alpha_T), \quad (4.52)$$

y

$$\frac{1}{4(u + w_0)^2} \left( \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial u} \right)^2 + \left( \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tilde{z}'} \right)^2 + 2\tilde{\phi} = \tilde{v}_i^2 \quad (0 < u < w_2, 0 < \tilde{z}' < \tilde{r}_2). \quad (4.53)$$

Las condiciones de contorno sobre la superficie del cono (ecuaciones (4.15) y (4.22)) son

$$\tilde{\psi} \Big|_{(w=w_0, 0 < \theta < \pi/2 - \alpha_T)} = 0, \quad (4.54)$$

y

$$\tilde{\psi} \Big|_{(u=0, 0 < \tilde{z}' < \tilde{r}_2)} = 0. \quad (4.55)$$

La condición de regularidad en el semieje de simetría (ecuación (4.17)) se escribe

$$\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \theta} \Big|_{(w_0 < w < w_1, \theta=0)} = 0. \quad (4.56)$$

Finalmente, sobre la frontera común de las dos subregiones se imponen las condiciones de continuidad del potencial de velocidad  $\tilde{\psi}$

$$\tilde{\psi} \Big|_{(w_0 < w < w_1, \theta=\pi/2-\alpha_T)} = \tilde{\psi} \Big|_{(0 < u < w_2, \tilde{z}'=0)} \quad (4.57)$$

y de su derivada en la dirección normal

$$\frac{1}{w^2} \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \theta} \Big|_{(w_0 < w < w_1, \theta=\pi/2-\alpha_T)} = \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tilde{z}'} \Big|_{(0 < u < w_2, \tilde{z}'=0)}. \quad (4.58)$$

### Formulación del *problema Gradiente*

El *problema Gradiente* consiste simplemente en el cálculo del gradiente del potencial de velocidad  $\tilde{\psi}$  para la obtención del campo de velocidades.

Si  $\tilde{\mathbf{v}} = (\tilde{v}_r, \tilde{v}_\theta)$  es el campo de velocidades (adimensional) en coordenadas esféricas, tenemos

$$\tilde{v}_r = \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tilde{r}}, \quad \tilde{v}_\theta = \frac{1}{\tilde{r}} \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \theta}. \quad (4.59)$$

Análogamente, si  $\tilde{\mathbf{v}} = (\tilde{v}_{\rho'}, \tilde{v}_{z'})$  es el campo de velocidades (sin dimensiones) en coordenadas cilíndricas rotadas, entonces, por medio de la tabla A.1), obtenemos

$$\tilde{v}_{\rho'} = \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \rho'}, \quad \tilde{v}_{z'} = \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tilde{z}'}. \quad (4.60)$$

Sólo falta escribir las ecuaciones (4.59) y (4.60) en las nuevas coordenadas escaladas. En toda la región definida por las coordenadas  $(w, \theta)$ , el campo de velocidades  $\tilde{\mathbf{v}} = (\tilde{v}_w, \tilde{v}_\theta)$  se calcula de la siguiente forma

$$\left. \begin{aligned} \tilde{v}_w &= \frac{1}{2w} \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial w}, \\ \tilde{v}_\theta &= \frac{1}{w^2} \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \theta}, \end{aligned} \right\} (w_0 < w < w_1, 0 < \theta < \pi/2 - \alpha_T), \quad (4.61)$$

En la región definida por las coordenadas  $(u, \tilde{z}')$ , el campo de velocidades  $\tilde{\mathbf{v}} = (\tilde{v}_u, \tilde{v}_{z'})$  se obtiene mediante

$$\left. \begin{aligned} \tilde{v}_u &= \frac{1}{2(u+w_0)} \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial u}, \\ \tilde{v}_{z'} &= \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tilde{z}'}, \end{aligned} \right\} (0 < u < w_2, 0 < \tilde{z}' < \tilde{r}_2), \quad (4.62)$$

Las ecuaciones anteriores (4.61) y (4.62) se deducen, respectivamente, por aplicación directa de las fórmulas (4.41) y (4.42) en las ecuaciones (4.59) y (4.60). Evidentemente, fórmulas análogas a las anteriores se obtienen para calcular el gradiente de cualquier campo escalar en las variables escaladas (en particular, el campo eléctrico  $\tilde{\mathbf{E}}$ ).

### Formulación del *problema Continuidad*

El problema para la ecuación de continuidad consiste en el cálculo de la densidad numérica de gotas a partir del campo de velocidades. Por esta razón, debemos expresar primero la ecuación de continuidad en términos del campo de velocidades.

En términos del campo de velocidades  $\tilde{\mathbf{v}} = (\tilde{v}_r, \tilde{v}_\theta)$  en coordenadas esféricas, la ecuación (4.14) se escribe

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{r}} (\tilde{n} \tilde{v}_r) + \frac{1}{\tilde{r}} \frac{\partial}{\partial \theta} (\tilde{n} \tilde{v}_\theta) + \frac{1}{\tilde{r}} \tilde{n} (2\tilde{v}_r + \cot \theta \tilde{v}_\theta) = 0. \quad (4.63)$$

Análogamente, en términos del campo de velocidades  $\tilde{\mathbf{v}} = (\tilde{v}_{\rho'}, \tilde{v}_{z'})$  en las coordenadas cilíndricas rotadas, la ecuación (4.21) toma la forma

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{\rho}'} (\tilde{n} \tilde{v}_{\rho'}) + \frac{1}{\tilde{\rho}' + \tan \alpha_T \tilde{z}' + \tilde{r}_0} \tilde{n} (\tilde{v}_{\rho'} + \tan \alpha_T \tilde{v}_{z'}) + \frac{\partial}{\partial \tilde{z}'} (\tilde{n} \tilde{v}_{z'}) = 0. \quad (4.64)$$

El *problema Continuidad* consta entonces, de las ecuaciones (4.63) y (4.64) junto con la condición que prescribe el perfil de carga emitido desde la superficie del cono líquido (ecuaciones (4.15) y (4.22)) y la condición de regularidad en el semieje de simetría (ecuación (4.17)). Como en los casos anteriores, hay que considerar también las condiciones de continuidad sobre la frontera común de las dos subregiones.

En primer lugar, aplicando (4.41) en la ecuación (4.63) y (4.42) en la ecuación (4.64) se obtiene la ecuación de continuidad en las variables  $(w, \theta)$  y  $(u, \tilde{z}')$ :

$$\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \tilde{w}} (\tilde{n} \tilde{v}_w) + \frac{1}{w} \frac{\partial}{\partial \theta} (\tilde{n} \tilde{v}_\theta) + \frac{1}{w} \tilde{n} (2\tilde{v}_w + \cot \theta \tilde{v}_\theta) = 0$$

$$(w_0 < w < w_1, 0 < \theta < \pi/2 - \alpha_T), \quad (4.65)$$

y

$$\frac{1}{2(u + w_0)} \frac{\partial}{\partial u} (\tilde{n} \tilde{v}_u) + \frac{1}{(u + w_0)^2 + \tan \alpha_T \tilde{z}'} \tilde{n} (\tilde{v}_u + \tan \alpha_T \tilde{v}_{z'}) + \frac{\partial}{\partial \tilde{z}'} (\tilde{n} \tilde{v}_{z'}) = 0$$

$$(0 < u < w_2, 0 < \tilde{z}' < \tilde{r}_2). \quad (4.66)$$

Las condiciones de contorno sobre la superficie del cono (ecuaciones (4.15) y (4.22)) son

$$\tilde{n}|_{(w=w_0, 0 < \theta < \pi/2 - \alpha_T)} = \tilde{n}_0(\theta), \quad (4.67)$$

y

$$\tilde{J}_u|_{(u=0, 0 < \tilde{z}' < \tilde{r}_2)} = 0, \quad \tilde{J}_{z'}|_{(u=0, 0 < \tilde{z}' < \tilde{r}_2)} = 0, \quad (4.68)$$

donde  $\tilde{\mathbf{J}} = (\tilde{J}_u, \tilde{J}_{z'}) = \tilde{n}(\tilde{v}_u, \tilde{v}_{z'})$  es el vector densidad de corriente en las coordenadas  $(u, \tilde{z}')$ . La condición de regularidad en el semieje de simetría (ecuación (4.17)) para el campo  $\tilde{n}$  está dada por

$$\left. \frac{\partial \tilde{n}}{\partial \theta} \right|_{(w_0 < w < w_1, \theta=0)} = 0. \quad (4.69)$$

Sobre la frontera común de las dos subregiones se imponen las condiciones de continuidad de  $\tilde{n}$

$$\tilde{n}|_{(w_0 < w < w_1, \theta=\pi/2-\alpha_T)} = \tilde{n}|_{(0 < u < w_2, \tilde{z}'=0)} \quad (4.70)$$

y de su derivada en la dirección normal

$$\left. \frac{1}{w^2} \frac{\partial \tilde{n}}{\partial \theta} \right|_{(w_0 < w < w_1, \theta=\pi/2-\alpha_T)} = \left. \frac{\partial \tilde{n}}{\partial \tilde{z}'} \right|_{(0 < u < w_2, \tilde{z}'=0)}. \quad (4.71)$$

### 4.3.2. Ecuaciones en diferencias finitas

El paso siguiente es discretizar los cuatro problemas anteriores (*problema Poisson*, *problema Energía*, *problema Gradiente* y *problema Continuidad*) con objeto de obtener las correspondientes ecuaciones en diferencias finitas.

La discretización de las ecuaciones se hará con un mallado usando en todos los casos un esquema en diferencias finitas de orden dos (ver apéndice B y, en particular, la tabla B.1). Usaremos el superíndice  $e$  (respectivamente  $c$ ) para indicar valores de los campos en las variables  $(w, \theta)$  (respectivamente en las variables  $(u, \tilde{z}')$ ). Por ejemplo, para el campo  $\tilde{\phi}$

$$\tilde{\phi}_{i,j}^e \equiv \tilde{\phi}|_{(w=w_i, \theta=\theta_j)} \quad (i = 0, 1, 2, \dots, n_w; j = 0, 1, 2, \dots, n_\theta) \quad (4.72)$$

$$\tilde{\phi}_{i,j}^c \equiv \tilde{\phi}|_{(u=u_i, \tilde{z}'=z'_j)} \quad (i = 0, 1, 2, \dots, n_w; j = 0, 1, 2, \dots, n_{z'}) \quad (4.73)$$

y la misma notación para todos los demás campos.

#### Discretización del *problema Poisson*

El *problema Poisson* es un problema lineal y de orden dos. En particular, la linealidad del problema implica la linealidad de las correspondientes ecuaciones en diferencias finitas. Por otra parte, al tratarse de un problema de orden dos se prescriben condiciones de campo lejano y esto implica que la ecuación de Poisson se discretiza usando diferencias finitas centradas en las dos variables.

Las ecuaciones en diferencias finitas en la región  $U_e$  se obtienen al discretizar la condición de regularidad en el eje (ecuación (4.47)), la ecuación de Poisson (ecuación (4.43)), la condición de equipotencialidad del potencial eléctrico (ecuación (4.45)) y la condición de campo lejano (ecuación (4.48)). La ecuación (4.47) se discretiza usando diferencias finitas progresivas en la variable angular y proporciona las siguientes ecuaciones en diferencias finitas:

$$-\tilde{\phi}_{i,2}^e + 4\tilde{\phi}_{i,1}^e - 3\tilde{\phi}_{i,0}^e = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, n_w). \quad (4.74)$$

Coeficientes generales	
$g(i) \equiv \frac{1}{w_0 + i h_w}$	$(i = 1, 2, \dots, n_w)$
$h_1(j) \equiv \frac{\cot j h_\theta}{2}$	$(j = 1, 2, \dots, n_\theta)$
$h_2(i, j) \equiv \frac{1}{(w_0 + i h_w)^2 + j h_{z'} \tan \alpha_T}$	$(i = 1, 2, \dots, n_w; j = 0, 1, \dots, n_{z'})$
Coeficientes específicos para la ecuación de Poisson	
$a(i) \equiv \frac{1}{4 h_w} g^2(i) \left( \frac{1}{h_w} + \frac{3}{2} g(i) \right)$	
$b(i) \equiv \frac{1}{4 h_w} g^2(i) \left( \frac{1}{h_w} - \frac{3}{2} g(i) \right)$	
$c(i) \equiv -g^2(i) \left( \frac{1}{2 h_w^2} + \frac{2}{h_\theta^2} g^2(i) \right)$	
$d(i, j) \equiv \frac{1}{h_\theta} g^4(i) \left( \frac{1}{h_\theta} + h_1(j) \right)$	
$e(i, j) \equiv \frac{1}{h_\theta} g^4(i) \left( \frac{1}{h_\theta} - h_1(j) \right)$	
$a'(i, j) \equiv \frac{1}{4 h_w} g(i) \left( \frac{1}{h_w} g(i) - \frac{1}{2} g^2(i) + h_2(i, j) \right)$	
$b'(i, j) \equiv \frac{1}{4 h_w} g(i) \left( \frac{1}{h_w} g(i) + \frac{1}{2} g^2(i) - h_2(i, j) \right)$	
$c'(i) \equiv - \left( \frac{1}{2 h_w^2} g^2(i) + \frac{2}{h_{z'}^2} \right)$	
$d'(i, j) \equiv \frac{1}{h_{z'}} \left( \frac{1}{h_{z'}} + \frac{\tan \alpha_T}{2} h_2(i, j) \right)$	
$e'(i, j) \equiv \frac{1}{h_{z'}} \left( \frac{1}{h_{z'}} - \frac{\tan \alpha_T}{2} h_2(i, j) \right)$	

Tabla 4.1: Definición de los coeficientes de las ecuaciones en diferencias finitas.

La ecuación (4.43) conduce a las ecuaciones:

$$a(i)\tilde{\phi}_{i+1,j}^e + b(i)\tilde{\phi}_{i-1,j}^e + c(i)\tilde{\phi}_{i,j}^e + d(i,j)\tilde{\phi}_{i,j+1}^e + e(i,j)\tilde{\phi}_{i,j-1}^e + \tilde{n}_{i,j}^e = 0, \quad (i = 1, 2, \dots, n_w; j = 1, 2, \dots, n_\theta - 1), \quad (4.75)$$

donde los coeficientes  $a(i)$ ,  $b(i)$ ,  $c(i)$ ,  $d(i, j)$  y  $e(i, j)$  están definidos en la tabla 4.1. El potencial eléctrico en los nodos localizados sobre la superficie de emisión está dado por la condición (4.45):

$$\tilde{\phi}_{0,j}^e = 0 \quad (j = 1, 2, \dots, n_\theta - 1). \quad (4.76)$$

Por otra parte, en la ecuación (4.75) se introducen *nodos ficticios* (externos al mallado y para los que  $i = n_w + 1$ ) y cuyo potencial se calcula por medio de la condición de campo lejano (4.48):

$$\tilde{\phi}_{n_w+1,j}^e = \tilde{\phi}_T \Big|_{(w=w_1+h_w, \theta=\theta_j)}, \quad (j = 1, 2, \dots, n_\theta - 1). \quad (4.77)$$

Las ecuaciones en diferencias finitas en la región  $U_c$  se obtienen al discretizar la ecuación de Poisson (4.44), la condición de equipotencialidad del potencial eléctrico (ecuación (4.46)) y la condición de campo lejano (ecuación (4.49)). La ecuación (4.44) lleva a las siguientes ecuaciones en diferencias:

$$a'(i, j)\tilde{\phi}_{i+1,j}^c + b'(i, j)\tilde{\phi}_{i-1,j}^c + c'(i)\tilde{\phi}_{i,j}^c + d'(i, j)\tilde{\phi}_{i,j+1}^c + e'(i, j)\tilde{\phi}_{i,j-1}^c + \tilde{n}_{i,j}^c = 0, \quad (i = 1, 2, \dots, n_w; j = 1, 2, \dots, n_{z'}), \quad (4.78)$$

donde los coeficientes  $a'(i, j)$ ,  $b'(i, j)$ ,  $c'(i)$ ,  $d'(i, j)$  y  $e'(i, j)$  están definidos en la tabla 4.1. El potencial eléctrico en los nodos sobre la superficie del cono se calcula por medio de la condición de equipotencialidad (4.46):

$$\tilde{\phi}_{0,j}^c = 0 \quad (j = 1, 2, \dots, n_{z'}). \quad (4.79)$$

Finalmente, como en el caso anterior, el potencial en los nodos ficticios introducidos (los definidos por  $i = n_w + 1$  o  $j = n_{z'} + 1$ ) se fija usando la condición de campo lejano (4.49):

$$\tilde{\phi}_{n_w+1,j}^c = \tilde{\phi}_T \Big|_{(u=w_2+h_w, z'=z'_j)}, \quad (j = 1, 2, \dots, n_{z'}), \quad (4.80)$$

$$\tilde{\phi}_{i,n_{z'}+1}^c = \tilde{\phi}_T \Big|_{(u=u_i, z'=\tilde{r}'_2+h'_z)}, \quad (i = 1, 2, \dots, n_w). \quad (4.81)$$

Sobre la frontera común de ambas regiones se tienen las ecuaciones en diferencias finitas que se obtienen al discretizar las correspondientes condiciones de continuidad de  $\tilde{\phi}$  (ecuación (4.50)) y su derivada en la dirección normal (ecuación (4.51)). La condición (4.50) se discretiza dando

$$\tilde{\phi}_{i,n_\theta}^e - \tilde{\phi}_{i,0}^c = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, n_w). \quad (4.82)$$

Por otra parte, la condición (4.51) se discretiza usando diferencias finitas centradas:

$$\frac{1}{2h_\theta} g^2(i) \left( \tilde{\phi}_{i,n_\theta+1}^e - \tilde{\phi}_{i,n_\theta-1}^e \right) = \frac{1}{2h_{z'}} \left( \tilde{\phi}_{i,1}^c - \tilde{\phi}_{i,-1}^c \right) \quad (i = 1, 2, \dots, n_w). \quad (4.83)$$



En la ecuación anterior aparecen nodos ficticios cuyo potencial eléctrico se calcula imponiendo que en la frontera se cumpla la ecuación de Poisson. Por una parte, tenemos los nodos ficticios definidos por los puntos con  $j = n_{\theta} + 1$  y cuyo potencial eléctrico se computa por medio de una ecuación en diferencias como las dadas por (4.75) pero con  $j = n_{\theta}$ . Y por otra parte, tenemos los nodos ficticios dados por los puntos  $j = -1$  y su potencial eléctrico se computa a través de una ecuación en diferencias como las dadas por (4.78) pero con  $j = 0$ . Con todo esto, la ecuaciones (4.83) se reducen a las siguientes:

$$\begin{aligned} \frac{g(i)}{d(i, n_{\theta})} \left( a(i) \tilde{\phi}_{i+1, n_{\theta}}^e + b(i) \tilde{\phi}_{i-1, n_{\theta}}^e + c(i) \tilde{\phi}_{i, n_{\theta}}^e \right) + g(i) \left( \frac{e(i, n_{\theta})}{d(i, n_{\theta})} + 1 \right) \tilde{\phi}_{i, n_{\theta}-1}^e + \\ \frac{1}{h_{z'}} \left( \frac{d'(i, 0)}{e'(i, 0)} + 1 \right) \tilde{\phi}_{i, 1}^c + \frac{1}{h_{z'} e'(i, 0)} \left( a'(i, 0) \tilde{\phi}_{i+1, 0}^c + b'(i, 0) \tilde{\phi}_{i-1, 0}^c + c'(i) \tilde{\phi}_{i, 0}^c \right) = \\ \frac{g(i)}{d(i, n_{\theta})} \tilde{n}_{i, n_{\theta}}^e + \frac{1}{h_{z'} e'(i, 0)} \tilde{n}_{i, 0}^c \quad (i = 1, 2, \dots, n_w), \quad (4.84) \end{aligned}$$

donde, usando la condición de equipotencialidad del potencial eléctrico sobre la superficie del cono, tenemos

$$\tilde{\phi}_{0, n_{\theta}}^e = \tilde{\phi}_{0, 0}^c = 0. \quad (4.85)$$

En resumen, las ecuaciones (4.74), (4.75), (4.78), (4.82) y (4.84) son las ecuaciones en diferencias finitas a orden dos correspondientes al *problema Poisson*. Notar que forman un sistema lineal de  $n_w(n_{\theta} + n_{z'} + 2)$  ecuaciones para  $n_w(n_{\theta} + n_{z'} + 2)$  incógnitas (esto es, los valores  $\tilde{\phi}_{i, j}^e$ , con  $i = 1, 2, \dots, n_w$ ,  $j = 0, 1, \dots, n_{\theta}$  y los valores  $\tilde{\phi}_{i, j}^c$ , con  $i = 1, 2, \dots, n_w$ ,  $j = 0, 1, \dots, n_{z'}$ ).

### Discretización del *problema Energía*

El *problema Energía* es un problema no lineal. Además, a diferencia de la ecuación de Poisson, la ecuación de la energía es de orden uno y no se prescriben condiciones de campo lejano; por esta razón, la ecuación de la energía se discretiza usando diferencias finitas centradas en los nodos interiores y diferencias finitas regresivas en los nodos más exteriores del mallado (en la variable que corresponda).

Las ecuaciones en diferencias finitas en la región  $U_e$  se obtienen tras discretizar la condición de regularidad en el eje (ecuación (4.56)), la ecuación de la energía (4.52) y la condición de equipotencialidad del potencial de velocidad (ecuación (4.54)). La condición de regularidad (4.56) da lugar a:

$$-\tilde{\psi}_{i, 2}^e + 4\tilde{\psi}_{i, 1}^e - 3\tilde{\psi}_{i, 0}^e = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, n_w). \quad (4.86)$$

La versión discreta de la ecuación (4.52) está dada por las siguientes ecuaciones en diferencias:

$$\begin{aligned} \frac{1}{16h_w^2} g^2(i) \left( \tilde{\psi}_{i+1, j}^e - \tilde{\psi}_{i-1, j}^e \right)^2 + \frac{1}{4h_{\theta}^2} g^4(i) \left( \tilde{\psi}_{i, j+1}^e - \tilde{\psi}_{i, j-1}^e \right)^2 + 2\tilde{\phi}_{i, j}^e = \tilde{v}_i^2 \\ (i = 1, 2, \dots, n_w - 1; j = 1, 2, \dots, n_{\theta} - 1), \quad (4.87) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{16h_w^2} g^2(n_w) \left( 3\tilde{\psi}_{n_w, j}^e - 4\tilde{\psi}_{n_w-1, j}^e + \tilde{\psi}_{n_w-2, j}^e \right)^2 + \frac{1}{4h_{\theta}^2} g^4(n_w) \left( \tilde{\psi}_{n_w, j+1}^e - \tilde{\psi}_{n_w, j-1}^e \right)^2 + \\ 2\tilde{\phi}_{n_w, j}^e = \tilde{v}_i^2 \quad (j = 1, 2, \dots, n_{\theta} - 1), \quad (4.88) \end{aligned}$$

donde los coeficientes  $g(i)$  están definidos en la tabla 4.1. En la ecuación anterior, los valores  $\tilde{\psi}_{0,j}^e$  se calculan por medio de la condición (4.54):

$$\tilde{\psi}_{0,j}^e = 0 \quad (j = 1, 2, \dots, n_\theta - 1). \quad (4.89)$$

En la región  $U_c$  debemos discretizar la ecuación de la energía (ecuación (4.53)) y la condición de equipotencialidad del potencial de velocidad (ecuación (4.55)). Al discretizar la ecuación (4.53) obtenemos las siguientes ecuaciones en diferencias:

$$\frac{1}{16h_w^2} g^2(i) \left( \tilde{\psi}_{i+1,j}^c - \tilde{\psi}_{i-1,j}^c \right)^2 + \frac{1}{4h_{z'}^2} \left( \tilde{\psi}_{i,j+1}^c - \tilde{\psi}_{i,j-1}^c \right)^2 + 2\tilde{\phi}_{i,j}^c = \tilde{v}_i^2$$

$$(i = 1, 2, \dots, n_w - 1; j = 1, 2, \dots, n_{z'} - 1), \quad (4.90)$$

$$\frac{1}{16h_w^2} g^2(n_w) \left( 3\tilde{\psi}_{n_w,j}^c - 4\tilde{\psi}_{n_w-1,j}^c + \tilde{\psi}_{n_w-2,j}^c \right)^2 + \frac{1}{4h_{z'}^2} \left( \tilde{\psi}_{n_w,j+1}^c - \tilde{\psi}_{n_w,j-1}^c \right)^2 +$$

$$2\tilde{\phi}_{n_w,j}^c = \tilde{v}_i^2 \quad (j = 1, 2, \dots, n_{z'} - 1), \quad (4.91)$$

$$\frac{1}{16h_w^2} g^2(i) \left( \tilde{\psi}_{i+1,n_{z'}}^c - \tilde{\psi}_{i-1,n_{z'}}^c \right)^2 + \frac{1}{4h_{z'}^2} \left( 3\tilde{\psi}_{i,n_{z'}}^c - 4\tilde{\psi}_{i,n_{z'}-1}^c + \tilde{\psi}_{i,n_{z'}-2}^c \right)^2 +$$

$$2\tilde{\phi}_{i,n_{z'}}^c = \tilde{v}_i^2 \quad (i = 1, 2, \dots, n_w - 1), \quad (4.92)$$

$$\frac{1}{16h_w^2} g^2(n_w) \left( 3\tilde{\psi}_{n_w,n_{z'}}^c - 4\tilde{\psi}_{n_w-1,n_{z'}}^c + \tilde{\psi}_{n_w-2,n_{z'}}^c \right)^2 +$$

$$\frac{1}{4h_{z'}^2} \left( 3\tilde{\psi}_{n_w,n_{z'}}^c - 4\tilde{\psi}_{n_w,n_{z'}-1}^c + \tilde{\psi}_{n_w,n_{z'}-2}^c \right)^2 + 2\tilde{\phi}_{n_w,n_{z'}}^c = \tilde{v}_i^2. \quad (4.93)$$

La condición de equipotencialidad (4.55) permite computar el potencial en los nodos sobre la superficie del cono:

$$\tilde{\psi}_{0,j}^c = 0 \quad (j = 1, 2, \dots, n_{z'}). \quad (4.94)$$

Finalmente, sobre la frontera común de las dos regiones se imponen las condiciones de continuidad del potencial de velocidad (ecuación (4.57)) y de su derivada en la dirección normal (ecuación (4.58)) y su versión en forma discreta proporcionan las correspondientes ecuaciones de acoplo en los nodos comunes a las dos regiones. La forma discreta de la condición (4.57) está dada por las ecuaciones

$$\tilde{\psi}_{i,n_\theta}^e - \tilde{\psi}_{i,0}^c = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, n_w). \quad (4.95)$$

La condición (4.58) se discretiza en este caso usando diferencias finitas regresivas en la variable  $\theta$  y diferencias finitas progresivas en la variable  $z'$ ; el resultado es

$$\frac{g^2(i)}{h_\theta} \left( 3\tilde{\psi}_{i,n_\theta}^e - 4\tilde{\psi}_{i,n_\theta-1}^e + \tilde{\psi}_{i,n_\theta-2}^e \right) +$$

$$\frac{1}{h_{z'}} \left( \tilde{\psi}_{i,2}^c - 4\tilde{\psi}_{i,1}^c + 3\tilde{\psi}_{i,0}^c \right) = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, n_w). \quad (4.96)$$

Las ecuaciones (4.86)-(4.88), (4.90)-(4.93) y (4.95)-(4.96) son las ecuaciones en diferencias finitas a orden dos correspondientes al *problema Energía*. Como ya se había advertido, la no linealidad de la ecuación de la energía está también presente en las correspondientes ecuaciones en diferencias finitas. Por otra parte, estas ecuaciones forman un sistema de  $n_w(n_\theta + n_{z'} + 2)$  ecuaciones para  $n_w(n_\theta + n_{z'} + 2)$  incógnitas (los valores  $\tilde{\psi}_{i,j}^e$ , con  $i = 1, 2, \dots, n_w$ ,  $j = 0, 1, \dots, n_\theta$  y los valores  $\tilde{\psi}_{i,j}^c$ , con  $i = 1, 2, \dots, n_w$ ,  $j = 0, 1, \dots, n_{z'}$ ).

### Discretización del *problema Gradiente*

Veamos ahora la discretización del *problema Gradiente*, el cual permite computar el campo de velocidades a partir del gradiente del potencial de velocidad. En los nodos interiores, la discretización de las derivadas se hace usando diferencias centradas y en los nodos fronterizos la discretización de las derivadas se hace usando diferencias progresivas o regresivas (dependiendo del caso y en la variable que corresponda).

Consideremos el cálculo en la región  $U_e$ . En este caso, la forma discreta del campo de velocidades (denotada por  $\tilde{\mathbf{v}}_{i,j}^e = (\tilde{v}_{w,i,j}^e, \tilde{v}_{\theta,i,j}^e)$ ) se obtiene al discretizar la ecuación (4.61). En primer lugar, en los nodos del eje (definidos por  $j = 0$ ) obtenemos

$$\left. \begin{aligned} \tilde{v}_{w,i,0}^e &= \frac{1}{4h_w} g(i) (\tilde{\psi}_{i+1,0}^e - \tilde{\psi}_{i-1,0}^e), \\ \tilde{v}_{\theta,i,0}^e &= 0, \end{aligned} \right\} \quad (i = 1, 2, \dots, n_w - 1), \quad (4.97)$$

donde la derivada en la variable radial se ha hecho usando diferencias centradas, y

$$\left. \begin{aligned} \tilde{v}_{w,n_w,0}^e &= \frac{1}{4h_w} g(n_w) (3\tilde{\psi}_{n_w,0}^e - 4\tilde{\psi}_{n_w-1,0}^e + \tilde{\psi}_{n_w-2,0}^e), \\ \tilde{v}_{\theta,n_w,0}^e &= 0, \end{aligned} \right\}, \quad (4.98)$$

donde la derivada radial se ha hecho usando diferencias regresivas. En estas ecuaciones, los coeficientes  $g(i)$  están definidos en la tabla 4.1. Además, se habrá notado que la componente angular del campo de velocidades es nula como consecuencia de la condición de regularidad del potencial de velocidad  $\tilde{\psi}$  (ecuación (4.56)). En segundo lugar, en los nodos con  $j = 1, 2, \dots, n_\theta - 1$  la derivada respecto a la variable angular se hace usando diferencias centradas, distinguiendo, como antes, entre los nodos interiores

$$\left. \begin{aligned} \tilde{v}_{w,i,j}^e &= \frac{1}{4h_w} g(i) (\tilde{\psi}_{i+1,j}^e - \tilde{\psi}_{i-1,j}^e), \\ \tilde{v}_{\theta,i,j}^e &= \frac{1}{2h_\theta} g^2(i) (\tilde{\psi}_{i,j+1}^e - \tilde{\psi}_{i,j-1}^e), \end{aligned} \right\} \quad (i = 1, 2, \dots, n_w - 1; j = 1, 2, \dots, n_\theta - 1), \quad (4.99)$$

donde la derivada radial se hace usando diferencias centradas, y los nodos más periféricos

$$\left. \begin{aligned} \tilde{v}_{w,n_w,j}^e &= \frac{1}{4h_w} g(n_w) (3\tilde{\psi}_{n_w,j}^e - 4\tilde{\psi}_{n_w-1,j}^e + \tilde{\psi}_{n_w-2,j}^e), \\ \tilde{v}_{\theta,n_w,j}^e &= \frac{1}{2h_\theta} g^2(n_w) (\tilde{\psi}_{n_w,j+1}^e - \tilde{\psi}_{n_w,j-1}^e), \end{aligned} \right\} \quad (j = 1, 2, \dots, n_\theta - 1), \quad (4.100)$$

donde la derivada radial se hace usando diferencias regresivas. Por último, en los nodos fronterizos con  $j = n_\theta$  la derivada con respecto a la variable angular se hace usando diferencias finitas regresivas y la derivada con respecto a la variable radial se hace usando diferencias finitas centradas o regresivas según corresponda:

$$\left. \begin{aligned} \tilde{v}_{w_i, n_\theta}^e &= \frac{1}{4h_w} g(i) \left( \tilde{\psi}_{i+1, n_\theta}^e - \tilde{\psi}_{i-1, n_\theta}^e \right), \\ \tilde{v}_{\theta_i, n_\theta}^e &= \frac{1}{2h_\theta} g^2(i) \left( 3\tilde{\psi}_{i, n_\theta}^e - 4\tilde{\psi}_{i, n_\theta-1}^e + \tilde{\psi}_{i, n_\theta-2}^e \right), \end{aligned} \right\} \quad (i = 1, 2, \dots, n_w - 1), \quad (4.101)$$

$$\left. \begin{aligned} \tilde{v}_{w_{n_w}, n_\theta}^e &= \frac{1}{4h_w} g(n_w) \left( 3\tilde{\psi}_{n_w, n_\theta}^e - 4\tilde{\psi}_{n_w-1, n_\theta}^e + \tilde{\psi}_{n_w-2, n_\theta}^e \right), \\ \tilde{v}_{\theta_{n_w}, n_\theta}^e &= \frac{1}{2h_\theta} g^2(n_w) \left( 3\tilde{\psi}_{n_w, n_\theta}^e - 4\tilde{\psi}_{n_w, n_\theta-1}^e + \tilde{\psi}_{n_w, n_\theta-2}^e \right), \end{aligned} \right\}. \quad (4.102)$$

En las ecuaciones anteriores, el potencial de velocidad en los nodos sobre la superficie del cono se obtiene por medio de la correspondiente condición de equipotencialidad (ecuación (4.54)):

$$\tilde{\psi}_{0, j}^e = 0 \quad (j = 0, 1, \dots, n_\theta). \quad (4.103)$$

El cálculo en la región  $U_c$  se hace de una forma completamente análoga. Ahora, la forma discreta del campo de velocidades (denotada por  $\tilde{\mathbf{v}}_{i, j}^c = \left( \tilde{v}_{u_i, j}^c, \tilde{v}_{z'_i, j}^c \right)$ ) se obtiene al discretizar la ecuación (4.62). En particular, obtenemos las siguientes ecuaciones en diferencias:

$$\left. \begin{aligned} \tilde{v}_{u_i, 0}^c &= \frac{1}{4h_w} g(i) \left( \tilde{\psi}_{i+1, 0}^c - \tilde{\psi}_{i-1, 0}^c \right), \\ \tilde{v}_{z'_i, 0}^c &= \frac{1}{2h_{z'}} \left( -3\tilde{\psi}_{i, 0}^c + 4\tilde{\psi}_{i, 1}^c - \tilde{\psi}_{i, 2}^c \right), \end{aligned} \right\} \quad (i = 1, 2, \dots, n_w - 1), \quad (4.104)$$

$$\left. \begin{aligned} \tilde{v}_{u_{n_w}, 0}^c &= \frac{1}{4h_w} g(n_w) \left( 3\tilde{\psi}_{n_w, 0}^c - 4\tilde{\psi}_{n_w-1, 0}^c + \tilde{\psi}_{n_w-2, 0}^c \right), \\ \tilde{v}_{z'_{n_w}, 0}^c &= \frac{1}{2h_{z'}} \left( -3\tilde{\psi}_{n_w, 0}^c + 4\tilde{\psi}_{n_w, 1}^c - \tilde{\psi}_{n_w, 2}^c \right), \end{aligned} \right\}, \quad (4.105)$$

$$\left. \begin{aligned} \tilde{v}_{u_i, j}^c &= \frac{1}{4h_w} g(i) \left( \tilde{\psi}_{i+1, j}^c - \tilde{\psi}_{i-1, j}^c \right), \\ \tilde{v}_{z'_i, j}^c &= \frac{1}{2h_{z'}} \left( \tilde{\psi}_{i, j+1}^c - \tilde{\psi}_{i, j-1}^c \right), \end{aligned} \right\} \quad (i = 1, 2, \dots, n_w - 1; j = 1, 2, \dots, n_{z'} - 1), \quad (4.106)$$

$$\left. \begin{aligned} \tilde{v}_{u_{n_w}, j}^c &= \frac{1}{4h_w} g(n_w) \left( 3\tilde{\psi}_{n_w, j}^c - 4\tilde{\psi}_{n_w-1, j}^c + \tilde{\psi}_{n_w-2, j}^c \right), \\ \tilde{v}_{z'_{n_w}, j}^c &= \frac{1}{2h_{z'}} \left( \tilde{\psi}_{n_w, j+1}^c - \tilde{\psi}_{n_w, j-1}^c \right), \end{aligned} \right\} \quad (j = 1, 2, \dots, n_{z'} - 1), \quad (4.107)$$

$$\left. \begin{aligned} \tilde{v}_{u_i, n_{z'}}^c &= \frac{1}{4h_w} g(i) \left( \tilde{\psi}_{i+1, n_{z'}}^c - \tilde{\psi}_{i-1, n_{z'}}^c \right), \\ \tilde{v}_{z'_i, n_{z'}}^c &= \frac{1}{2h_{z'}} \left( 3\tilde{\psi}_{i, n_{z'}}^c - 4\tilde{\psi}_{i, n_{z'}-1}^c + \tilde{\psi}_{i, n_{z'}-2}^c \right), \end{aligned} \right\} \quad (i = 1, 2, \dots, n_w - 1), \quad (4.108)$$

$$\left. \begin{aligned} \tilde{v}_{w_{n_w}, n_{z'}}^c &= \frac{1}{4h_w} g(n_w) \left( 3\tilde{\psi}_{n_w, n_{z'}}^c - 4\tilde{\psi}_{n_w-1, n_{z'}}^c + \tilde{\psi}_{n_w-2, n_{z'}}^c \right), \\ \tilde{v}_{z'_{n_w}, n_{z'}}^c &= \frac{1}{2h_{z'}} \left( 3\tilde{\psi}_{n_w, n_{z'}}^c - 4\tilde{\psi}_{n_w, n_{z'}-1}^c + \tilde{\psi}_{n_w, n_{z'}-2}^c \right), \end{aligned} \right\}. \quad (4.109)$$

Nuevamente, la condición de equipotencialidad del potencial de velocidad (4.55) permite computar los valores  $\tilde{\psi}_{0,j}^c$ :

$$\tilde{\psi}_{0,j}^c = 0 \quad (j = 0, 1, \dots, n_{z'}). \quad (4.110)$$

### Discretización del problema Continuidad

El problema Continuidad es un problema lineal para la densidad  $\tilde{n}$ , dado que el campo de velocidades es conocido en este problema. Además, como en el caso de la ecuación de la energía, el problema es de orden uno y la discretización en los nodos más exteriores del mallado se hará usando diferencias finitas regresivas (en la variable que corresponda).

En la región  $U_e$  debemos discretizar la condición de regularidad en el eje (ecuación (4.69)), la ecuación de continuidad (ecuación (4.65)) y la condición de contorno que prescribe el perfil de carga emitido (ecuación (4.67)). La condición (4.69) proporciona las siguientes ecuaciones en diferencias:

$$-\tilde{n}_{i,2}^e + 4\tilde{n}_{i,1}^e - 3\tilde{n}_{i,0}^e = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, n_w). \quad (4.111)$$

La ecuación (4.65) conduce a las siguientes ecuaciones en diferencias:

$$\begin{aligned} \frac{1}{4h_w} \left( \tilde{v}_{w_{i+1}, j}^e \tilde{n}_{i+1, j}^e - \tilde{v}_{w_{i-1}, j}^e \tilde{n}_{i-1, j}^e \right) + \frac{1}{2h_\theta} g(i) \left( \tilde{v}_{\theta_{i, j+1}}^e \tilde{n}_{i, j+1}^e - \tilde{v}_{\theta_{i, j-1}}^e \tilde{n}_{i, j-1}^e \right) + \\ 2g(i) \left( \tilde{v}_{w_{i, j}}^e + h_1(j) \tilde{v}_{\theta_{i, j}}^e \right) \tilde{n}_{i, j}^e = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, n_w - 1; j = 1, 2, \dots, n_\theta - 1), \end{aligned} \quad (4.112)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{4h_w} \left( 3\tilde{v}_{w_{n_w}, j}^e \tilde{n}_{n_w, j}^e - 4\tilde{v}_{w_{n_w-1}, j}^e \tilde{n}_{n_w-1, j}^e + \tilde{v}_{w_{n_w-2}, j}^e \tilde{n}_{n_w-2, j}^e \right) + \\ \frac{1}{2h_\theta} g(n_w) \left( \tilde{v}_{\theta_{n_w, j+1}}^e \tilde{n}_{n_w, j+1}^e - \tilde{v}_{\theta_{n_w, j-1}}^e \tilde{n}_{n_w, j-1}^e \right) + \\ 2g(n_w) \left( \tilde{v}_{w_{n_w}, j}^e + h_1(j) \tilde{v}_{\theta_{n_w}, j}^e \right) \tilde{n}_{n_w, j}^e = 0 \quad (j = 1, 2, \dots, n_\theta - 1), \end{aligned} \quad (4.113)$$

donde los coeficientes  $g(i)$  y  $h_1(j)$  están definidos en la tabla 4.1. La condición de contorno (4.67) permite determinar los valores  $\tilde{n}_{0,j}^e$ :

$$\tilde{n}_{0,j}^e = n_0(\theta_j) \quad (j = 1, 2, \dots, n_\theta - 1). \quad (4.114)$$

En la subregión  $U_c$  hay que discretizar la ecuación de continuidad (4.66) y la condición de contorno dada por la ecuación (4.68). La ecuación (4.66) lleva a las siguientes ecuaciones en

diferencias:

$$\frac{1}{4h_w}g(i) \left( \tilde{v}_{u_{i+1,j}}^c \tilde{n}_{i+1,j}^c - \tilde{v}_{u_{i-1,j}}^c \tilde{n}_{i-1,j}^c \right) + \frac{1}{2h_{z'}} \left( \tilde{v}_{z'_{i,j+1}}^c \tilde{n}_{i,j+1}^c - \tilde{v}_{z'_{i,j-1}}^c \tilde{n}_{i,j-1}^c \right) + h_2(i,j) \left( \tilde{v}_{u_{i,j}}^c + \tan \alpha_T \tilde{v}_{z'_{i,j}}^c \right) \tilde{n}_{i,j}^c = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, n_w - 1; j = 1, 2, \dots, n_{z'} - 1), \quad (4.115)$$

$$\frac{1}{4h_w}g(n_w) \left( 3\tilde{v}_{u_{n_w,j}}^c \tilde{n}_{n_w,j}^c - 4\tilde{v}_{u_{n_w-1,j}}^c \tilde{n}_{n_w-1,j}^c + \tilde{v}_{u_{n_w-2,j}}^c \tilde{n}_{n_w-2,j}^c \right) + \frac{1}{2h_{z'}} \left( \tilde{v}_{z'_{n_w,j+1}}^c \tilde{n}_{n_w,j+1}^c - \tilde{v}_{z'_{n_w,j-1}}^c \tilde{n}_{n_w,j-1}^c \right) + h_2(n_w,j) \left( \tilde{v}_{u_{n_w,j}}^c + \tan \alpha_T \tilde{v}_{z'_{n_w,j}}^c \right) \tilde{n}_{n_w,j}^c = 0 \quad (j = 1, 2, \dots, n_{z'} - 1), \quad (4.116)$$

$$\frac{1}{4h_w}g(i) \left( \tilde{v}_{u_{i+1,n_{z'}}}^c \tilde{n}_{i+1,n_{z'}}^c - \tilde{v}_{u_{i-1,n_{z'}}}^c \tilde{n}_{i-1,n_{z'}}^c \right) + \frac{1}{2h_{z'}} \left( 3\tilde{v}_{z'_{i,n_{z'}}}^c \tilde{n}_{i,n_{z'}}^c - 4\tilde{v}_{z'_{i,n_{z'}-1}}^c \tilde{n}_{i,n_{z'}-1}^c + \tilde{v}_{z'_{i,n_{z'}-2}}^c \tilde{n}_{i,n_{z'}-2}^c \right) + h_2(i,n_{z'}) \left( \tilde{v}_{u_{i,n_{z'}}}^c + \tan \alpha_T \tilde{v}_{z'_{i,n_{z'}}}^c \right) \tilde{n}_{i,n_{z'}}^c = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, n_w - 1), \quad (4.117)$$

$$\frac{1}{4h_w}g(n_w) \left( 3\tilde{v}_{u_{n_w,n_{z'}}}^c \tilde{n}_{n_w,n_{z'}}^c - 4\tilde{v}_{u_{n_w-1,n_{z'}}}^c \tilde{n}_{n_w-1,n_{z'}}^c + \tilde{v}_{u_{n_w-2,n_{z'}}}^c \tilde{n}_{n_w-2,n_{z'}}^c \right) + \frac{1}{2h_{z'}} \left( 3\tilde{v}_{z'_{n_w,n_{z'}}}^c \tilde{n}_{n_w,n_{z'}}^c - 4\tilde{v}_{z'_{n_w,n_{z'}-1}}^c \tilde{n}_{n_w,n_{z'}-1}^c + \tilde{v}_{z'_{n_w,n_{z'}-2}}^c \tilde{n}_{n_w,n_{z'}-2}^c \right) + h_2(n_w,n_{z'}) \left( \tilde{v}_{u_{n_w,n_{z'}}}^c + \tan \alpha_T \tilde{v}_{z'_{n_w,n_{z'}}}^c \right) \tilde{n}_{n_w,n_{z'}}^c = 0, \quad (4.118)$$

donde los coeficientes  $g(i)$  y  $h_2(i,j)$  están definidos en la tabla 4.1. Por medio de la condición de contorno (4.68), obtenemos

$$\tilde{n}_{0,j}^c \tilde{v}_{u_{0,j}}^c = 0 \quad (j = 1, 2, \dots, n_{z'}). \quad (4.119)$$

Por último, sobre la frontera común de las dos regiones se imponen las condiciones de continuidad de la densidad de gotas (ecuación (4.70)) y de su derivada en la dirección normal (ecuación (4.71)). Ambas condiciones se discretizan como en el caso de la ecuación de la energía. En particular, la forma discreta de la condición (4.70) está dada por las ecuaciones

$$\tilde{n}_{i,n_\theta}^e - \tilde{n}_{i,0}^c = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, n_w), \quad (4.120)$$

y la versión discreta de la condición (4.71) consta de las ecuaciones

$$\frac{g^2(i)}{h_\theta} \left( 3\tilde{n}_{i,n_\theta}^e - 4\tilde{n}_{i,n_\theta-1}^e + \tilde{n}_{i,n_\theta-2}^e \right) + \frac{1}{h_{z'}} \left( \tilde{n}_{i,2}^c - 4\tilde{n}_{i,1}^c + 3\tilde{n}_{i,0}^c \right) = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, n_w). \quad (4.121)$$

Las ecuaciones (4.111)-(4.113), (4.115)-(4.118) y (4.120)-(4.121) constituyen las ecuaciones en diferencias finitas a orden dos correspondientes al *problema Continuidad*. Estas ecuaciones forman un sistema lineal de  $n_w(n_\theta + n_{z'} + 2)$  ecuaciones para  $n_w(n_\theta + n_{z'} + 2)$  incógnitas: los valores  $\tilde{n}_{i,j}^e$ , con  $i = 1, 2, \dots, n_w$ ,  $j = 0, 1, \dots, n_\theta$  y los valores  $\tilde{n}_{i,j}^c$ , con  $i = 1, 2, \dots, n_w$ ,  $j = 0, 1, \dots, n_{z'}$ .

### 4.3.3. Algoritmo numérico

Como ya se ha mencionado con anterioridad (ver figura 4.4), el algoritmo numérico consiste en resolver de forma sucesiva el *problema Poisson* (P), el *problema Energía* (E), el *problema Gradiente* (G) y el *problema Continuidad* (C) para obtener, respectivamente, el potencial eléctrico, el potencial de velocidad, el campo de velocidades y la densidad de gotas hasta obtener convergencia en los tres campos escalares.

Cada uno de los problemas se resuelve numéricamente usando un esquema en diferencias finitas; esto implica que debemos obtener el valor de cada campo en  $n_w (n_\theta + n_{z'} + 2)$  nodos del mallado. De esta forma, la versión discreta de cada campo viene dada por un vector cuyas componentes dan el valor de ese campo en cada nodo del mallado. Por ejemplo, la versión discreta de la densidad de gotas en la iteración  $k$  se denota por  $n^k$  y es un vector de  $n_w (n_\theta + n_{z'} + 2)$  componentes:

$$n^k \equiv (\tilde{n}_{i,j}^e, \tilde{n}_{i,j}^c), \quad (4.122)$$

donde  $i = 1, 2, \dots, n_w$ ,  $j = 0, 1, \dots, n_\theta$  en las variables  $(w, \theta)$  (superíndice  $e$ ), y  $i = 1, 2, \dots, n_w$ ,  $j = 0, 1, \dots, n_{z'}$  en las variables  $(u, z')$  (superíndice  $c$ ). La misma notación se usa para los otros campos; así,  $\phi^k$ ,  $\psi^k$  y  $\mathbf{v}^k$  son, respectivamente, la forma discreta del potencial eléctrico, del potencial de velocidad y del campo de velocidades en la iteración  $k$  y son vectores de  $n_w (n_\theta + n_{z'} + 2)$  componentes. Notar que las componentes del campo de velocidades son, a su vez, vectores de dos componentes (las correspondientes componentes del vector velocidad).

El organigrama del algoritmo numérico que hemos implementado es muy simple y consta de los pasos siguientes:

1. Fijar el valor  $\tilde{r}_1$  (lo que determina la extensión del dominio donde se computan los campos), los valores  $n_w$ ,  $n_\theta$  y  $n_{z'}$  (lo que determina el número de nodos del mallado) y la cota de error  $\epsilon$  para la cual se considere que hay convergencia.
2. Fijar la condición inicial del algoritmo; en particular, el algoritmo se puede iniciar asumiendo que la densidad de gotas es igual a 0, es decir, fijando el vector  $n^0$  igual al vector nulo.
3. Resolver los cuatro problemas (P, E, G y C) para obtener los campos en la primera iteración:  $\phi^1$ ,  $\psi^1$ ,  $\mathbf{v}^1$  y  $n^1$ .
4. Reiterar el proceso, lo que permite obtener los campos en la iteración  $k \geq 2$  ( $\phi^k$ ,  $\psi^k$ ,  $\mathbf{v}^k$  y  $n^k$ ) y calcular el error correspondiente a cada uno de los campos escalares:

$$\epsilon_\phi = \|\phi^k - \phi^{k-1}\|_0, \quad \epsilon_\psi = \|\psi^k - \psi^{k-1}\|_0, \quad \epsilon_n = \|n^k - n^{k-1}\|_0, \quad (4.123)$$

donde  $\|\cdot\|_0$  es la norma del supremo [18], la cual asigna a un vector el mayor de los valores absolutos de las componentes del vector.

5. Comprobar si hay convergencia en cada iteración  $k \geq 2$ : si se cumple que  $\epsilon_\phi < \epsilon$ ,  $\epsilon_\psi < \epsilon$  y  $\epsilon_n < \epsilon$  hay convergencia, finaliza el algoritmo y la solución obtenida en la iteración  $k$  proporciona la solución numérica en diferencias finitas a orden dos y con error menor que  $\epsilon$ .

Como es lógico, una mayor resolución del mallado y una menor cota de error proporciona mayor precisión en los resultados, pero también aumenta el coste computacional.

Es importante notar que la resolución numérica del *problema Energía* implica resolver, en cada iteración  $k$ , un sistema algebraico de ecuaciones no lineales para obtener el vector  $\psi^k$ . Para ello, se usa el método de Newton [7], tomando como valor inicial de prueba el vector  $\psi^{k-1}$ . En la primera iteración ( $k = 1$ ), para el vector inicial de prueba  $\psi^0$  hemos tomado el que sale al discretizar la función  $\psi_T$ , es decir, la función obtenida al resolver la ecuación de la energía (con velocidad de inyección igual a 0) cuando el potencial eléctrico está dado por el potencial de Taylor  $\phi_T$  (ecuación (2.13)). Una aproximación a la función  $\tilde{\psi}_T$  viene dada [15] por  $\tilde{\psi}_T \approx (4/5)(-2a_T)^{1/2} \tilde{r}^{5/4}$ .

La solución numérica dada por el algoritmo proporciona el valor de los tres campos escalares sólo en los nodos del mallado. Para efectuar cálculos futuros (por ejemplo, los relativos al análisis de la distribución estadística de la carga) debemos obtener las correspondientes funciones de interpolación de los campos, las cuales proporcionan el valor de los campos en puntos intermedios a los nodos del mallado. En el caso presente, hemos obtenido las funciones de interpolación lineal (o de orden uno) [7] de los tres campos escalares  $\tilde{n}(\tilde{\mathbf{r}})$ ,  $\tilde{\phi}(\tilde{\mathbf{r}})$  y  $\tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{r}})$ , con  $\tilde{\mathbf{r}} \in U_\Gamma$ .

## 4.4. Resultados y análisis

El algoritmo numérico descrito en la sección anterior ha sido probado con éxito para diferentes valores de los parámetros del problema (ver debajo). En esta sección analizaremos con detalle un ejemplo concreto.

La tabla 4.2 muestra el valor de cada uno de los parámetros del problema que se han elegido en el ejemplo, es decir, el radio de la superficie de emisión ( $\tilde{r}_0 = 0,1$ ), la velocidad de inyección ( $\tilde{v}_i = 7$ ) y el perfil de carga emitido  $\tilde{n}_0(\theta)$ , cuya gráfica se muestra en la figura 4.5. La tabla muestra también los valores escogidos para el mallado y el algoritmo numérico que se usa para resolver el problema.

Los parámetros del problema han sido elegidos con el criterio general de proporcionar condiciones realistas para electrosprays en vacío. En este sentido, es importante comentar el criterio que hemos seguido para la elección de la función  $\tilde{n}_0(\theta)$ . Esta función determina la densidad de carga sobre la superficie del casquete esférico  $S_e$  y, por tanto, debe estar definida sobre el intervalo cerrado  $[0, \theta_c]$ , donde  $\theta_c = \frac{\pi}{2} - \alpha_T \simeq 0,7105$  denota el ángulo del casquete (en grados sexagesimales,  $\theta_c \simeq 40,71^\circ$ ). En primer lugar, la función  $\tilde{n}_0(\theta)$  elegida (tabla 4.2 y figura 4.5) es fácil de implementar y cumple, por construcción, la condición dada por la ecuación (4.16). Dentro de la arbitrariedad aún existente, la función ha sido buscada con la condición de que presente un máximo absoluto en el eje ( $\theta = 0$ ) y se anule en el extremo del casquete ( $\theta = \theta_c$ ). Más concretamente, además de la condición (4.16), es fácil probar que la función  $\tilde{n}_0(\theta)$  cumple otras tres propiedades:

1. Es de clase  $C^1$  en  $[0, \theta_c]$  (es decir, es una función continua y con derivada continua).
2. En el eje cumple  $\tilde{n}'_0(0) = 0$ .
3. En el extremo del casquete satisface  $\tilde{n}_0(\theta_c) = \tilde{n}'_0(\theta_c) = 0$ .



Datos del problema
$\tilde{r}_0 = 0,1$
$\tilde{v}_i = 7$
$\tilde{n}_0(\theta) = \begin{cases} \frac{4}{9} N_0 \theta_c^2 \exp\left(\frac{1}{2} - \frac{9\theta^2}{2\theta_c^2}\right) & \text{si } 0 \leq \theta < \frac{\theta_c}{3}, \\ N_0 (\theta - \theta_c)^2 & \text{si } \frac{\theta_c}{3} \leq \theta \leq \theta_c. \end{cases}$
Datos del mallado
$\tilde{r}_1 = 10 \rightarrow \tilde{r}_2 = 9,9$
$n_w = 99, n_\theta = 16, n_{z'} = 80$
Datos del algoritmo
$\epsilon = 10^{-4}$

Tabla 4.2: Valores elegidos para la simulación. En el caso de la función  $\tilde{n}_0(\theta)$ , hemos denotado por  $\theta_c$  el ángulo del casquete esférico  $S_e$ , es decir,  $\theta_c = \frac{\pi}{2} - \alpha_T \simeq 0,7105$ ; además,  $N_0 > 0$  es una constante cuyo valor se fija por medio de la ecuación (4.16) (en el caso presente, se obtiene el valor  $N_0 = 111,467$ ). La gráfica de la función  $\tilde{n}_0(\theta)$  se muestra en la figura 4.5.

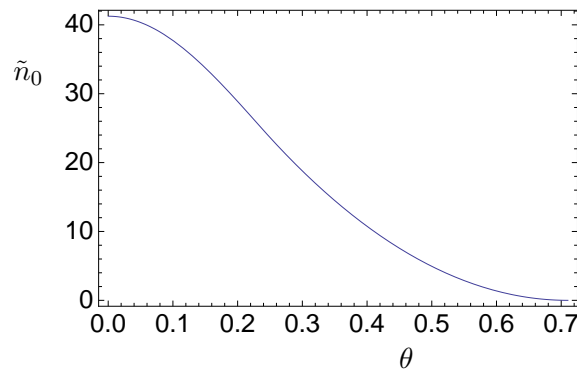


Figura 4.5: Perfil de carga emitido:  $\tilde{n}_0(\theta)$

Estas tres condiciones son realistas desde un punto de vista físico, pues garantizan el buen comportamiento de la función; en particular, las condiciones anteriores, unidas a la dada por (4.6), aseguran que la densidad de corriente  $\tilde{\mathbf{J}}$  sea una función continua con derivada continua sobre la superficie completa del cono líquido.

Por otra parte, el mallado elegido es el mostrado en la figura 4.3. En nuestro caso,  $\tilde{r}_1 = 100 \tilde{r}_0$ , lo que garantiza el cumplimiento de la condición de campo lejano (ecuación (4.7)). Finalmente, la resolución del mallado (tenemos un mallado de cerca de 10000 nodos) y la cota de error para la cual se considera que hay convergencia ( $\epsilon = 10^{-4}$ ) son adecuadas para asegurar una alta precisión de los resultados. En particular, esto ha sido testado observando la independencia de los resultados al aumentar la resolución y al disminuir la cota de error hasta  $\epsilon = 10^{-6}$ .

Al hacer correr el algoritmo numérico se obtiene convergencia al cabo de 26 iteraciones, con errores  $\epsilon_\phi = 3,39 \times 10^{-5}$ ,  $\epsilon_\psi = 2,15 \times 10^{-7}$  y  $\epsilon_n = 6,6 \times 10^{-5}$ . Los resultados para los tres campos escalares se muestran en la figura 4.6. El resultado más relevante es el decaimiento de carga eléctrica que se observa en el eje. En particular, el máximo de haz se desplaza desde el eje hacia la periferia, lo cual se aprecia con claridad en la figura 4.7 y se explica con detalle a continuación.

En efecto, en  $\tilde{r} \rightarrow \tilde{r}_0$  tenemos un haz de carga con simetría cilíndrica con máximo de carga en el eje  $\theta = 0$  (figura 4.5) y que es emitido con una cierta velocidad  $\tilde{v}_i$ . En un espacio muy pequeño (con  $\tilde{r}$  entre  $\tilde{r}_0 = 0,1$  y  $0,3$ ), el haz evoluciona hasta un “haz hueco” con máximo de carga localizado en un ángulo definido por  $\theta \simeq 0,22$  (es decir, aproximadamente de unos  $13^\circ$ ), lo cual se observa en las gráficas de la figura 4.7. A partir de esta distancia, la dispersión de la carga ocurre sin que apenas se modifique la posición angular del máximo del haz (ver las gráficas de la figura 4.7).

Parece evidente que el fenómeno de “haz hueco” ocurre como resultado de la repulsión mutua que se produce entre las gotas que forman el spray. Esto explica, físicamente, el máximo absoluto que el potencial eléctrico  $\tilde{\phi}$  alcanza en un punto del eje, localizado aproximadamente a una distancia del origen dada por  $\tilde{r} = 0,12$  (ver la figura 4.6 y más en particular, la figura 4.8). En dicho punto, el módulo del campo de velocidades  $\tilde{v}$  alcanza, lógicamente, su valor mínimo (dado por  $\tilde{v} = 5,73$ , según nuestros cálculos).

El conocimiento de la función  $\tilde{n}$  permite hacer un análisis estadístico de la distribución de la carga espacial (ver apéndice C). En particular, el análisis estadístico de la distribución angular de las gotas se obtiene a través del valor medio de la coordenada angular  $\theta$  (o ángulo medio),  $\langle \theta \rangle$ , y su correspondiente desviación estándar,  $\Delta\theta$ . El ángulo medio  $\langle \theta \rangle$  se calcula por medio de la ecuación (C.4):

$$\langle \theta \rangle = \frac{\int \int_{V_\Gamma} \theta \tilde{n}(\tilde{r}, \theta) \tilde{r}^2 \sin \theta \, d\tilde{r} \, d\theta}{\int \int_{V_\Gamma} \tilde{n}(\tilde{r}, \theta) \tilde{r}^2 \sin \theta \, d\tilde{r} \, d\theta}. \quad (4.124)$$

La desviación estándar viene definida por  $\Delta\theta = (\langle \theta^2 \rangle - \langle \theta \rangle^2)^{1/2}$ , donde  $\langle \theta^2 \rangle$  se calcula por medio de la ecuación (C.6):

$$\langle \theta^2 \rangle = \frac{\int \int_{V_\Gamma} \theta^2 \tilde{n}(\tilde{r}, \theta) \tilde{r}^2 \sin \theta \, d\tilde{r} \, d\theta}{\int \int_{V_\Gamma} \tilde{n}(\tilde{r}, \theta) \tilde{r}^2 \sin \theta \, d\tilde{r} \, d\theta}. \quad (4.125)$$

Las integrales anteriores están extendidas a toda la región externa a la superficie del cono líquido (la región  $V_\Gamma$ ), la cual se puede descomponer en las dos subregiones  $V_e$  y  $V_c$  (ver figura 4.2). Para el cálculo numérico de dichas integrales debemos hacer algunas aproximaciones,

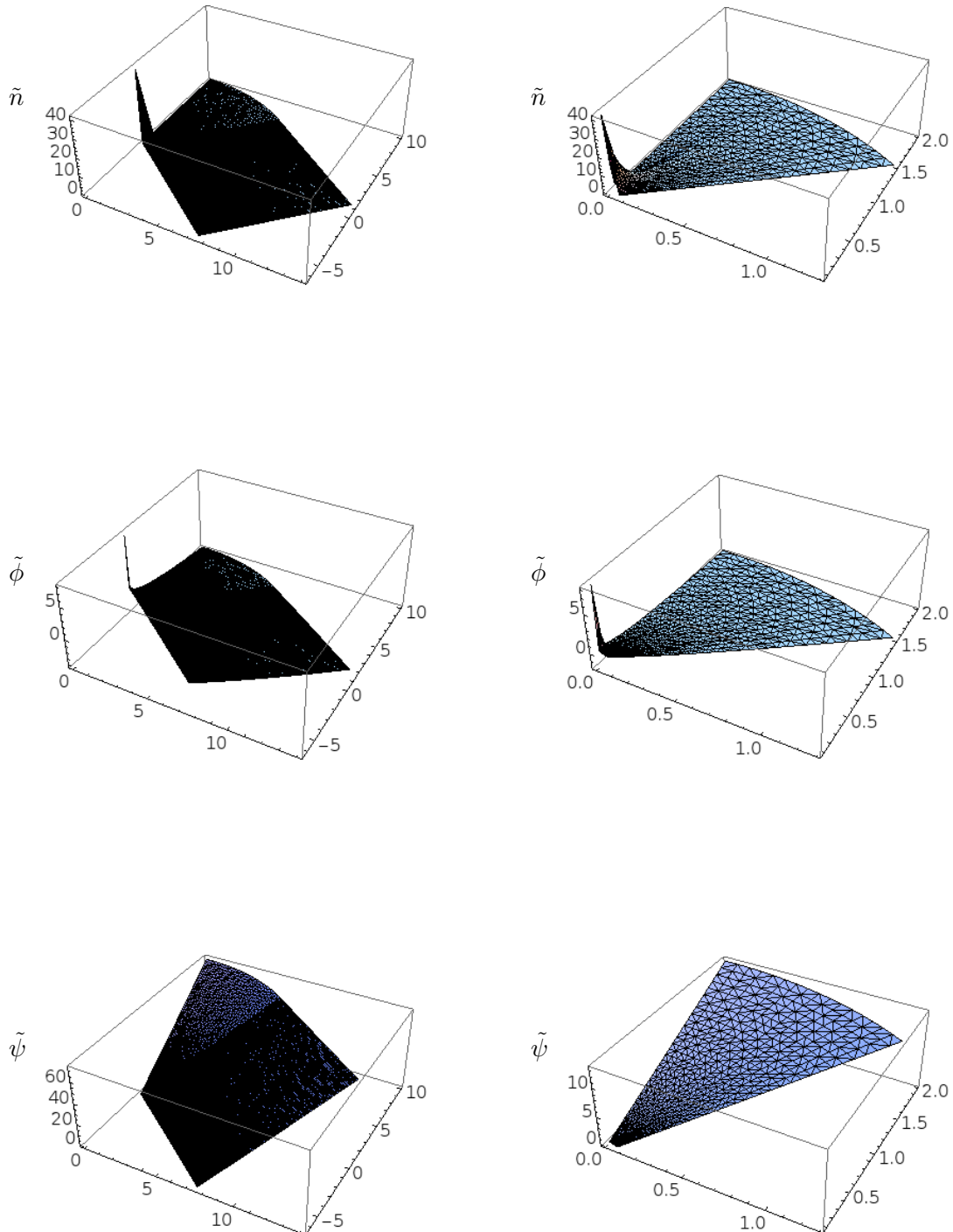


Figura 4.6: Gráficas de los campos escalares  $\tilde{n}$ ,  $\tilde{\phi}$  y  $\tilde{\psi}$  correspondientes a los datos de la tabla 4.2. A la derecha, se muestra un detalle en la región próxima a la superficie de emisión.

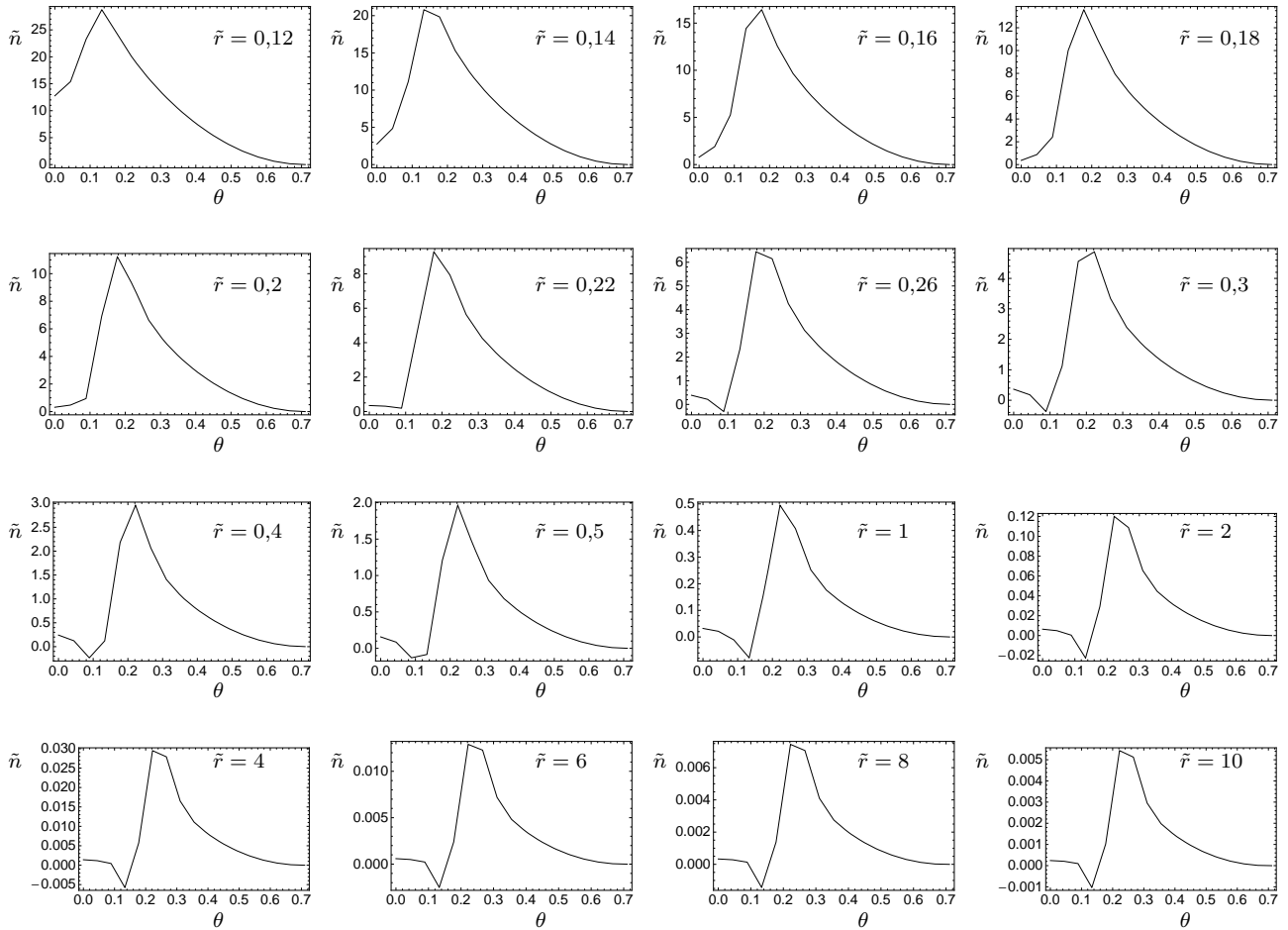


Figura 4.7: Densidad numérica de gotas  $\tilde{n}$  como función del ángulo  $\theta$  a  $\tilde{r}$  constante para varias distancias dentro de la región  $U_e$ .

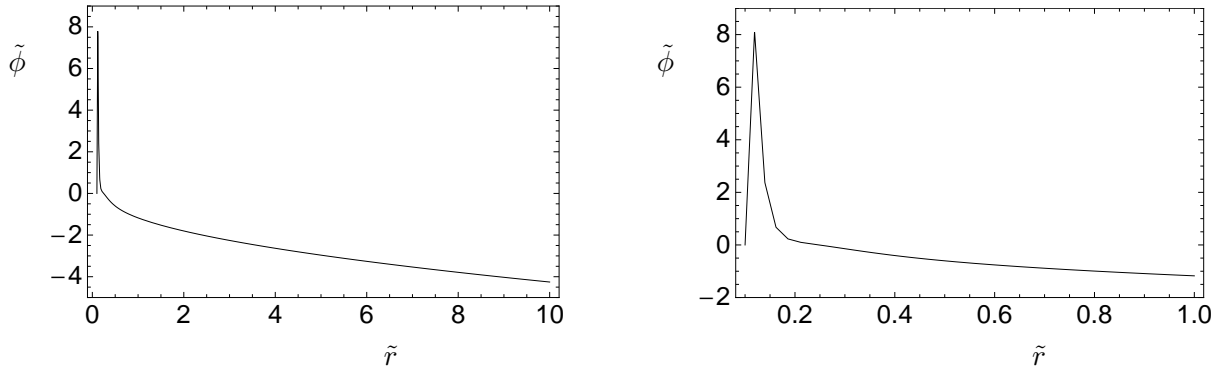


Figura 4.8: Potencial eléctrico  $\tilde{\phi}$  como función de la coordenada radial  $\tilde{r}$  en el eje ( $\theta = 0$ ). A la derecha, detalle en los puntos del intervalo  $\tilde{r} \in [\tilde{r}_0, 1]$ .

las cuales son fácilmente justificables teniendo en cuenta el decaimiento de la densidad de carga conforme nos alejamos de la superficie de emisión  $S_e$ . En primer lugar, es claro que la contribución de las integrales en la región  $V_c$  es despreciable. Por otra parte, en la región  $V_e$  también se puede despreciar la contribución de las integrales a distancias mayores que  $\tilde{r}_1$ . Con estas aproximaciones, tenemos que las fórmulas para el ángulo medio  $\langle \theta \rangle$  (ecuación (4.124)) y para  $\langle \theta^2 \rangle$  (ecuación (4.125)) se reducen a

$$\langle \theta \rangle \approx \frac{\int_{\tilde{r}_0}^{\tilde{r}_1} \int_0^{\theta_c} \theta \tilde{n}(\tilde{r}, \theta) \tilde{r}^2 \sin \theta \, d\theta \, d\tilde{r}}{\int_{\tilde{r}_0}^{\tilde{r}_1} \int_0^{\theta_c} \tilde{n}(\tilde{r}, \theta) \tilde{r}^2 \sin \theta \, d\theta \, d\tilde{r}}, \quad (4.126)$$

$$\langle \theta^2 \rangle \approx \frac{\int_{\tilde{r}_0}^{\tilde{r}_1} \int_0^{\theta_c} \theta^2 \tilde{n}(\tilde{r}, \theta) \tilde{r}^2 \sin \theta \, d\theta \, d\tilde{r}}{\int_{\tilde{r}_0}^{\tilde{r}_1} \int_0^{\theta_c} \tilde{n}(\tilde{r}, \theta) \tilde{r}^2 \sin \theta \, d\theta \, d\tilde{r}}. \quad (4.127)$$

De esta forma, las integrales que aparecen en las fórmulas (4.126) y (4.127) son susceptibles de computarse numéricamente (usando la correspondiente función de interpolación lineal del campo  $\tilde{n}$ ).

Según nuestros cálculos, obtenemos que el ángulo medio es  $\langle \theta \rangle = 0,3328$  (aproximadamente, unos  $19^\circ$ ) y la desviación estándar toma el valor  $\Delta\theta = 0,1029$  (es decir, unos  $6^\circ$ ). Con esto, la distribución angular del electrospray de nuestro ejemplo se puede representar aproximadamente por el pequeño intervalo angular  $(\langle \theta \rangle - (1/2)\Delta\theta, \langle \theta \rangle + (1/2)\Delta\theta) \approx (16^\circ, 22^\circ)$ .

De todas formas, la información dada por los parámetros  $\langle \theta \rangle$  y  $\Delta\theta$  es un poco limitada, en el sentido que no proporciona conocimiento alguno sobre la dependencia de la distribución de la carga con la distancia a la superficie de emisión. Para ello, es útil estudiar la distribución angular de las gotas a cada distancia  $\tilde{r} = \text{constante}$ , con  $\tilde{r} \geq \tilde{r}_0$ . Esto se hace (ver apéndice C) calculando los parámetros anteriores a distancia constante, esto es, el ángulo medio a distancia constante,  $\langle \theta \rangle_r$ :

$$\langle \theta \rangle_r \approx \frac{\int_0^{\theta_c} \theta \tilde{n}(\tilde{r}, \theta) \sin \theta \, d\theta}{\int_0^{\theta_c} \tilde{n}(\tilde{r}, \theta) \sin \theta \, d\theta}, \quad (4.128)$$

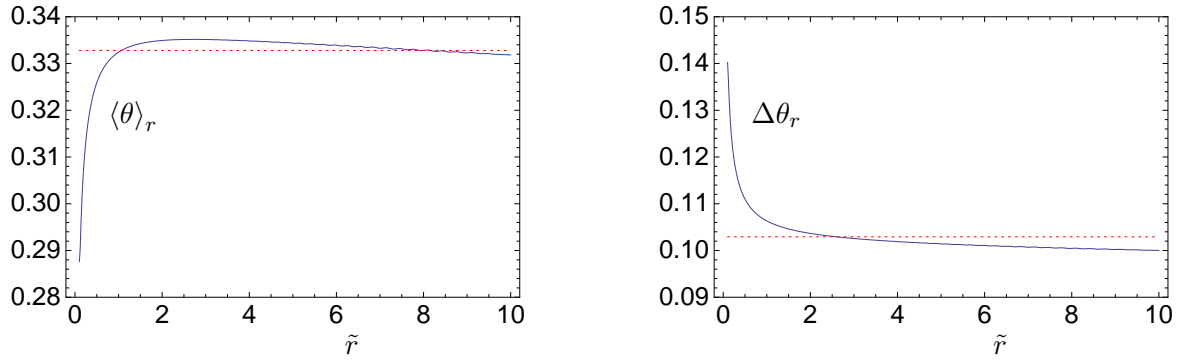


Figura 4.9: Parámetros estadísticos (media  $\langle \theta \rangle_r$  y desviación estándar  $\Delta \theta_r$ ) correspondientes a la distribución de la carga emitida como función de  $\tilde{r}$  en el rango  $\tilde{r}_0 \leq \tilde{r} \leq \tilde{r}_1$ . Las líneas punteadas en color rojo dan el correspondiente valor de  $\langle \theta \rangle$  y  $\Delta \theta$ .

y su correspondiente desviación estándar  $\Delta \theta_r = (\langle \theta^2 \rangle_r - \langle \theta \rangle_r^2)^{1/2}$ , con

$$\langle \theta^2 \rangle_r \approx \frac{\int_0^{\theta_c} \theta^2 \tilde{n}(\tilde{r}, \theta) \sin \theta d\theta}{\int_0^{\theta_c} \tilde{n}(\tilde{r}, \theta) \sin \theta d\theta}, \quad (4.129)$$

y donde, como hicimos anteriormente, estamos despreciando la contribución en la región  $V_c$ .

Es claro que los parámetros  $\langle \theta \rangle_r$  y  $\Delta \theta_r$  dependen del valor de la coordenada radial que se esté considerando. La figura 4.9 muestra su valor como función de  $\tilde{r}$  en el rango de interés  $\tilde{r}_0 \leq \tilde{r} \leq \tilde{r}_1$ . Podemos observar que el ángulo medio  $\langle \theta \rangle_r$  aumenta muy bruscamente cerca de la superficie de emisión; después, el crecimiento es más suave, hasta superar ligeramente el valor de  $\langle \theta \rangle$ , para después, disminuir muy lentamente conforme se consideran valores mayores de  $\tilde{r}$ . Por su parte, el valor de  $\Delta \theta_r$  disminuye al considerar valores mayores que  $\tilde{r}$  (otra vez, la disminución es más fuerte a distancias muy pequeñas) de donde inferimos que el haz se hace más estrecho conforme aumenta la distancia a la superficie de emisión.

Los resultados mostrados en la figura 4.9 son totalmente esperables después de lo observado en la figura 4.7. En particular, la débil dependencia de los dos parámetros con  $\tilde{r}$  que se observa a valores altos de  $\tilde{r}$  (ver figura 4.7). De esta pequeña dependencia se infiere que, a grandes distancias, la función  $\tilde{n}$  debe estar dada aproximadamente por una función "separable" en parte radial  $\tilde{r}$  y parte angular  $\theta$ , lo cual, por otra parte, no es sorprendente recordando la condición de campo lejano prescrita en el problema (ecuación (4.7)).

Resultados similares a los descritos con anterioridad son obtenidos para otros valores de la velocidad de inyección  $\tilde{v}_i$  y de la distancia  $\tilde{r}_1$ . En la figura 4.10 se muestra el valor de los parámetros estadísticos de la distribución de carga emitida en el caso  $\tilde{r}_1 = 7$  para tres valores de la velocidad de inyección:  $\tilde{v}_i = 6$ ,  $\tilde{v}_i = 6,5$  y  $\tilde{v}_i = 7$ . Los valores del ángulo medio y la desviación estándar para el caso  $\tilde{v}_i = 7$  son prácticamente idénticos a los obtenidos con  $\tilde{r}_1 = 10$ , mostrando la independencia de los resultados con  $\tilde{r}_1$ . Por otra parte, encontramos haces más cercanos al eje y más anchos conforme aumenta el valor de  $\tilde{v}_i$ , aunque la variación de los parámetros estadísticos con la velocidad de inyección es muy pequeña. Además, al disminuir la velocidad de inyección se observa un menor valor del máximo absoluto del potencial eléctrico  $\tilde{\phi}$  y un menor valor del mínimo absoluto alcanzado por el módulo del campo de velocidades del electro spray  $\tilde{v}$

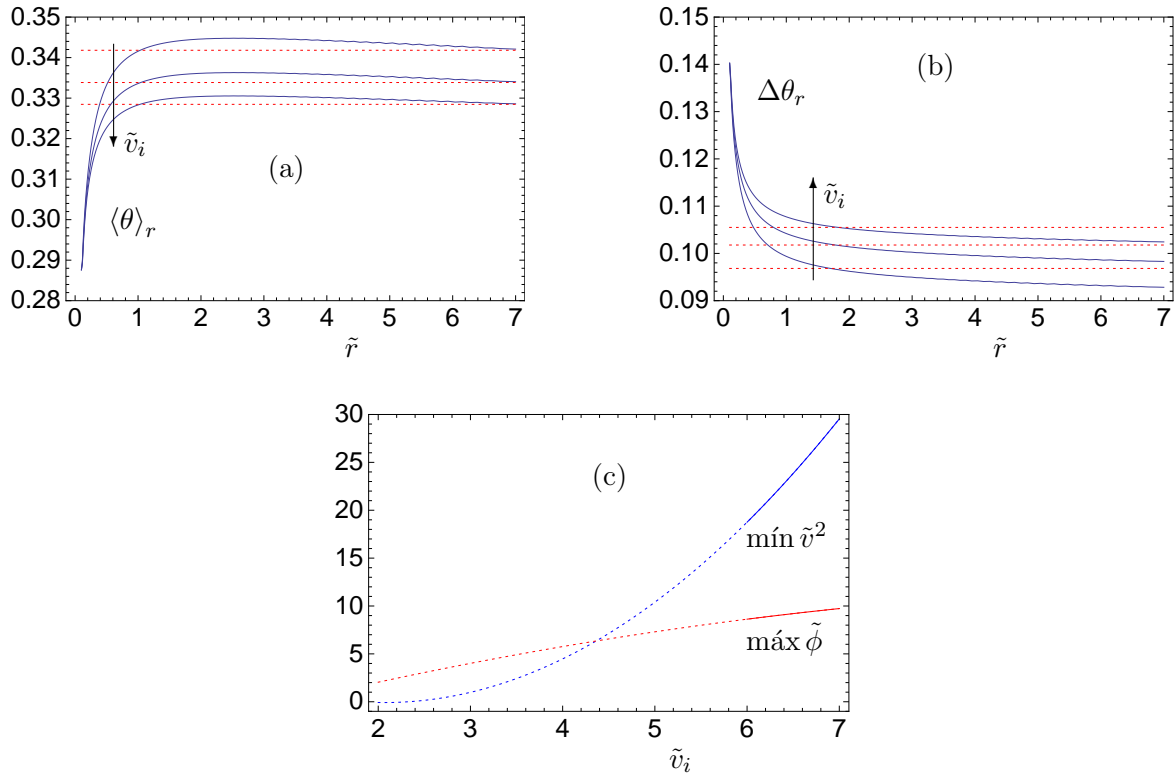


Figura 4.10: Simulaciones correspondientes a  $\tilde{r}_0 = 0,1$  y  $\tilde{r}_1 = 7$  para varios valores de la velocidad de inyección  $\tilde{v}_i$  en el rango  $6 \leq \tilde{v}_i \leq 7$ . El perfil de carga  $\tilde{n}_0(\theta)$  es el de la figura 4.5. En (a) y (b) se muestran la media  $\langle \theta \rangle_r$  y desviación estándar  $\Delta \theta_r$  correspondientes a la distribución de la carga emitida como función de  $\tilde{r}$  en el rango  $\tilde{r}_0 \leq \tilde{r} \leq \tilde{r}_1$  para tres valores de la velocidad de inyección:  $\tilde{v}_i = 6$ ,  $\tilde{v}_i = 6,5$  y  $\tilde{v}_i = 7$ . Las líneas punteadas en color rojo dan el correspondiente valor de  $\langle \theta \rangle_r$  y  $\Delta \theta_r$ . En (c) se muestra el valor máximo del potencial eléctrico,  $\tilde{\phi}$ , y el valor mínimo del cuadrado del módulo del campo de velocidades,  $\tilde{v}^2$ , como función de  $\tilde{v}_i$ .

(ver figura 4.10). Esto sugiere que debe existir un valor mínimo de la velocidad de inyección  $\tilde{v}_i$ , por debajo del cual la repulsión eléctrica es tan intensa que las gotas del spray “se dan la vuelta”, es decir, no se puede emitir más carga. Desafortunadamente, este valor mínimo de la velocidad de inyección no pudo calcularse de una forma directa. La razón es que, por debajo del valor  $\tilde{v}_i = 5,8$ , la obtención de convergencia con cotas de error  $\epsilon = 10^{-4}$  o menores al hacer correr el algoritmo requería aumentar enormemente la resolución, impidiendo los cálculos en tiempos razonables. No obstante, este valor se ha estimado de una forma aproximada considerando las simulaciones realizadas para un conjunto de valores de la velocidad de inyección en el rango  $6 \leq \tilde{v}_i \leq 7$  y calculando, por extrapolación, el valor de la velocidad  $\tilde{v}_i$  para el cual el valor del mínimo absoluto de la velocidad del spray  $\tilde{v}$  es nulo. Con esta estrategia, se estima que el valor mínimo de la velocidad de inyección para el cual se puede emitir carga está dado por  $\tilde{v}_i \approx 2,3$  (ver figura 4.10). Es evidente que este valor sólo puede entenderse como una estimación, dada la distancia que lo separa con el intervalo de valores de  $\tilde{v}_i$  donde se han hecho simulaciones. Es más, la existencia o no de una velocidad de inyección mínima (no nula) para un valor fijado del radio de la superficie de emisión  $\tilde{r}_0$  y un perfil de carga prescrito sobre dicha superficie  $\tilde{n}_0(\theta)$  y,

en su caso, el cálculo de este valor mínimo es una cuestión que debe abordarse de una forma directa por medio de las correspondientes simulaciones. En cualquier caso, esta cuestión escapa de los objetivos de este trabajo y no será considerada (recordar capítulo 2 y ver debajo).

El resultado de “haz hueco” es, sin duda, el hecho más destacable que se ha observado en todas las simulaciones realizadas. En algunos experimentos en régimen iónico y en vacío parecen observarse distribuciones de carga que parecen huecas en el centro [44]. No obstante, esta evidencia de “haz hueco” es sólo indirecta y hay experimentos [38] que muestran haces con máximo de carga en el eje de simetría. En este sentido, sería interesante estudiar cómo dependen los resultados obtenidos en función del perfil de densidad de carga impuesto en el casquete de emisión, dado por la función  $\tilde{n}_0(\theta)$ . En cualquier caso, es mucho mejor opción resolver el problema en sentido estricto (ver sección 3.3), esto es, sin redondear el cono y asumiendo que la carga es emitida desde la superficie lateral con velocidad de inyección igual a cero. Como ya se ha comentado, la hipótesis de asumir una superficie de emisión esférica, sobre la cual se prescribe un determinado perfil de carga, es una simplificación que se hace en el problema con objeto de hacerlo apto para el tratamiento numérico. Recordemos que la resolución estricta del problema requiere resolver la singularidad de la densidad de carga espacial existente en la superficie de emisión antes de iniciar la correspondiente integración numérica, la cual puede hacerse, en particular, con el mismo método numérico que el descrito para el caso del cono redondeado. Precisamente, a esta cuestión dedicaremos el resto del trabajo. Como veremos, el resultado de “haz hueco” encontrado para el problema del cono redondeado se volverá a obtener al resolver el problema en sentido estricto.





# Capítulo 5

## Aplicación del SEM para la dispersión de carga cerca del vértice de un cono

### 5.1. Planteamiento del problema singular

En este capítulo nos proponemos describir, por medio del SEM, tanto la emisión por efecto de campo como la emisión limitada por carga espacial en un cono de Taylor. Como se verá, obtendremos resultados satisfactorios sólo para la emisión por efecto de campo, mientras que la emisión limitada por carga espacial no puede describirse dentro del SEM considerado en este trabajo, por los motivos que se detallan en la sección 5.6.

El fenómeno de vaporización iónica desde conos de Taylor en vacío (sección 3.3) es un problema de emisión por efecto de campo. En nuestro caso (ver figura 3.7), asumimos idealmente que la interfase líquida tiene una forma cónica perfecta (con semiángulo vertical  $\alpha$ ) y, por hipótesis, suponemos que los iones son inyectados al vacío con velocidad cero desde una pequeña parte de la interfase próxima al vértice ( $r \leq r_s$ ). De esta forma, la superficie de emisión es la definida en coordenadas esféricas por  $r \leq r_s$ ,  $\theta = \pi - \alpha$  y sobre dicha superficie obtenemos necesariamente que la densidad de carga espacial se hace infinita. Recordemos, también, que ambos parámetros (la longitud  $r_s$  y el ángulo  $\alpha$ ) deben ser obtenidos como parte de la solución del problema.

Debemos recordar que la dificultad matemática del problema propuesto obliga a resolverlo por medio de procedimientos numéricos. En este sentido, puede usarse el mismo método numérico empleado para resolver el problema aproximado del cono redondeado (ver sección 4.3). No obstante, recordemos también que la resolución numérica del problema requiere resolver, primero, la singularidad de la densidad de carga espacial en la superficie de emisión y esto, a su vez, implica conocer la forma asintótica de los tres campos escalares  $\psi$ ,  $\phi$  y  $n$  cerca del vértice del cono (parte singular del problema o, abreviadamente, problema singular). Esta forma asintótica de los campos puede usarse, después, para iniciar la correspondiente integración numérica del problema, lo que constituye la parte regular del problema (parte regular del problema o problema regular). En este capítulo nos centraremos en el problema singular [32], esto es, nuestro objetivo consiste en analizar el comportamiento asintótico del sistema en la inmediata vecindad del vértice del cono de Taylor. La cuestión relativa al problema regular se deja para el capítulo 7.

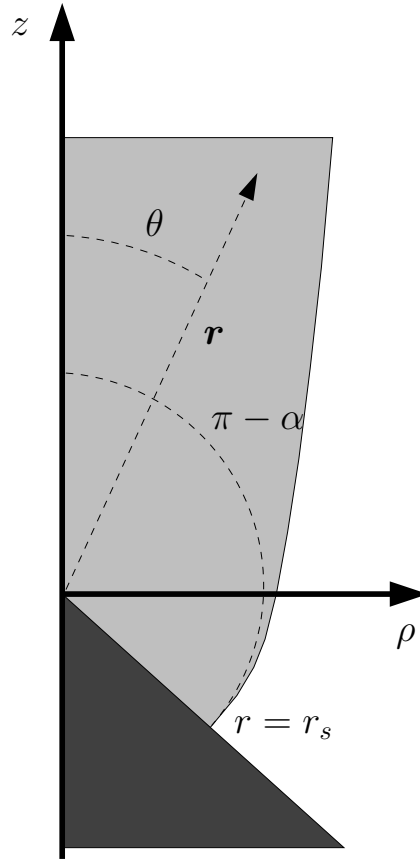


Figura 5.1: Vaporización de iones en un cono de Taylor.

La figura 5.1 muestra un detalle del problema cerca del vértice del cono, para valores de  $r$  del orden de la longitud de la generatriz de la superficie de emisión,  $r_s$ . Debemos recordar que en la región próxima al vértice los efectos de carga espacial son dominantes. En particular, del análisis deduciremos que tanto el valor del ángulo  $\alpha$  como el valor de la longitud  $r_s$  están afectados por efectos de carga espacial. Por otra parte, la inmensa simetría que presenta el problema en la región dominada por efectos de carga espacial, unida al hecho de la ausencia de una longitud geométrica característica, sugiere que el electrospray en dicha región pueda describirse en coordenadas esféricas por medio de soluciones separables en parte radial y en parte angular, de forma que la dependencia radial esté dada por leyes de potencias para los tres campos escalares ( $\psi$ ,  $\phi$  y  $n$ ). En consecuencia, estas soluciones separables o autosemejantes en coordenadas esféricas del SEM (también llamadas soluciones cónicas) se usarán para describir la singularidad presente en el problema.

El punto de partida es, entonces, nuestro SEM escrito en coordenadas esféricas. Las ecuaciones adimensionales del SEM (3.97)-(3.99) en las coordenadas esféricas adimensionales  $(\tilde{r}, \theta)$  se escriben en la forma

$$\left(\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tilde{r}}\right)^2 + \frac{1}{\tilde{r}^2} \left(\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \theta}\right)^2 + 2\tilde{\phi} = 0, \tag{5.1}$$

$$\frac{1}{\tilde{r}^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{r}} \left( \tilde{r}^2 \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial \tilde{r}} \right) + \frac{1}{\tilde{r}^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial \theta} \right) = -\tilde{n}, \quad (5.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{r}} \left( \tilde{r}^2 \tilde{n} \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tilde{r}} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \tilde{n} \sin \theta \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \theta} \right) = 0, \quad (5.3)$$

y deben considerarse en la región  $\tilde{r} > 0$ ,  $0 < \theta < \pi - \alpha$ . Recordemos que las ecuaciones anteriores deben complementarse con las condiciones de contorno en  $\theta = \pi - \alpha$  (ecuación (3.100)):

$$\tilde{\phi} = 0, \quad \frac{1}{2} \left( \frac{1}{\tilde{r}} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial \theta} \right)^2 = \frac{\cot \alpha}{\tilde{r}}, \quad \tilde{\psi} = 0, \quad (5.4)$$

las condiciones de regularidad en  $\theta = 0$  (ecuación (3.101)):

$$\frac{\partial \tilde{n}}{\partial \theta} = 0, \quad \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial \theta} = 0, \quad \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \theta} = 0, \quad (5.5)$$

y la condición de conservación de la carga (ecuación (3.102)):

$$2\pi \int_0^{\pi-\alpha} \tilde{n}(\tilde{r}_s, \theta) \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tilde{r}} \Big|_{(\tilde{r}_s, \theta)} \tilde{r}_s^2 \sin \theta \, d\theta = 1. \quad (5.6)$$

La resolución del problema singular pasa, según lo dicho, por construir soluciones autosemejantes de las ecuaciones anteriores (5.1)-(5.6). El análisis matemático de las tales soluciones constituye, entonces, nuestro primer objetivo y será realizado con todo detalle a continuación (ver secciones 5.2 y 5.3).

Un resultado inmediato que se obtiene de la condición de equilibrio mecánico es que el campo eléctrico sobre la superficie de emisión no se anula en ningún caso. Esto implica que la vaporización de iones desde una interfase líquida cónica es un tipo de emisión que no está limitado por distribución espacial de carga. Mostraremos que la emisión en el límite de campo eléctrico externo nulo sólo puede producirse físicamente cuando la carga eléctrica es emitida desde el propio vértice del cono. Este caso límite merece, por tanto, un tratamiento independiente y será analizado, con detalle, en la última parte del capítulo (ver sección 5.6).

## 5.2. Soluciones autosemejantes

Como ya se ha comentado, debido a la alta simetría del problema en la estricta vecindad del vértice del cono, esperamos que el electrospray en la región de carga espacial se pueda describir por leyes de potencias para la dependencia radial de los tres campos escalares. Así, buscaremos soluciones separables de las ecuaciones adimensionales del SEM en coordenadas esféricas (ecuaciones (5.1)-(5.3)) asumiendo que la dependencia radial de  $\psi$ ,  $\phi$  y  $n$  esté dada por las correspondientes leyes de potencias, mientras que la dependencia angular esté dada por funciones  $F(\cos \theta)$ ,  $p(\cos \theta)$  y  $N(\cos \theta)$ , en la forma:

$$\tilde{\psi} = 2^{1/2} \tilde{r}^m F(x), \quad (5.7)$$

Potencial de velocidad	$\psi = \psi_{\text{sc}} 2^{1/2} \tilde{r}^m F(\cos \theta)$
Potencial eléctrico	$\phi = -\phi_{\text{sc}} \tilde{r}^{2m-2} p(\cos \theta)$
Densidad numérica	$n = n_{\text{sc}} \tilde{r}^{2m-4} N(\cos \theta)$
Campo de velocidades	$\mathbf{v} = \nabla \psi =$ $v_{\text{sc}} 2^{1/2} \tilde{r}^{m-1} \left[ m F(\cos \theta) \mathbf{u}_r + \frac{d}{d\theta} F(\cos \theta) \mathbf{u}_\theta \right]$
Campo eléctrico	$\mathbf{E} = -\nabla \phi =$ $E_{\text{sc}} \tilde{r}^{2m-3} \left[ 2(m-1)p(\cos \theta) \mathbf{u}_r + \frac{d}{d\theta} p(\cos \theta) \mathbf{u}_\theta \right]$
Densidad de corriente	$\mathbf{J} = en\mathbf{v} =$ $\frac{I}{\ell^2} 2^{1/2} \tilde{r}^{3m-5} N(\cos \theta) \left[ m F(\cos \theta) \mathbf{u}_r + \frac{d}{d\theta} F(\cos \theta) \mathbf{u}_\theta \right]$

Tabla 5.1: Soluciones separables para los campos  $\psi$ ,  $\phi$ ,  $n$ ,  $\mathbf{v}$ ,  $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{J}$  asumiendo una dependencia con forma de ley de potencias para la variable radial. Aquí  $\mathbf{u}_r$  y  $\mathbf{u}_\theta$  son los vectores unitarios correspondientes a las coordenadas esféricas  $r$  y  $\theta$ .

$$\tilde{\phi} = -\tilde{r}^{2m-2} p(x), \quad (5.8)$$

$$\tilde{n} = \tilde{r}^{2m-4} N(x), \quad (5.9)$$

donde  $x = \cos \theta$  y el exponente  $m$  es un número real. La tabla 5.1 muestra la correspondiente expresión matemática de los campos, para cualquier valor del exponente  $m$ , de acuerdo a la hipótesis de autosemejanza.

### 5.2.1. Sistema angular

El sistema de EDOs que determina las funciones angulares  $F$ ,  $p$  y  $N$  se obtiene introduciendo las ecuaciones (5.7)-(5.9) en las ecuaciones (5.1)-(5.3). Se encuentra entonces

$$m^2 F^2 + (1-x^2) \left( \frac{dF}{dx} \right)^2 = p, \quad (5.10)$$

$$(2m-2)(2m-1)p + \frac{d}{dx} \left( (1-x^2) \frac{dp}{dx} \right) = N, \quad (5.11)$$

$$3m(m-1)NF + \frac{d}{dx} \left( (1-x^2) N \frac{dF}{dx} \right) = 0, \quad (5.12)$$

como fácilmente se puede comprobar. Notar que puesto que la ecuación (5.10) permite el cálculo de  $F'$  a partir de  $F$  y  $p$  (ecuación (5.18)), llevando este resultado a la ecuación (5.12) encontramos que esta última se reduce a una ecuación de primer orden para  $F$ . En total, el anterior sistema angular es, en realidad, de segundo orden para  $p$  y de primer orden para  $F$  y  $N$ .

Considerando las condiciones de contorno en la superficie líquida (es decir, en  $x = x_\alpha$  donde  $x_\alpha = \cos(\pi - \alpha) = -\cos \alpha$ ) e introduciendo las ecuaciones (5.7)-(5.9) en la ecuación (5.4), encontramos

$$p(x_\alpha) = 0, \quad \tilde{r}^{4m-5} (p'(x_\alpha))^2 = \frac{2 \cot \alpha}{1 - x_\alpha^2}, \quad F(x_\alpha) = 0. \quad (5.13)$$

El resultado anterior implica que el único valor posible del exponente  $m$ , compatible con la condición de equilibrio mecánico en la superficie del cono (ecuación (3.92)), es

$$m = 5/4, \quad (5.14)$$

en cuyo caso  $\phi \propto r^{1/2}$ ,  $n \propto r^{-3/2}$ ,  $\mathbf{v} \propto r^{1/4}$ ,  $\mathbf{E} \propto r^{-1/2}$ ,  $\mathbf{J} \propto r^{-5/4}$ . No obstante, previendo futuras aplicaciones del presente SEM a otros sistemas de interés, donde la condición de equilibrio mecánico no se aplica, parte de nuestro análisis se ha realizado para valores arbitrarios del exponente  $m$ , especialmente en aquellos casos en los que esta generalización no supone ninguna dificultad adicional.

Análogamente, las condiciones de regularidad sobre el semieje  $\theta = 0$  (ecuación (5.5)) llevan a

$$\lim_{x \rightarrow 1^-} \left[ (1 - x^2)^{1/2} N' \right] = 0, \quad \lim_{x \rightarrow 1^-} \left[ (1 - x^2)^{1/2} p' \right] = 0, \quad \lim_{x \rightarrow 1^-} \left[ (1 - x^2)^{1/2} F' \right] = 0. \quad (5.15)$$

Las condiciones anteriores (ecuación (5.15)) implican la condición de finitud [10], es decir, las funciones angulares  $F(x)$ ,  $p(x)$  y  $N(x)$  tienen límite lateral finito por la izquierda en  $x = 1$ , lo que asegura la continuidad de las tres funciones angulares en  $x = 1$ .

Finalmente, la versión autosemejante de la condición de conservación de la carga eléctrica (ecuación (5.6)) está dada por

$$2^{3/2} \pi m \tilde{r}_s^{3(m-1)} \int_{x_\alpha}^1 N F \, dx = 1, \quad (5.16)$$

la cual determina el valor de  $\tilde{r}_s$  como función de  $\alpha$ . Recordando que la integral de la ecuación (5.16) se puede computar por medio de una integración directa de la ecuación (5.12), el radio de la superficie de emisión está dado finalmente por

$$\tilde{r}_s^{3(m-1)} = \frac{3(m-1)}{2^{3/2} \pi (L(x_\alpha) - L(1))}, \quad (5.17)$$

donde hemos definido  $L(x) \equiv (1 - x^2) N(x) F'(x)$  (ver, también, ecuación (5.18)).

### 5.2.2. Propiedades generales del sistema angular

Es fácil deducir las siguientes propiedades generales del sistema angular:

1. La ecuación (5.10) implica que  $p(x)$  es una función no negativa. Como consecuencia, el signo de la componente radial del campo eléctrico es invariable.
2. Las ecuaciones (5.10)-(5.12) implican que si  $F'(x) = 0$  entonces  $N(x) = 0$ . Así, un campo de velocidades con uniformidad angular lleva a la solución trivial para  $N(x)$ .

3. Puesto que el SEM (ecuaciones (3.97)-(3.102)) es invariante bajo las sustituciones  $\psi \rightarrow -\psi$ ,  $I \rightarrow -I$ , el sistema angular es invariante bajo la sustitución  $F(x) \rightarrow -F(x)$ . Por otra parte, de la ecuación (5.10) encontramos

$$F'(x) = \pm \left( \frac{p(x) - m^2 F^2(x)}{1 - x^2} \right)^{1/2}. \quad (5.18)$$

Así, sólo un signo (+ o -) puede ser elegido y entonces, una vez hecha la elección, el signo de  $F'(x)$  es invariable. Un corolario de esta propiedad es que el signo de la componente angular del campo de velocidades también es invariable.

4. El sistema angular tiene dos clases de puntos singulares, los cuales serán analizados con detalle en la sección 5.3. El primer tipo está dado por los puntos que definen el eje  $x = \pm 1$  (ver sección 5.3.1). El segundo tipo de puntos singulares se encuentra en puntos donde el coeficiente de  $N'$  en la ecuación (5.12) se anula, es decir, los puntos  $x = x_\beta$  definidos por la condición  $F'(x_\beta) = 0$  (con  $-1 < x_\beta < 1$ ). En consecuencia, si la carga eléctrica se emite desde una superficie  $x = x_\beta$  con  $F'(x_\beta) = 0$ , entonces la función  $N(x)$  se hace infinita en dicha superficie. El comportamiento asintótico cerca de la segunda clase de puntos singulares se analiza en la sección 5.3.2.

5. El signo de la función  $N(x)$  es invariable, lo que era esperable. En efecto, después de una simple integración en la ecuación (5.12) sobre un intervalo donde  $F'(x) \neq 0$ , se encuentra que

$$N(x) = N(x_0) \cdot \frac{(1 - x_0^2) F'(x_0)}{(1 - x^2) F'(x)} \cdot \exp \left[ - \int_{x_0}^x \frac{3m(m-1)F(t)}{(1-t^2) F'(t)} dt \right] \quad (5.19)$$

donde  $x_0$  es un punto regular arbitrario del sistema.

6. Es interesante notar que en los casos  $m = 0, 1$  la única solución que cumple las condiciones de regularidad en  $\theta = 0$  es la solución trivial para  $N(x)$ . En efecto, para  $m = 0, 1$ , de la ecuación (5.12) encontramos  $(1 - x^2) NF' = \text{constante}$ . Este resultado, junto con las condiciones de regularidad en  $x = 1$ , lleva a  $N(x) F'(x) = 0$ . Así, tenemos  $N(x) = 0$  ó  $F'(x) = \text{constante}$ . Esta última posibilidad lleva a  $p(x) = 0$  para  $m = 0$  y  $p(x) = \text{constante}$  para  $m = 1$ . En ambos casos, por medio de la ecuación (5.11) se encuentra  $N(x) = 0$ .

### 5.3. Análisis asintótico del sistema angular cerca de los puntos singulares

Puesto que el sistema angular (ecuaciones (5.10)-(5.12)) involucra ecuaciones no lineales, no es posible la obtención de una solución general analítica, excepto en unos pocos casos sencillos (ver apéndice D). Entonces, el sistema debe ser integrado numéricamente. En este sentido, es frecuente que el punto donde se inicia la integración numérica del sistema sea un punto singular. En tal caso, se necesita conocer el comportamiento asintótico del sistema cerca del correspondiente punto singular con objeto de iniciar la integración numérica.

A continuación, analizaremos con detalle el comportamiento asintótico de las funciones angulares en la vecindad de los dos tipos de puntos singulares. En particular, nuestro principal

objetivo es la obtención de aquellos comportamientos asintóticos que llevan a soluciones no triviales (es decir, con  $N(x) > 0$ ), y que además sean físicamente admisibles. Puesto que no añade dificultad adicional, el presente análisis se realizará para valores reales arbitrarios del exponente  $m$ . De esta forma, este análisis asintótico permitirá futuras aplicaciones del presente modelo a otros sistemas de interés (diodos cónicos, líneas electrizadas, problemas de recirculación de carga, etc), actualmente en marcha. Los resultados derivados del presente análisis serán usados más adelante, cuando calculemos la solución numérica de las ecuaciones (5.10)-(5.12) para el caso de interés de nuestro problema (es decir,  $m = 5/4$ ).

### 5.3.1. Comportamiento asintótico en $x = \pm 1$

Nos centraremos sólo en el comportamiento asintótico cerca del semieje *positivo*, es decir, en el límite  $x \rightarrow 1_-$ . En caso que fuera necesario, el presente análisis también permite el cálculo del comportamiento asintótico cerca del semieje *negativo* ( $x = -1$ ), por medio de la sustitución  $x \rightarrow -x$ . Así, supongamos que en una pequeña vecindad del semieje positivo (es decir, cuando  $x \rightarrow 1_-$ ), las funciones angulares  $F$ ,  $p$ ,  $N$  se puedan aproximar por

$$F(x) \simeq F_1 + F_0(1-x)^{\lambda_F}, \quad (5.20)$$

$$p(x) \simeq p_1 + p_0(1-x)^{\lambda_p}, \quad (5.21)$$

$$N(x) \simeq N_1(1-x)^{\lambda_N}. \quad (5.22)$$

Introduciendo los desarrollos anteriores en las ecuaciones (5.10)-(5.12), y considerando los términos de mayor orden en el límite  $x \rightarrow 1_-$ , obtenemos el comportamiento asintótico cerca del semieje positivo  $x = 1$ . Los resultados se resumen en la tabla 5.2.

En este sentido, es fácil comprobar que los resultados dependen de si  $\lambda_F > 1$ ,  $\lambda_F < 1$  ó  $\lambda_F = 1$ , y sólo se pueden encontrar comportamientos asintóticos consistentes para  $\lambda_F \leq 1$ . El caso  $\lambda_F < 1$  lleva a  $\lambda_F = 2/3$ ,  $\lambda_p = 1/3$  y  $\lambda_N = -2/3$ , el cual denominamos *Opción 1A*. Por otra parte, el caso  $\lambda_F = 1$  lleva a  $\lambda_p = 1$  y  $\lambda_N \geq 0$ . Entonces, hay dos posibles opciones dependiendo de si  $\lambda_N = 0$  (denominada *Opción 1B*) ó  $\lambda_N > 0$  (denominada *Opción 1C*). Considerando el signo de  $F(x)$ , se encuentran en todos los casos dos posibles soluciones que difieren por un factor  $-1$ , como podía esperarse. Esto habrá sido notado en la tabla 5.2 a través del factor  $s = \pm 1$ . Además, como resultado común en todas las opciones, encontramos que el límite

$$L_1 \equiv \lim_{x \rightarrow 1_-} (1-x^2) N(x) F'(x) \quad (5.23)$$

es siempre finito

$$L_1 = -2\lambda_F N_1 F_0 \lim_{x \rightarrow 1_-} (1-x)^{\lambda_N + \lambda_F} < \infty. \quad (5.24)$$

#### **Opción 1A** ( $\lambda_F = 2/3$ , $\lambda_p = 1/3$ , $\lambda_N = -2/3$ )

Esta opción es válida para valores arbitrarios de  $m$  distintos de  $m = 0$ . En este caso hay dos coeficientes independientes:  $p_1 \geq 0$  y  $N_1 > 0$  ( $N_1 = 0$  llevaría a la solución trivial para  $N(x)$ ). Por otra parte, encontramos dos valores de  $F_0$ , los cuales sólo difieren por un factor  $-1$ . Así, hay dos posibles comportamientos asintóticos que dependen del signo de  $F_0$ , los cuales serán



Comportamiento asintótico en el semieje positivo $x = 1$		
Forma general	$\lim_{x \rightarrow 1_-} (1-x^2) N(x) F'(x)$	valores de $m$
$F(x) \simeq F_1 + F_0(1-x)^{\lambda_F}$ $p(x) \simeq p_1 + p_0(1-x)^{\lambda_p}$ $N(x) \simeq N_1(1-x)^{\lambda_N}$	$-2\lambda_F N_1 F_0 (0_+)^{\lambda_N + \lambda_F}$	$m \neq 0, 1$
Opción 1A ( $\lambda_F = 2/3, \lambda_p = 1/3, \lambda_N = -2/3$ )	$p_1 \geq 0, N_1 > 0$	<i>físicamente inadmisibile</i>
$F(x) \simeq s \left[ \frac{p_1^{1/2}}{m} \pm \frac{9}{4} N_1^{1/2} (1-x)^{2/3} \right]$ $p(x) \simeq p_1 + \frac{9}{2} N_1 (1-x)^{1/3}$ $N(x) \simeq N_1 (1-x)^{-2/3}$	$L_1 = \mp 3s N_1^{3/2}$	$m \neq 0, 1$
Opción 1B ( $\lambda_F = \lambda_p = 1, \lambda_N = 0$ )	$p_1 > 0$	<i>físicamente aceptable</i>
$F(x) \simeq s p_1^{1/2} \left[ \frac{1}{m} - \frac{3}{2} (m-1) (1-x) \right]$ $p(x) \simeq p_1 + \frac{3}{2} (m^2 - 4m + 3) p_1 (1-x)$ $N(x) \simeq (7m^2 - 18m + 11) p_1$	$L_1 = 0$	$m \in (-\infty, 0)$ $\cup (0, 1)$ $\cup (\frac{11}{7}, +\infty)$
<b>Opción 1C</b> ( $\lambda_F = \lambda_p = 1, \lambda_N > 0$ )	$p_1 > 0, N_1 > 0$	<i>físicamente aceptable</i>
$F(x) \simeq s p_1^{1/2} \left[ \frac{1}{m} + \frac{-m \pm \sqrt{-3m^2 + 6m - 2}}{2} (1-x) \right]$ $p(x) \simeq p_1 + (-2m^2 + 3m - 1) p_1 (1-x)$ $N(x) \simeq N_1 (1-x)^{\lambda_N}$	$L_1 = 0$	$m \in (\frac{1}{2}, 1) \cup (1, 1 + \frac{\sqrt{3}}{3}]$ $(\lambda_N = \lambda_{N+}) \circ m \in$ $(\frac{11}{7}, 1 + \frac{\sqrt{3}}{3}] (\lambda_N = \lambda_{N-})$

Tabla 5.2: Comportamiento asintótico en el límite  $x \rightarrow 1_-$  que lleva a soluciones no triviales para  $N(x)$  (es decir,  $N(x) > 0$ ). En todos los casos,  $s$  puede tomar los valores  $s = \pm 1$ . Los valores  $m = 0, 1$  llevan a  $N(x) = 0$  y entonces deben ser descartados. Opción 1C es la única opción físicamente aceptable compatible con el valor  $m = 5/4$ . Dependiendo del valor de  $m$ , hay dos posibilidades para el exponente  $\lambda_N$  en Opción1C (es decir,  $\lambda_{N\pm}$ ), las cuales están dadas por la ecuación (5.28).

denominados Opción 1A(+) (eligiendo el signo (+)) y Opción 1A(-) (eligiendo el signo (-)). Finalmente, el límite  $L_1$  es no nulo en este caso.

Por lo que se refiere a la regularidad de las soluciones, en este caso se encuentra que  $N(x)$  es la única función no acotada en  $x = 1$ , aunque la divergencia es integrable con exponente  $-2/3$ . No obstante, aunque en este caso  $p(x)$  está acotada en el eje, no cumple la condición de regularidad en  $x = 1$  (ver ecuación (5.15)). Así,  $F(x)$  es la única función que cumple la condición de regularidad en  $x = 1$  en la Opción 1A. En consecuencia, la Opción 1A es una posibilidad físicamente inadmisibile en nuestro problema.

### Opción 1B ( $\lambda_F = \lambda_p = 1$ , $\lambda_N = 0$ )

En este caso hay sólo un coeficiente independiente:  $p_1 > 0$ , el cual debe ser no nulo con el fin de obtener soluciones no triviales para  $N(x)$ . En cuanto a la regularidad de las soluciones, las tres funciones angulares están acotadas en  $x = 1$ , y cumplen la condición de regularidad en  $x = 1$ . En consecuencia, el límite  $L_1$  es nulo en este caso. Es más, se puede demostrar (ver apéndice D) que esta opción corresponde al primer término del desarrollo en serie de Taylor en torno a  $x = 1$  de  $F$ ,  $p$ ,  $N$  (es decir, la Opción 1B lleva a soluciones analíticas en  $x = 1$  para las funciones angulares).

Los valores del exponente  $m$  compatibles con esta opción son los siguientes. Por una parte, el caso  $m = 0$  debe ser descartado. Por otra parte, el intervalo para  $m$  se puede reducir aún más considerando el valor de  $N(x)$  en  $x = 1$  (es decir,  $N(1) = 11 - 18m + 7m^2$ ). Así, para  $1 < m < 11/7$  encontramos  $N(1) < 0$ , lo cual no tiene sentido físico. Finalmente los valores  $m = 1$  y  $m = 11/7$  llevan a la solución trivial para  $N(x)$ . En resumen, en la Opción 1B obtenemos soluciones no triviales y físicamente aceptables para valores de  $m$  en el intervalo

$$m \in (-\infty, 0) \cup (0, 1) \cup \left(\frac{11}{7}, +\infty\right). \quad (5.25)$$

Para valores de  $m$  en este rango la Opción 1B es una posibilidad físicamente admisible. No obstante, este intervalo no contiene el valor de  $m$  de interés en nuestro problema ( $m = 5/4$ ).

### Opción 1C ( $\lambda_F = \lambda_p = 1$ , $\lambda_N > 0$ )

En este caso hay dos coeficientes independientes,  $p_1 > 0$  y  $N_1 > 0$ , los cuales deben ser distintos de cero a fin de obtener soluciones no triviales para  $N(x)$ . El rango de valores del exponente  $m$  compatible con la Opción 1C está dado por

$$m \in \left(\frac{1}{2}, 1\right) \cup \left(1, 1 + \frac{\sqrt{3}}{3}\right], \quad (5.26)$$

denominada Opción 1C(+), junto con

$$m \in \left(\frac{11}{7}, 1 + \frac{\sqrt{3}}{3}\right]. \quad (5.27)$$

denominada Opción 1C(-). El valor del exponente  $\lambda_N$  en la Opción 1C está dado por

$$\lambda_{N\pm} = \frac{3(1-m)}{-m \pm \sqrt{-3m^2 + 6m - 2}} - 1, \quad (5.28)$$

donde el signo + se aplica a la Opción1C(+) y el signo - se aplica a la Opción1C(-). Como se puede comprobar fácilmente, los valores de  $m$  fuera de los intervalos anteriores llevan a exponentes  $\lambda_N$  que son imaginarios o negativos, y entonces deben ser descartados.

En ambos casos las tres funciones angulares están acotadas en  $x = 1$  (en particular  $N(1) = 0$ ) y el límite  $L_1$  es cero. Así, las Opciones 1C(+) y 1C(-) son físicamente aceptables. En particular, la Opción 1C(+) es la única opción físicamente aceptable con  $N(x) \neq 0$  que es compatible con el valor  $m = 5/4$ , de interés en el problema presente.

### 5.3.2. Comportamiento asintótico en $x = x_\beta$ , con $F'(x_\beta) = 0$ y $-1 < x_\beta < 1$

Consideremos ahora los puntos singulares definidos por la condición  $F'(x_\beta) = 0$  (con  $-1 < x_\beta < 1$ ). En particular, nos centraremos en el comportamiento asintótico “por la derecha”, es decir, en el límite  $x \rightarrow x_{\beta+}$ . Así, supondremos que en una pequeña vecindad de  $x_\beta$ , con  $x > x_\beta$ , las funciones angulares  $F$ ,  $p$ ,  $N$  se pueden aproximar por

$$F(x) \simeq F_\beta + F_0(x - x_\beta)^{\lambda_F}, \quad (5.29)$$

$$p(x) \simeq p_\beta + \dot{p}_\beta(x - x_\beta) + p_0(x - x_\beta)^{\lambda_p}, \quad (5.30)$$

$$N(x) \simeq N_\beta(x - x_\beta)^{\lambda_N}, \quad (5.31)$$

con  $F_0 \neq 0$ ,  $\lambda_F > 1$  y  $N_\beta > 0$  ( $N_\beta = 0$  llevaría a  $N(x) = 0$ ). El correspondiente comportamiento asintótico “por la izquierda” (es decir, en el límite  $x \rightarrow x_{\beta-}$ ) se puede obtener fácilmente de los presentes resultados por medio de la sustitución  $x - x_\beta \rightarrow x_\beta - x$ , con la sustitución adicional  $\dot{p}_\beta \rightarrow -\dot{p}_\beta$  en la Opción  $\beta$ B (ver debajo).

Introduciendo los desarrollos anteriores en las ecuaciones (5.10)-(5.12), y considerando los términos de mayor orden en el límite  $x \rightarrow x_{\beta+}$ , se obtiene el comportamiento asintótico “por la derecha” próximo a  $x = x_\beta$ . Los resultados se resumen en la tabla 5.3.

En este caso se puede comprobar fácilmente que los resultados dependen de si  $\lambda_F > 2$ ,  $\lambda_F < 2$  o  $\lambda_F = 2$ , y además, sólo se pueden encontrar comportamientos asintóticos consistentes para  $1 < \lambda_F \leq 2$  (ver tabla 5.3). En el caso  $1 < \lambda_F < 2$  hay dos posibles comportamientos dependiendo de si  $\dot{p}_\beta = 0$ , el cual lleva a  $\lambda_F = 5/3$ ,  $\lambda_p = 4/3$  y  $\lambda_N = -2/3$  (Opción  $\beta$ A); o  $\dot{p}_\beta > 0$ , el cual lleva a  $\lambda_F = 3/2$ ,  $\lambda_p = 3/2$  y  $\lambda_N = -1/2$  (Opción  $\beta$ B). En el caso  $\lambda_F = 2$  encontramos  $\dot{p}_\beta = 0$ ,  $\lambda_p = 2$  y  $\lambda_N \geq 0$ . Así, en este caso se encuentran dos posibilidades dependiendo de si  $\lambda_N = 0$  (Opción  $\beta$ C) o  $\lambda_N > 0$  (Opción  $\beta$ D). Además, en todos los casos encontramos que el límite

$$L_\beta \equiv \lim_{x \rightarrow x_{\beta+}} (1 - x^2) N(x) F'(x) = \lambda_F N_\beta F_0 (1 - x_\beta^2) (0_+)^{\lambda_N + \lambda_F - 1} < \infty \quad (5.32)$$

es siempre finito.

Comportamiento asintótico en $x = x_\beta$ , con $F'(x_\beta) = 0$ y $-1 < x_\beta < 1$		
Forma general	$\lim_{x \rightarrow x_{\beta+}} (1-x^2) N(x) F'(x)$	valores de $m$
$F(x) \simeq F_\beta + F_0(x-x_\beta)^{\lambda_F}$ $p(x) \simeq p_\beta + \dot{p}_\beta(x-x_\beta) + p_0(x-x_\beta)^{\lambda_p}$ $N(x) \simeq N_\beta(x-x_\beta)^{\lambda_N}$	$\lambda_F N_\beta F_0 (1-x_\beta^2) (0_+)^{\lambda_N + \lambda_F - 1}$	$m \neq 0, 1$
Opción $\beta A$ ( $\lambda_F = 5/3$ , $\lambda_p = 4/3$ , $\lambda_N = -2/3$ y $\dot{p}_\beta = 0$ )	$p_\beta \geq 0$ , $N_\beta > 0$	
$F(x) \simeq s \left[ \frac{p_\beta^{1/2}}{m} \pm \frac{9 N_\beta^{1/2}}{10(1-x_\beta^2)} (x-x_\beta)^{5/3} \right]$ $p(x) \simeq p_\beta + \frac{9 N_\beta}{4(1-x_\beta^2)} (x-x_\beta)^{4/3}$ $N(x) \simeq N_\beta (x-x_\beta)^{-2/3}$	$L_\beta = \pm s \frac{3}{2} N_\beta^{3/2}$	$m \neq 0, 1$
Opción $\beta B$ ( $\lambda_F = \lambda_p = 3/2$ , $\lambda_N = -1/2$ y $\dot{p}_\beta > 0$ )	$p_\beta \geq 0$ , $N_\beta > 0$ , $\dot{p}_\beta > 0$	
$F(x) \simeq s \left[ \frac{p_\beta^{1/2}}{m} \pm \frac{2 \dot{p}_\beta^{1/2}}{3(1-x_\beta^2)^{1/2}} (x-x_\beta)^{3/2} \right]$ $p(x) \simeq p_\beta + \dot{p}_\beta(x-x_\beta) + \frac{4 N_\beta}{3(1-x_\beta^2)} (x-x_\beta)^{3/2}$ $N(x) \simeq N_\beta (x-x_\beta)^{-1/2}$	$L_\beta = \pm s N_\beta \dot{p}_\beta^{1/2} (1-x_\beta^2)^{1/2}$	$m \neq 0, 1$
Opción $\beta C$ ( $\lambda_F = \lambda_p = 2$ , $\lambda_N = 0$ y $\dot{p}_\beta = 0$ )	$p_\beta > 0$	
$F(x) \simeq s p_\beta^{1/2} \left[ \frac{1}{m} - \frac{3}{2} \frac{m-1}{1-x_\beta^2} (x-x_\beta)^2 \right]$ $p(x) \simeq p_\beta + (6m^2 - 15m + 9) \frac{p_\beta}{1-x_\beta^2} (x-x_\beta)^2$ $N(x) \simeq (16m^2 - 36m + 20) p_\beta$	$L_\beta = 0$	$m \in (-\infty, 0)$ $\cup (0, 1)$ $\cup (\frac{5}{4}, +\infty)$
Opción $\beta D$ ( $\lambda_F = \lambda_p = 2$ , $\lambda_N > 0$ y $\dot{p}_\beta = 0$ )	$p_\beta > 0$ , $N_\beta > 0$	
$F(x) \simeq s p_\beta^{1/2} \left[ \frac{1}{m} + \frac{-m \pm \sqrt{-7m^2 + 12m - 4}}{4(1-x_\beta^2)} (x-x_\beta)^2 \right]$ $p(x) \simeq p_\beta + (-2m^2 + 3m - 1) \frac{p_\beta}{1-x_\beta^2} (x-x_\beta)^2$ $N(x) \simeq N_\beta (x-x_\beta)^{\lambda_N}$	$L_\beta = 0$	$m \in (\frac{1}{2}, 1) \cup (1, \frac{6+2\sqrt{2}}{7}]$ $(\lambda_N = \lambda_{N+})$ o $m \in$ $(\frac{5}{4}, \frac{6+2\sqrt{2}}{7}]$ ( $\lambda_N = \lambda_{N-}$ )

Tabla 5.3: Comportamiento asintótico en el límite  $x \rightarrow x_{\beta+}$  que lleva a soluciones no triviales para  $N(x)$  (es decir,  $N(x) > 0$ ). En todos los casos  $s$  puede tomar los valores  $s = \pm 1$ . Los valores  $m = 0, 1$  llevan a  $N(x) = 0$  y deben ser descartados. Dependiendo del valor de  $m$ , hay dos posibilidades para el exponente  $\lambda_N$  en la Opción  $\beta D$  (es decir,  $\lambda_{N\pm}$ ), el cual está dado por la ecuación (5.36).

**Opción  $\beta\mathbf{A}$**  ( $\lambda_F = 5/3$ ,  $\lambda_p = 4/3$ ,  $\lambda_N = -2/3$  y  $\dot{p}_\beta = 0$ )

Esta opción es admisible para valores no nulos del esponente  $m$  pero, por lo demás, arbitrarios. En este caso hay dos coeficientes independientes,  $p_\beta \geq 0$  y  $N_\beta > 0$ , y se encuentran dos valores para  $F_0$ , lo cuales sólo difieren por un factor  $-1$ . La función  $N(x)$  no está acotada en  $x = x_\beta$ , pero la divergencia es integrable (con exponente  $-2/3$ ). Por otra parte, la función  $p(x)$  está acotada en  $x_\beta$ . Finalmente, el límite  $L_\beta$  es no nulo.

**Opción  $\beta\mathbf{B}$**  ( $\lambda_F = \lambda_p = 3/2$ ,  $\lambda_N = -1/2$  y  $\dot{p}_\beta > 0$ )

Esta opción es también aceptable para valores arbitrarios de  $m$  que sean distintos de cero. En este caso hay tres coeficientes independientes,  $p_\beta \geq 0$ ,  $\dot{p}_\beta > 0$  y  $N_\beta > 0$ . Como en la anterior opción, en este caso se encuentran también dos valores para  $F_0$  que difieren sólo por un factor  $-1$ . Por otra parte, en este caso la divergencia de  $N(x)$  en  $x = x_\beta$  es también integrable (con exponente  $-1/2$ ), la función  $p(x)$  está acotada, y el límite  $L_\beta$  es no nulo.

**Opción  $\beta\mathbf{C}$**  ( $\lambda_F = \lambda_p = 2$ ,  $\lambda_N = 0$  y  $\dot{p}_\beta = 0$ )

Esta opción es análoga a la Opción 1B, y entonces hay sólo un coeficiente independiente:  $p_\beta > 0$  ( $p_\beta = 0$  lleva a  $N(x) = 0$ ). Las tres funciones angulares están acotadas en  $x = x_\beta$ . Más aún,  $p'(x_\beta) = F'(x_\beta) = 0$  y el límite  $L_\beta$  es cero. Además de los casos  $m = 0, 1$ , el valor  $m = 5/4$  también lleva a la solución trivial  $N(x) = 0$  en este caso. El rango de valores de  $m$  compatible con esta opción se puede reducir más considerando la condición  $N(x_\beta) = 20 - 36m + 16m^2 > 0$ . Así, encontramos resultados no triviales y físicamente aceptables en la Opción  $\beta\mathbf{C}$  para exponentes  $m$  en el intervalo

$$m \in (-\infty, 0) \cup (0, 1) \cup \left(\frac{5}{4}, +\infty\right). \quad (5.33)$$

**Opción  $\beta\mathbf{D}$**  ( $\lambda_F = \lambda_p = 2$ ,  $\lambda_N > 0$  y  $\dot{p}_\beta = 0$ )

Esta opción es análoga a la Opción 1C, y entonces hay dos coeficientes independientes:  $p_\beta > 0$  y  $N_\beta > 0$ . El rango de valores de  $m$  compatible con la Opción  $\beta\mathbf{D}$  está dado por

$$m \in \left(\frac{1}{2}, 1\right) \cup \left(1, \frac{6 + 2\sqrt{2}}{7}\right], \quad (5.34)$$

denominada Opción $\beta\mathbf{D}(+)$ , junto con

$$m \in \left(\frac{5}{4}, \frac{6 + 2\sqrt{2}}{7}\right], \quad (5.35)$$

denominada Opción $\beta\mathbf{D}(-)$ . El valor del exponente  $\lambda_N$  en la Opción  $\beta\mathbf{D}$  está dado por

$$\lambda_{N\pm} = \frac{6(1 - m)}{-m \pm \sqrt{-7m^2 + 12m - 4}} - 1, \quad (5.36)$$

donde el signo  $+$  se aplica a la Opción  $\beta D(+)$  y el signo  $-$  se aplica a la Opción  $\beta D(-)$ . Los valores de  $m$  que se encuentran fuera de los intervalos anteriores llevan a resultados imaginarios o negativos para  $\lambda_N$ , y entonces deben ser descartados.

En ambos casos las tres funciones angulares están siempre acotadas en  $x = x_\beta$  (en particular  $N(x_\beta) = 0$ ),  $p'(x_\beta) = F'(x_\beta) = 0$ , y el límite  $L_\beta$  es nulo.

## 5.4. Integración numérica del problema angular

El comportamiento general del sistema angular cerca de sus puntos singulares ha sido investigado con detalle en la sección 5.3 (ver, también, tabla 5.2 y tabla 5.3). Usando los resultados encontrados en la sección 5.3, podemos iniciar ahora la integración numérica del sistema angular. Esto se realizará en la presente sección para el valor del exponente  $m$  de interés en nuestro problema particular, es decir,  $m = 5/4$  (ver ecuaciones (5.13) y (5.14)). Así, consideraremos el sistema de EDOs definido por las ecuaciones (5.10)-(5.12), junto con las condiciones de contorno definidas por las ecuaciones (5.13)-(5.16). Con anterioridad, la ecuación (5.10) fue resuelta para  $F'(x)$  (ver ecuación (5.18)). En este sentido, recordemos que en el problema físico que estamos considerando la carga es emitida desde la superficie de emisión ( $x = x_\alpha$ ) hacia el semieje ( $x = 1$ ). Entonces, en la solución de la ecuación (5.10) para  $F'(x)$  se debe elegir el signo positivo. Por otra parte, la ecuación (5.10) junto con las condiciones de contorno en la superficie líquida (ecuación (5.13)), implican que  $F'(x_\alpha) = 0$ . Entonces, la superficie del cono  $x = x_\alpha$  es un punto singular de segunda clase (analizado en la sección 5.3.2). En particular, de la condición de equilibrio mecánico (ecuación (5.13)) obtenemos  $p'(x_\alpha) > 0$ . En consecuencia, el punto singular encontrado en la superficie del cono corresponde a la Opción  $\beta B$  (ver sección 5.3.2 y tabla 5.3). Más aún, puesto que la carga es emitida ( $F_\beta > 0$ ) hacia el eje ( $F'_\beta > 0$ ) debemos considerar la Opción  $\beta B$  con  $s = 1$  y signo positivo para  $F_0$  (ver tabla 5.3). En total, la solución del sistema angular en el límite  $x \rightarrow x_{\alpha+}$  está dada por

$$F(x) \simeq \frac{2(2 \cot \alpha)^{1/4}}{3(1 - x_\alpha^2)^{3/4}} (x - x_\alpha)^{3/2}, \quad (5.37)$$

$$p(x) \simeq \left( \frac{2 \cot \alpha}{1 - x_\alpha^2} \right)^{1/2} (x - x_\alpha) + \frac{4N_\alpha}{3(1 - x_\alpha^2)} (x - x_\alpha)^{3/2}, \quad (5.38)$$

$$N(x) \simeq N_\alpha (x - x_\alpha)^{-1/2}, \quad (5.39)$$

la cual depende de dos parámetros independientes:  $\alpha$  y  $N_\alpha$ .

Puesto que  $N(x) \rightarrow \infty$  en el límite  $x \rightarrow x_{\alpha+}$ , la integración numérica del sistema angular (ecuaciones (5.10)-(5.12)) no se puede iniciar en  $x = x_\alpha$ . No obstante, una vez dispongamos de los valores de  $\alpha$  y  $N_\alpha$ , las formas asintóticas anteriores (ecuaciones (5.37)-(5.39)) permiten la integración numérica del sistema angular como un problema de valores iniciales, iniciando el cálculo en una posición ligeramente desplazada:  $x = x_\alpha + \varepsilon$ , con  $\varepsilon \ll 1$ . En este sentido, el valor  $\varepsilon = 10^{-9}$  ha sido usado para iniciar la integración numérica en todos los resultados numéricos que hemos obtenido (en particular, hemos verificado que los resultados numéricos llegan a ser independientes de  $\varepsilon$  para  $\varepsilon < 10^{-4}$ ).

Por otra parte, de acuerdo a los resultados mostrados en la sección 5.3, el comportamiento asintótico cerca del semieje positivo está dado por la Opción 1C(+) (ver sección 5.3.1 y tabla 5.2), es decir:

$$F(x) \simeq p_1^{1/2} \left( \frac{4}{5} - \frac{5 - \sqrt{13}}{8} (1 - x) \right), \quad (5.40)$$

$$p(x) \simeq p_1 \left( 1 - \frac{3}{8} (1 - x) \right), \quad (5.41)$$

$$N(x) \simeq N_1 (1 - x)^{(1+\sqrt{13})/4}. \quad (5.42)$$

Teniendo esto en cuenta, una posible estrategia para integrar el sistema angular es:

1. Prescribir un valor para el semiángulo del cono líquido  $\alpha$  y para la amplitud  $N_\alpha$  en el comportamiento asintótico de  $N(x)$  en el cono líquido (ecuación (5.39)), por ejemplo,  $N_\alpha = 1$ .
2. Integrar el sistema angular entre  $x = x_\alpha + \varepsilon$  y  $x = 1$  como un problema de valores iniciales, con condiciones iniciales  $F(x_\alpha + \varepsilon)$ ,  $p(x_\alpha + \varepsilon)$ ,  $N(x_\alpha + \varepsilon)$  y  $p'(x_\alpha + \varepsilon)$  obtenidas de las ecuaciones (5.37)-(5.39).
3. Iterar el paso anterior variando el valor de  $N_\alpha$  hasta alcanzar el comportamiento correcto en el semieje  $x = 1$  (es decir, ecuaciones (5.40)-(5.42)), en particular  $N(1) = N'(1) = 0$ .

Una vez que se ha encontrado el valor correcto de  $N_\alpha$  en la ecuación (5.39), el último paso es calcular el radio de la superficie de emisión  $\tilde{r}_s$ . En el caso general este radio está dado por la ecuación (5.17), el cual para  $m = 5/4$ , Opción 1C(+) en  $x \rightarrow 1_-$  y Opción  $\beta$ B en  $x \rightarrow x_{\alpha+}$  se puede escribir como

$$\tilde{r}_s = (2^{14}(\pi/3)^4 N_\alpha^4 \sin 2\alpha)^{-1/3} \simeq 0,037 N_\alpha^{-4/3} \sin^{-1/3} 2\alpha. \quad (5.43)$$

De esta forma, la solución es obtenida como una función del ángulo  $\alpha$ , el cual, en el presente modelo queda como un parámetro libre para esta parte del problema.

La anterior estrategia ha sido usada para resolver el problema angular en función de  $\alpha$ . En este sentido, aunque en principio el rango admisible para  $\alpha$  es  $0 < \alpha < \pi$ , podemos encontrar soluciones físicamente admisibles con  $N(x) > 0$  sólo en un estrecho rango,  $\alpha_M < \alpha < \alpha_T$ , como se verá a continuación.

### 5.4.1. Rango físicamente admisible para el semiángulo del cono $\alpha$

La solución numérica de las ecuaciones (5.10)-(5.16) alcanza siempre una singularidad en un cierto punto  $x_\eta \leq 1$ , con  $x_\eta$  dependiente tanto del semiángulo del cono  $\alpha$ , como del valor de  $N_\alpha$ . Dependiendo de la localización de la singularidad, y del correspondiente comportamiento asintótico, encontramos cuatro posibles casos (1, 2, 3, y 4), que resumimos a continuación.

En los Casos 1 y 2, la singularidad está localizada en  $x_\eta < 1$ , con  $F'(x_\eta) = p'(x_\eta) = 0$ ; en particular, encontramos  $N(x_\eta) = \infty$  en el Caso 1 y  $N(x_\eta) = 0$  en el Caso 2. Así, el Caso 1 es

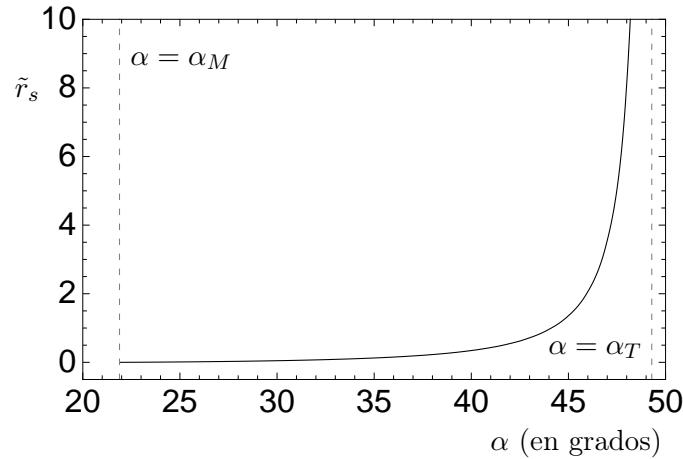


Figura 5.2: Valor adimensional del radio  $r_s$  como función del semiángulo del cono  $\alpha$ .

el comportamiento análogo “por la izquierda” a la Opción  $\beta A$  mientras el Caso 2 corresponde al análogo “por la izquierda” a la Opción  $\beta D$ . Asumiendo que la carga es emitida sólo desde la superficie lateral del cono líquido, encontramos que  $N(x) = 0$  para  $x_\eta < x \leq 1$  en ambos casos. Así, la solución para  $p(x)$  en el intervalo  $x_\eta < x \leq 1$  está dada por la combinación lineal de funciones de Legendre de primera y segunda especie de orden  $1/2$  cumpliendo  $p(x_\eta) = p_\eta > 0$  y  $p'(x_\eta) = 0$ , es decir  $p(x) = p_\eta(1-x_\eta^2) \left[ Q'_{1/2}(x_\eta) P_{1/2}(x) - P'_{1/2}(x_\eta) Q_{1/2}(x) \right]$ . Puesto  $P'_{1/2}(x_\eta) \neq 0$ , el coeficiente de  $Q_{1/2}(x)$  es siempre no nulo y entonces  $p(x)$  no está acotada en  $x = 1$ . Así,  $p(x)$  no cumple la condición de regularidad en  $x = 1$  y, en consecuencia, ni el Caso 1 ni el Caso 2 son físicamente admisibles. En el Caso 3, la singularidad está localizada en el semieje positivo ( $x_\eta = 1$ ) y corresponde a la Opción 1C(+) de la tabla 5.2 (en particular,  $N(1) = N'(1) = 0$ ). Así, las condiciones de regularidad en  $x = 1$  se cumplen y el Caso 3 es físicamente admisible. Por otra parte, en el Caso 4, el punto singular también se localiza en  $x_\eta = 1$ . No obstante, en el Caso 4 las tres funciones angulares no están acotadas en  $x = 1$ , mostrando singularidades que no pueden describirse mediante leyes de potencias. Así, puesto que las condiciones de regularidad en  $x = 1$  no se satisfacen, el Caso 4 no es físicamente admisible.

Nuestros resultados muestran que hay un valor mínimo del semiángulo del cono  $\alpha$  ( $\alpha = \alpha_M \simeq 21,89^\circ$ ,  $x_M \simeq -0,9279$ ), tal que para  $\alpha < \alpha_M$  sólo podemos encontrar los Casos 1 y 2 (dependiendo del valor que tenga  $N_\alpha$ ). Así,  $\alpha < \alpha_M$  no es físicamente admisible. Por otra parte, existe un valor máximo de  $\alpha$ , dado por el ángulo de Taylor  $\alpha_T \simeq 49,29^\circ$ , tal que para  $\alpha > \alpha_T$  sólo el Caso 4 puede ser encontrado. En consecuencia,  $\alpha > \alpha_T$  no es físicamente admisible.

Para valores de  $\alpha$  entre los límites anteriores, existe un único  $N_\alpha > 0$  que lleva al comportamiento requerido en  $x = 1$ , es decir, al dado por las ecuaciones (5.40)-(5.42). Dicho valor de  $N_\alpha$  depende fuertemente de  $\alpha$ , obteniendo  $N_\alpha = 0$  en el límite  $\alpha \rightarrow \alpha_T$  por una parte, y  $N_\alpha \rightarrow \infty$  en el límite  $\alpha \rightarrow \alpha_M$  por otra. En consecuencia, el radio de la superficie de emisión (ecuación (5.43)) también depende fuertemente de  $\alpha$ , obteniendo  $r_s = 0$  en el límite de conos más estrechos  $\alpha \rightarrow \alpha_M$ , y  $r_s \rightarrow \infty$  en el límite opuesto  $\alpha \rightarrow \alpha_T$ . En este último caso límite encontramos que para  $\alpha = \alpha_T$  la única posibilidad que lleva al comportamiento regular en  $x = 1$  es  $N_\alpha = 0$ . Así, el potencial de Taylor  $\phi_T$  (con  $N(x) = 0$ ) es la única solución regular en ese caso. Los resultados anteriores son resumidos en la figura 5.2, donde se muestra el com-



portamiento de  $r_s$  como función del semiángulo del cono  $\alpha$  (con  $\alpha \in (\alpha_M, \alpha_T)$ ). Puesto que  $\sin^{-1/3} 2\alpha$  sólo experimenta variaciones de ca. 12% para valores de  $\alpha$  en el intervalo físicamente admisible, encontramos que la mayor parte de la variación de  $r_s$  mostrada en la figura 5.2 es debida al factor  $N_\alpha^{-4/3}$  que aparece en la ecuación (5.43).

### 5.5. Resultados y discusión

Los resultados numéricos para  $F(x), p(x), N(x)$  para varios valores del semiángulo del cono  $\alpha$  en el intervalo físicamente admisible  $\alpha \in (\alpha_M, \alpha_T)$  se muestran en la figura 5.3. Concretamente, se muestran los resultados correspondientes a dos valores intermedios ( $\alpha = 36^\circ, \alpha = 46^\circ$ ), y a dos valores próximos a los límites ( $\alpha = 22^\circ, \alpha = 49,2^\circ$ ). Es interesante hacer una observación detallada de las gráficas de las funciones angulares (ver debajo).

En primer lugar, podemos observar que las tres funciones alcanzan valores más bajos cuando el semiángulo del cono  $\alpha$  aumenta. En particular, en el caso  $\alpha = 49,2^\circ$ , (ver, figura 5.3(d)), la función  $N(x)$  alcanza rápidamente valores próximos a cero y, como era de esperar,  $p(x)$  es casi coincidente con la solución de Taylor ( $p_T(x) = -a_T P_{1/2}(x)$ , ver curva gris discontinua de la figura 5.3(d)).

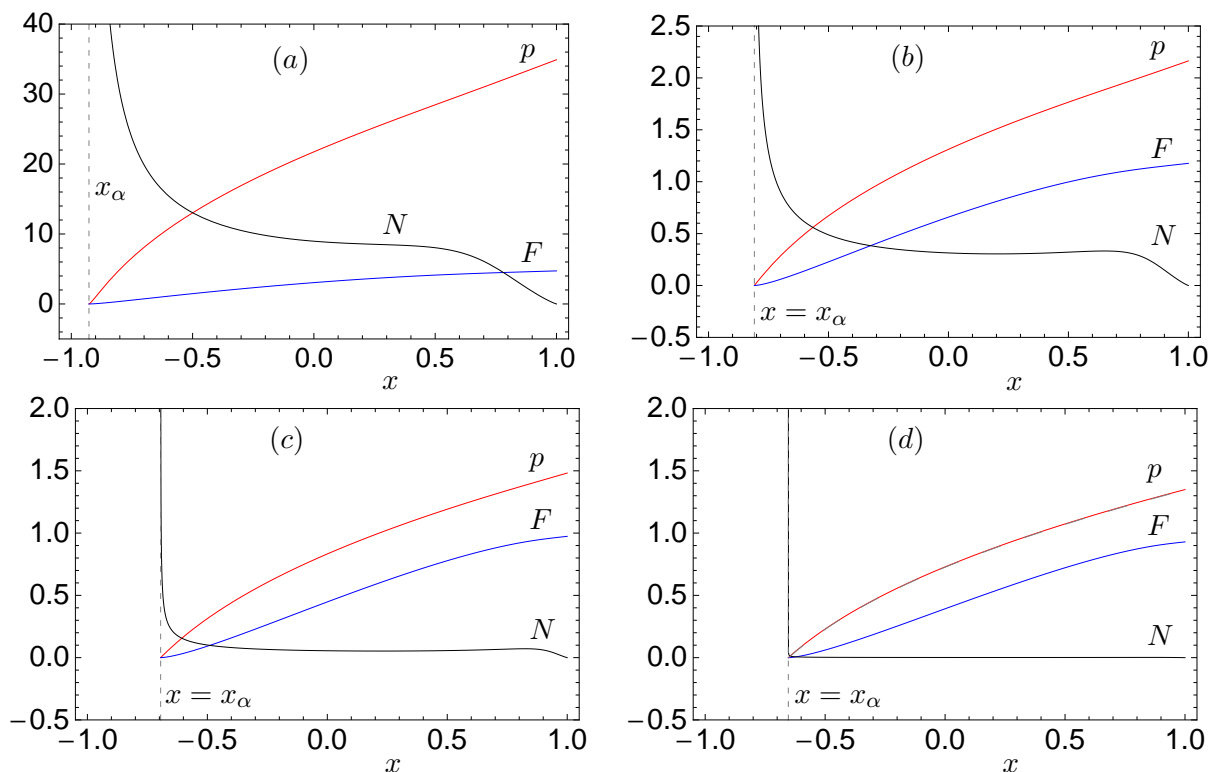


Figura 5.3: Funciones angulares  $F(x), p(x), N(x)$  correspondientes a: (a)  $\alpha = 22^\circ$  ( $x_\alpha = -0,9272, N_\alpha = 44,01, \tilde{r}_s = 2,7 \times 10^{-4}$ ); (b)  $\alpha = 36^\circ$  ( $x_\alpha = -0,8090, N_\alpha = 0,3481, \tilde{r}_s = 0,15$ ); (c)  $\alpha = 46^\circ$  ( $x_\alpha = -0,6947, N_\alpha = 4,903 \times 10^{-2}, \tilde{r}_s = 2,1$ ); (d)  $\alpha = 49,2^\circ$  ( $x_\alpha = -0,6534, N_\alpha = 1,163 \times 10^{-3}, \tilde{r}_s = 3,0 \times 10^2$ ). La curva gris discontinua en (d) representa la parte angular del potencial de Taylor  $\phi_T$ , la cual en este caso es casi coincidente con  $p(x)$ .

Por otra parte, en todos los casos, tanto  $F(x)$  y  $p(x)$  son funciones estrictamente crecientes (el resultado para  $F(x)$  era, de hecho, esperable). Por otra parte,  $N(x)$  es una función estrictamente decreciente sólo para valores de  $\alpha$  próximos a  $\alpha_M$  (ver, por ejemplo, la figura 5.3(a)). Para valores de  $\alpha$  por encima de un cierto límite (ca.  $\alpha \simeq 27^\circ$ ), encontramos que  $N(x)$  llega a ser no monótona, alcanzando un mínimo local para valores intermedios de  $x$  y un máximo local próximo al eje (ver, por ejemplo, la figura 5.3(b) y la figura 5.3(c)). Estos dos extremos locales no se pueden apreciar en la figura 5.3(d) porque sus valores son demasiado bajos (ca.  $10^{-3}$ ).

Finalmente, también es interesante observar que para valores de  $\alpha$  próximos al ángulo mínimo  $\alpha_M$  se observa que la función  $N(x)$  decae fuertemente a cero cerca del eje  $x = 1$ , resultando un “haz hueco” (ver figuras 5.3(a) y 5.3(b)). Para valores de  $\alpha$  próximos al ángulo máximo (es decir, el ángulo de Taylor  $\alpha_T$ ), la tendencia es la misma cualitativamente (ver figura 5.3(c)), pero la reducción de carga en la proximidad del eje es menos acusada, ya que en estos casos la función  $N(x)$  cae a cero muy rápidamente tan pronto nos separamos de la superficie de emisión  $x = x_\alpha$  (ver, en particular, 5.3(d)).

### 5.5.1. Trayectorias de las gotas y distribución de carga

En el caso general (ecuaciones (3.10) y (5.7)) las trayectorias de las gotas están dadas por las soluciones de

$$\frac{d\tilde{r}}{dx} = \frac{m\tilde{r}F}{(1-x^2)F'}, \quad \tilde{r}(x_\alpha) = \tilde{r}_0, \quad (5.44)$$

donde  $\tilde{r}_0 = r(t=0)/\ell$  y donde diferentes valores de la condición inicial  $r_0$  (con  $r_0 \leq r_s$ ) llevan a diferentes trayectorias. Después de una sencilla integración de la anterior EDO, y recordando la ecuación (5.19), encontramos que las trayectorias de las gotas están dadas por

$$\tilde{r}(x) = \tilde{r}_0 \left( \frac{L_\alpha}{(1-x^2)NF'} \right)^{1/[3(m-1)]}, \quad (5.45)$$

donde  $L_\alpha$  corresponde al valor límite de  $(1-x^2)NF'$  en la superficie de emisión  $x = x_\alpha$  (ver, también, ecuación (5.32) y Opción  $\beta B$  de la tabla 5.3).

Las figuras 5.4 y 5.5 muestran varias trayectorias correspondientes a los valores del semi-ángulo del cono  $\alpha$  que hemos seleccionado anteriormente ( $\alpha = 22^\circ, 36^\circ$  en la figura 5.4 y  $\alpha = 46^\circ, 49,2^\circ$  en la figura 5.5). Las trayectorias mostradas en las figuras 5.4 y 5.5 han sido calculadas por medio de la ecuación (5.45) con  $m = 5/4$ , y corresponden a varias condiciones iniciales entre  $\tilde{r}_0 = 0$  (no incluida) and  $\tilde{r}_0 = \tilde{r}_s$  (incluida). Las condiciones iniciales usadas en las figuras 5.4 y 5.5 han sido seleccionadas de la siguiente forma. En todos los casos, hay 16 líneas que se inician en puntos  $r_0$  entre  $r_0 = 0,1r_s$  y  $r_0 = r_s$ . Estas líneas han sido elegidas de tal forma que la densidad resultante de trayectorias en la figura sea proporcional a  $n(r, \theta)$  en la superficie de emisión (es decir,  $n(r, \pi - \alpha)$ ). Por otra parte, hay otro grupo de 16 trayectorias que se inician en puntos  $0 < r_0 < 0,1r_s$ . Las condiciones iniciales usadas en este segundo grupo han sido elegidas de tal forma que la densidad resultante de líneas en la figura en  $r = r_s$  sea proporcional a  $n(r_s, \theta)$ . De esta forma, la densidad de trayectorias mostrada en las figuras 5.4 y 5.5 se asemeja aproximadamente a la densidad numérica de gotas real en el electrospray, de acuerdo al presente SEM. Por inspección de las figuras 5.4 y 5.5 es claro que las trayectorias son ortogonales a la superficie de emisión, como era de esperar. Por otra parte, asumiendo que

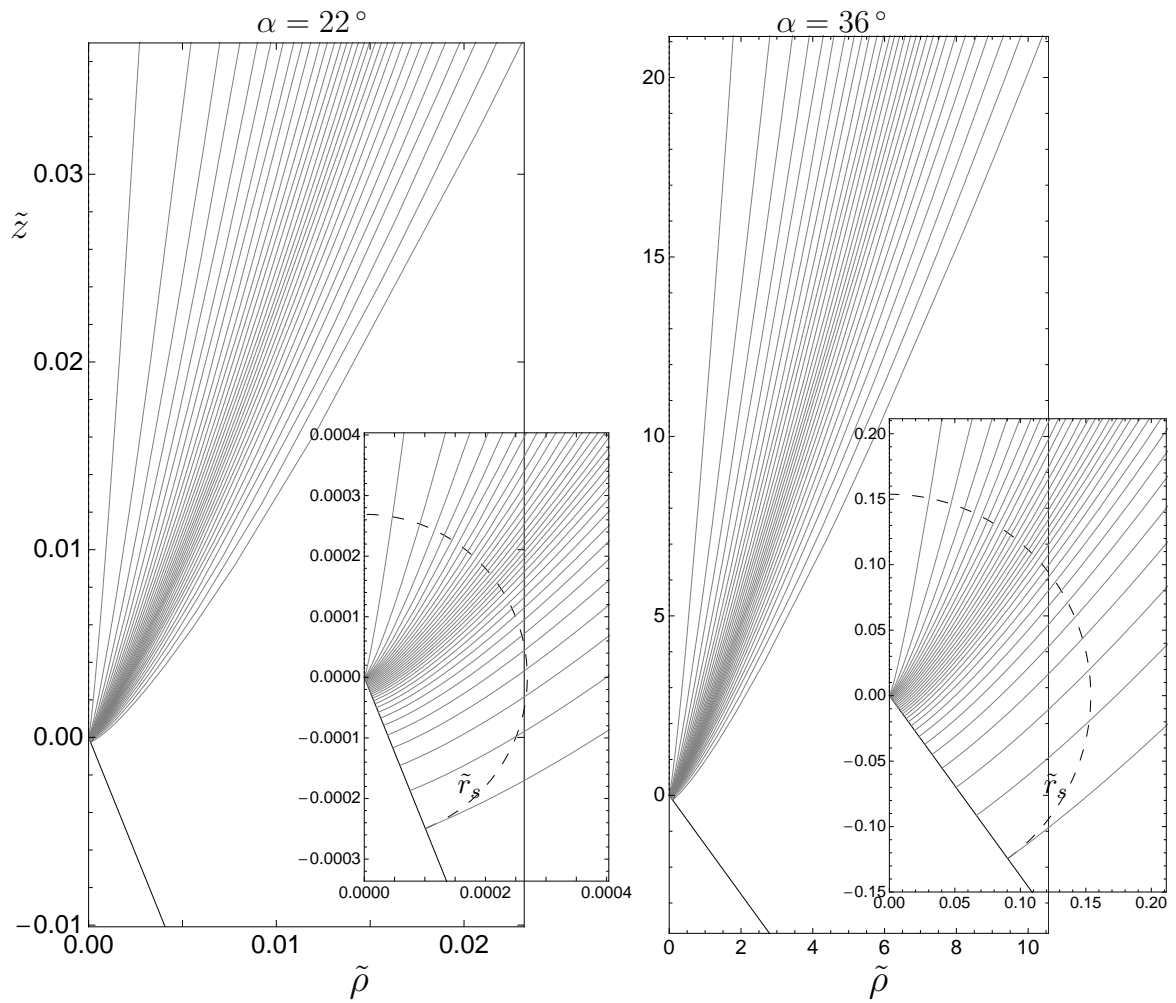


Figura 5.4: Trayectorias de las gotas correspondientes a  $\alpha = 22^\circ$  (izquierda) y  $\alpha = 36^\circ$  (derecha). El detalle cerca de la región del vértice se muestra para valores de  $r$  de orden  $r_s$ , mientras que la panorámica general del electropray se muestra para valores de  $r$  de orden  $100r_s$ .

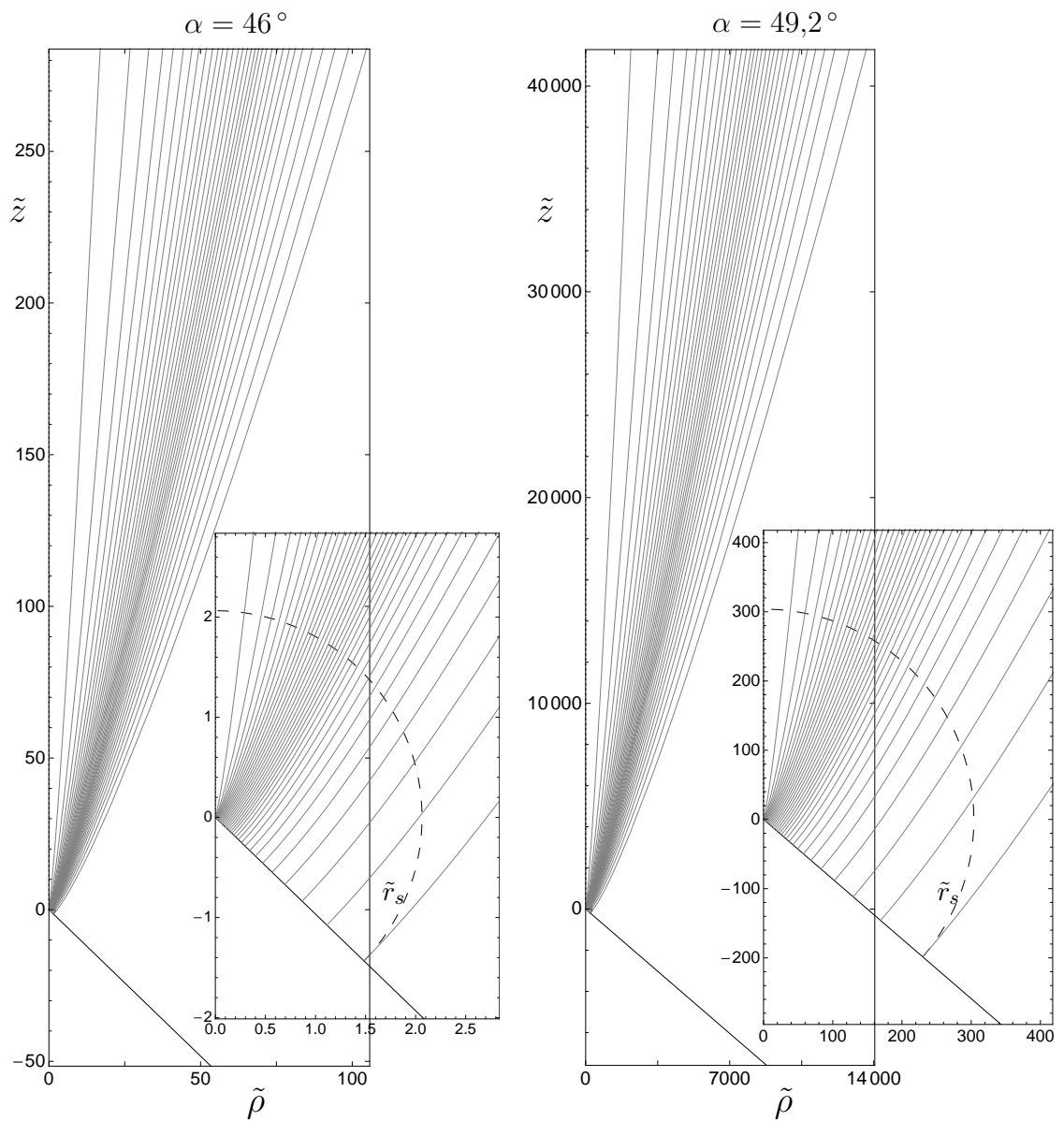


Figura 5.5: Trayectorias de las gotas correspondientes a  $\alpha = 46^\circ$  (izquierda) y  $\alpha = 49,2^\circ$  (derecha). El rango de valores de  $r$  ha sido elegido como en la figura 5.4.

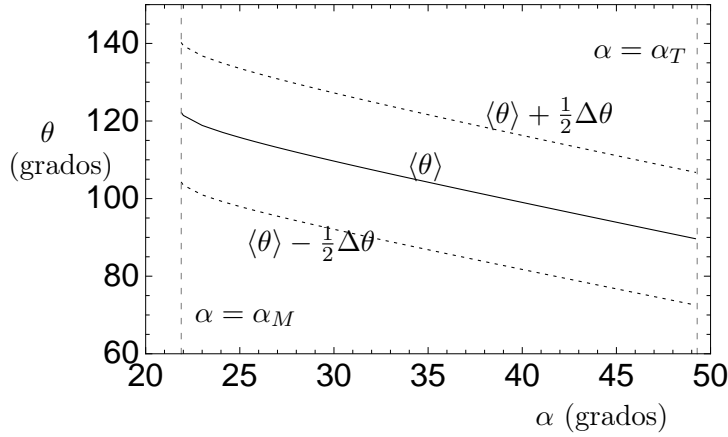


Figura 5.6: Distribución angular del electrospray en la región de carga espacial en función del semiángulo del cono  $\alpha$

el electrospray se emite desde la superficie de emisión ( $r \leq r_s, \theta = \pi - \alpha$ , con  $r_s$  definida por la condición de conservación de la carga (5.17)), es claro que la trayectoria que se inicia en el punto  $r_0 = r_s$  (trayectoria más externa mostrada en las figuras 5.4 y 5.5) define el contorno del electrospray. Resultados similares se pueden encontrar para otros valores del semiángulo del cono líquido  $\alpha$  en el rango físicamente aceptable.

Una vez que hemos analizado las trayectorias de las gotas, es interesante estudiar las propiedades estadísticas de la distribución de la carga emitida (ver apéndice C). Dado que la densidad numérica de gotas  $n(\tilde{r}, \theta)$  viene dada por una función separable en parte radial y en parte angular es evidente que la distribución angular de las gotas en la región de carga espacial puede ser caracterizada por medio del ángulo promedio  $\langle \theta \rangle$  y su correspondiente desviación estándar  $\Delta\theta$ , ambos independientes de la coordenada radial  $\tilde{r}$ . En particular, usando (C.9) obtenemos que el ángulo promedio  $\langle \theta \rangle$  viene dado por

$$\langle \theta \rangle = \frac{\int_{x_\alpha}^1 \arccos x N(x) dx}{\int_{x_\alpha}^1 N(x) dx}. \tag{5.46}$$

Por otra parte, la desviación estándar viene dada por  $\Delta\theta = (\langle \theta^2 \rangle - \langle \theta \rangle^2)^{1/2}$ , donde, utilizando (C.10),

$$\langle \theta^2 \rangle = \frac{\int_{x_\alpha}^1 (\arccos x)^2 N(x) dx}{\int_{x_\alpha}^1 N(x) dx}. \tag{5.47}$$

Como era de esperar, ambos parámetros ( $\langle \theta \rangle$  y  $\Delta\theta$ ) dependen sólo de la parte angular de la densidad numérica  $N(x)$ , la cual depende implícitamente del semiángulo del cono líquido  $\alpha$ .

Los resultados numéricos se muestran en la figura 5.6 como una función del semiángulo del cono líquido  $\alpha$ . Podemos ver que el ángulo del electrospray promedio  $\langle \theta \rangle$  alcanza valores entre ca.  $90^\circ$  and  $122^\circ$  y decrece cuando  $\alpha$  se incrementa. Por otra parte, encontramos un rango

relativamente estrecho de valores de la desviación estándar  $\Delta\theta$  (de ca.  $34^\circ$  a  $36^\circ$ ). En este sentido, podemos observar que  $\Delta\theta$  alcanza un mínimo en un valor de  $\alpha$  cerca del valor más alto posible (es decir,  $\alpha \rightarrow \alpha_T$ ).

### 5.5.2. Dominio de validez

Dado que la corriente eléctrica total emitida  $I$  es finita, es evidente que la superficie de emisión ( $r \leq r_s$ ,  $\theta = \pi - \alpha$ ) debe estar acotada, es decir,  $r_s < \infty$ . En consecuencia, a distancias del vértice del cono de orden  $r_s$  la alta simetría existente cerca del vértice se rompe. No obstante, a distancias  $r$  mucho menores que  $r_s$  esta alta simetría persiste. El método de solución del presente SEM para la parte singular del problema está basado en soluciones autosemejantes, lo cual está justificado sólo cerca del vértice, donde la simetría persiste. Entonces, la solución obtenida debe considerarse sólo como una buena aproximación en la inmediata vecindad del vértice del cono, es decir, a distancias  $r \ll r_s$ . No obstante, ya hemos comentado anteriormente que los resultados obtenidos son aún necesarios para resolver numéricamente la parte regular del problema. En particular, la solución obtenida en términos de funciones autosemejantes, la cual es correcta en el límite  $r \rightarrow 0$ , se usará más adelante para iniciar la correspondiente integración que permita calcular numéricamente soluciones del presente problema a distancias de orden  $r_s$  o mayores (ver capítulo 7).

De acuerdo a nuestros resultados, el semiángulo del cono  $\alpha$  permanece como un parámetro libre en el límite  $r \rightarrow 0$ , y entonces, queda pendiente de obtener una relación funcional entre  $\alpha$  y la corriente total emitida  $I$ . En este sentido, el único resultado proporcionado por el análisis de soluciones autosemejantes, válido cerca del vértice del cono, es la existencia de un intervalo finito para los valores del semiángulo del cono  $\alpha$ :

$$\alpha_M \simeq 21,89^\circ < \alpha < \alpha_T \simeq 49,29^\circ. \quad (5.48)$$

Aunque este resultado es bastante relevante, es, sin embargo, incompleto. De acuerdo a nuestro presente modelo, la relación funcional  $\alpha = \alpha(I)$  no está determinada por el comportamiento del sistema en la inmediata vecindad del vértice del cono. Al contrario, esta relación depende del comportamiento del sistema a grandes distancias. De esta forma, la relación funcional  $\alpha = \alpha(I)$  debe ser proporcionada por medio de una solución numérica más exhaustiva del SEM, válida para distancias variando desde  $r \ll r_s$  hasta distancias de orden el radio del tubo capilar  $r_c$ . Esto escapa del marco de esta tesis pues, como se comentó en la sección 2.4, el análisis del problema se centrará en regiones  $r \ll r_c$ . Es importante resaltar que el resultado  $\alpha < \alpha_T$  era de esperar y, como sabemos, responde al hecho físico de la repulsión entre la carga espacial emitida y el cono líquido. De hecho, dicho resultado puede justificarse matemáticamente en condiciones muy generales (ver apéndice E).

### 5.5.3. Limitaciones

Un aspecto importante de cualquier modelo de emisión de carga eléctrica es la ley que establece la relación densidad de corriente vs. campo eléctrico local ( $J = J(E)$ ) sobre la superficie de emisión [30, 37]. En general, esta ley depende del material que se esté considerando pero no de la geometría, aunque la curvatura superficial es causa de correcciones [24]. En este sentido, nuestro modelo predice la siguiente relación entre la densidad de corriente  $J$  y el campo

eléctrico  $E$  cerca de la superficie de emisión:  $J \propto E^{\frac{3m-5}{2m-3}}$ , es decir,  $J \propto E^{5/2}$  para  $m = 5/4$ , la cual difiere de la relación esperada:  $J \propto \exp E^{1/2}$ , basada en la aproximación de Schottky [37]. Este desacuerdo no es sorprendente si recordamos el considerable número de hipótesis ideales que estamos asumiendo (superficie de emisión cónica, conductividad infinita, velocidad de inyección nula, ...). No obstante, un resultado relevante de nuestro SEM es que la citada relación  $J = J(E)$  depende de la geometría. En este sentido, una cuestión futura interesante sería determinar la geometría de la superficie de emisión necesaria que lleve, dentro del presente SEM, a la dependencia funcional esperada entre la densidad de corriente y el campo local.

Otro aspecto importante de la emisión de electrospray es la relación observada entre la corriente total  $I$  y el caudal del líquido  $Q$ . En este sentido, se habrá advertido que, como consecuencia de la suposición de que el líquido tiene una conductividad infinita ( $K \rightarrow \infty$ ), la relación usual encontrada en los experimentos ( $I \propto (KQ)^{1/2}$ , ver [16]) no ha podido ser reproducida por el presente SEM. En efecto, la hipótesis de conductor perfecto desacopla el problema de transporte inercial fuera del líquido (al cual se aplica nuestro modelo) del problema de transporte en la fase líquida. De esta forma, dicha hipótesis de conductor perfecto se reduce a una simple condición de contorno para el problema exterior. En consecuencia, nuestras suposiciones simplificadoras impiden la descripción de la relación entre la corriente y el caudal. Así, para superar la mencionada limitación se debe relajar la hipótesis de líquido infinitamente conductor, lo que implica considerar el correspondiente problema de transporte dentro del líquido.

## 5.6. Emisión limitada por distribución espacial de carga

Un sencillo resultado que se deduce del análisis anterior es que el campo eléctrico  $\mathbf{E}$  sobre la superficie de emisión ( $r \leq r_s, \theta = \pi - \alpha$ ) es siempre no nulo. En efecto, es evidente que sobre la interfase líquida la componente radial del campo eléctrico es nula (es decir,  $E_r = 0$ ) y entonces, el campo eléctrico sobre la superficie de emisión solo puede tener componente angular,  $\mathbf{E} = E_\theta \mathbf{u}_\theta$ . Teniendo en cuenta la forma matemática del campo eléctrico  $\mathbf{E}$  (ver tabla 5.1) y la forma asintótica de la función  $p(x)$  cerca de la superficie de emisión (ecuación (5.38)) se obtiene sin dificultad que

$$E_\theta|_{(\tilde{r}, \theta = \pi - \alpha)} = -E_{sc} \tilde{r}^{-1/2} (2 \cot \alpha)^{1/2}, \quad (5.49)$$

resultado que, por otra parte, podía anticiparse fácilmente a partir de la condición de equilibrio mecánico. Finalmente, recordando el rango admisible de valores para el semiángulo del cono  $\alpha$  (ecuación (5.48)) encontramos que  $E_\theta < 0$  sobre la interfase líquida y, por tanto, el campo eléctrico  $\mathbf{E}$  no puede ser nulo sobre la superficie de emisión.

Una consecuencia del resultado anterior es que, de acuerdo al presente SEM, la vaporización de iones desde una interfase líquida con forma cónica no está limitada por distribución espacial de carga. Mostraremos, a continuación, que la emisión en el límite de un campo externo nulo implica que toda la carga eléctrica debería salir necesariamente del vértice del cono. Esto motiva que el estudio del caso límite en el que la emisión de iones ocurra desde el propio vértice del cono líquido sea de interés físico y, por esta razón, será abordado en esta sección. No obstante, como se verá, el análisis llevará irremediablemente a una inconsistencia física en la condición de conservación de la carga y, en consecuencia, la descripción de la emisión limitada por distribución espacial de carga dentro del SEM no es posible.

### 5.6.1. Motivación del problema y geometría

Probaremos, en primer lugar, que la emisión de gotas con velocidad cero y procedente de una interfase líquida y perfectamente cónica sólo puede estar limitada por distribución espacial de carga en el supuesto en el que todas las gotas sean emitidas desde el propio vértice del cono. El razonamiento es sencillo y está basado en la ecuación de Newton aplicado a cada una de las gotas emitidas (ver debajo).

Consideremos la ecuación de Newton para una gota arbitraria,  $\mathbf{F}_d = m_d \mathbf{a}_d$ , donde  $\mathbf{F}_d$  es la fuerza total que actúa sobre la gota y  $\mathbf{a}_d$  denota su aceleración. Evidentemente, la fuerza total sobre la gota está dada por  $\mathbf{F}_d = e \mathbf{E}$ . Escribiendo la ecuación de Newton en coordenadas esféricas y separando en componentes en la dirección radial y en la dirección angular, obtenemos:

$$e E_r = m_d \left( \ddot{r} - r \dot{\theta}^2 \right), \quad (5.50)$$

$$e E_\theta = m_d \left( r \ddot{\theta} + 2 \dot{r} \dot{\theta} \right), \quad (5.51)$$

donde, como es usual, el punto ‘ $\cdot$ ’ denota derivada con respecto al tiempo  $t$ . La trayectoria de la gota se obtendría formalmente prescribiendo las correspondientes condiciones iniciales, las cuales, en este caso, consisten en fijar la posición y la velocidad en el instante  $t = 0$ :  $r(0)$ ,  $\dot{r}(0)$ ,  $\theta(0)$  y  $\dot{\theta}(0)$ . La emisión limitada por distribución espacial de carga se obtiene en el límite de un campo eléctrico “extractor” nulo. Ahora bien, por lo dicho antes, el campo eléctrico “extractor” se encuentra calculando el valor del campo eléctrico  $\mathbf{E}$  que actúa sobre cada gota en  $t = 0$ , esto es, evaluando  $\mathbf{E}|_{(r=r(0), \theta=\theta(0))}$ . Debemos encontrar, entonces, a qué condiciones iniciales lleva la condición de que el campo “extractor” sea cero. Por hipótesis, la velocidad a la que sale la gota es nula y esto implica que  $\dot{r}(0) = 0$  si  $r(0) = 0$  ó  $\dot{r}(0) = 0$  y  $\dot{\theta}(0) = 0$  si  $r(0) \neq 0$ . Asumamos, por otra parte, la condición inicial  $\theta(0) = \zeta_d$ , donde  $\zeta_d$  denota el ángulo de emisión de la gota considerada. Particularizando las ecuaciones (5.50) y (5.51) en  $t = 0$ , obtenemos:

$$e E_r|_{(r=r(0), \theta=\zeta_d)} = m_d \left( \ddot{r}(0) - r(0) \dot{\theta}^2(0) \right), \quad (5.52)$$

$$e E_\theta|_{(r=r(0), \theta=\zeta_d)} = m_d \left( r(0) \ddot{\theta}(0) \right). \quad (5.53)$$

La condición de un campo “extractor” nulo implica que sus dos componentes (radial y angular) lo sean. En particular, de la condición  $E_\theta|_{(r=r(0), \theta=\zeta_d)} = 0$  (ver ecuación (5.53)) se deduce inmediatamente la condición inicial  $r(0) = 0$ , pues, en caso contrario, la gota no saldría. En efecto, si  $r(0) \neq 0$ , se tendría necesariamente que  $\ddot{\theta}(0) = 0$ , y la condición  $E_r|_{(r=r(0), \theta=\zeta_d)} = 0$  (ver ecuación (5.52)) implicaría además  $\ddot{r}(0) = 0$  (puesto que  $\dot{\theta}(0) = 0$ ), lo que llevaría a la situación trivial en la que no hay emisión de carga. En conclusión, una condición necesaria para tener emisión limitada por carga espacial es que todas las gotas sean emitidas con velocidad nula desde el vértice del cono, tal como habíamos anunciado.

El razonamiento anterior motiva que sea de interés investigar el problema mostrado en la figura 5.7. Esto es, consideraremos el caso ideal en el que el electrospray se emite con velocidad inicial igual a cero desde el vértice de un cono de Taylor, con semiángulo  $\alpha$ , en una cierta dirección, dada por  $\theta = \zeta$  y la cual define el ángulo de emisión del electrospray. Notar que el ángulo de emisión  $\zeta$  determina físicamente la frontera del electrospray y, por esta razón, coincide con el ángulo inicial  $\zeta_d$  correspondiente a la trayectoria más externa de las que son



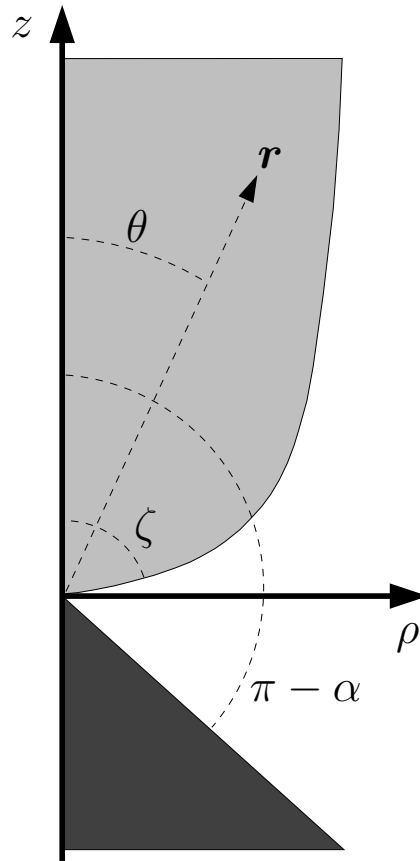


Figura 5.7: Emisión desde el vértice del cono.

emitidas. Notar, también, que el valor de dicho ángulo está físicamente acotado por la superficie del cono, es decir, tenemos estrictamente que  $0 \leq \zeta < \pi - \alpha$ . En cierto modo, este problema puede verse como un caso particular del problema general formulado en la sección 3.3 en el límite en el que el radio de la superficie de emisión es nulo, es decir,  $r_s = 0$ . Esto elimina del problema el parámetro  $r_s$ . No obstante, recordemos que, al mismo tiempo, hemos introducido uno nuevo, el ángulo de emisión  $\zeta$ , el cual, en principio, debería ser obtenido del análisis como parte de la solución.

En el caso límite presente tenemos que la superficie de emisión degenera realmente en un punto, el vértice del cono ( $r = 0$ ). La singularidad geométrica existente en el vértice del cono induce el correspondiente comportamiento singular de la densidad de carga espacial cerca de dicho punto. Habida cuenta de la inmensa simetría del problema cerca del vértice, la singularidad podrá describirse por medio de soluciones autosemejantes (ver tabla 5.1). No obstante, el análisis en términos de funciones autosemejantes llevará a una incompatibilidad entre la condición de equilibrio mecánico sobre la interfase cónica (ecuación (3.92)) con la ecuación de conservación de la carga (ecuación (3.95)) (ver debajo).

En efecto, como es sabido, la condición de conservación de la carga (ecuación (3.95)) toma la forma

$$I = \int_S \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} \, da, \tag{5.54}$$

donde, ahora,  $S$  es una superficie regular arbitraria que engloba por completo el vértice del cono y, como siempre,  $\mathbf{n}$  es la normal positiva a  $S$ . La condición anterior se puede escribir en forma adimensional eligiendo, en particular, una superficie esférica de radio  $R$  para evaluar la integral de superficie. El resultado es

$$2\pi \int_0^{\pi-\alpha} \tilde{n}(\tilde{R}, \theta) \left. \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tilde{r}} \right|_{(\tilde{R}, \theta)} \tilde{R}^2 \sin \theta \, d\theta = 1. \quad (5.55)$$

Es muy importante notar que la condición (5.55) se debe satisfacer para cualquier valor del radio  $R$  que haya sido elegido. De esta forma, escribiendo la forma autosemejante de la condición (5.55) obtenemos la condición

$$2^{3/2} \pi m \tilde{R}^{3(m-1)} \int_{x_\alpha}^1 N F \, dx = 1, \quad (5.56)$$

la cual debe ser satisfecha para cualquier número positivo  $\tilde{R}$ . El único valor posible de  $m$  para el cual esto es posible es  $m = 1$ . Pero, por otra parte, la condición de equilibrio mecánico sobre la superficie del cono (ecuación (3.92)) lleva necesariamente al valor  $m = 5/4$ , lo que lleva a un absurdo.

Por tanto, como habíamos advertido, el análisis del sistema por medio de soluciones autosemejantes lleva a una contradicción manifiesta entre la condición de equilibrio mecánico y la condición de conservación de la carga. A pesar de la contradicción observada, la singularidad de la carga espacial existente en el vértice del cono debe estar necesariamente descrita en términos de soluciones autosemejantes. Esto parece evidente recordando la simetría que presenta el problema cerca del vértice. También parece obvio que el valor  $m = 5/4$  se debe seguir considerando, a fin de satisfacer la condición de equilibrio en la interfase líquida, la cual, por hipótesis, tiene forma cónica perfecta.

### 5.6.2. Posibilidad de emisión desde el vértice por medio de una superficie singular

Como veremos a continuación, una alternativa para intentar conciliar la condición de conservación de la carga con la condición de equilibrio mecánico, y así hacer posible la descripción de este caso límite dentro del SEM, consiste en postular matemáticamente la existencia de una superficie singular localizada en la dirección de emisión  $\theta = \zeta$  y desde la cual se emitiría la corriente eléctrica total del electrospray. Desde un punto de vista físico, esta posibilidad puede resultar un tanto extraña, en el sentido de que una densidad superficial de carga necesita un soporte físico (que en nuestro caso no existe). No obstante, es importante resaltar que nuestro propósito está siendo explorar todas las posibilidades desde un punto matemático; en particular, la posibilidad de emisión a través de una superficie singular llevará también a contradicción (ver debajo).

Para interpretar correctamente la condición de conservación de la carga en el problema presente debemos recordar la naturaleza cónica de las soluciones autosemejantes (tabla 5.1) y las singularidades del correspondiente sistema angular (ecuaciones (5.10)-(5.12)). En sistemas descritos por funciones autosemejantes (como el presente caso), la corriente eléctrica sólo puede

ser emitida desde superficies cónicas  $\theta = \text{constante}$  (o superficies de emisión), las cuales pueden degenerar eventualmente en un semieje ( $\theta = 0$  o  $\theta = \pi$ ). La emisión de corriente desde una superficie ocurre siempre de forma que los iones salen de ella con velocidad cero en la dirección normal a la superficie, a la vez que el flujo de corriente elemental que es emitido desde dicha superficie es distinto de cero pero finito. Por tanto, hay dos condiciones que deben requerirse físicamente en una superficie cónica de emisión. En primer lugar, debemos tener  $v_\theta = 0$  en los puntos de la superficie de emisión. En segundo lugar, considerando un elemento de área  $da$  de la superficie, debemos tener que  $0 < |J_\theta da| < \infty$ . Ambas condiciones implican inmediatamente que la densidad numérica  $n$  se hace infinita sobre la superficie de emisión. Entonces, es claro que el ángulo de la superficie de emisión debe estar necesariamente dado por un punto singular del sistema angular en el cual la función  $N(x)$  tienda a infinito. Como ejemplo, recordemos el caso del problema general analizado anteriormente en el que, en particular, la superficie de emisión está dada por una singularidad del tipo dado por la Opción  $\beta B$  (ver tabla 5.3).

En el problema presente, asumiremos que la superficie cónica  $\theta = \zeta$  define físicamente una superficie de emisión. De esta forma, si bien la carga eléctrica sale del vértice del cono, estamos admitiendo que la corriente eléctrica se emite realmente desde esta hipotética superficie de emisión. Por lo dicho anteriormente, deducimos que el ángulo de emisión  $\theta = \zeta$  es un punto singular del sistema angular donde  $N(x)$  tiende a infinito. Hay, entonces, dos posibles casos dependiendo de si  $\zeta > 0$  (Caso 1) o  $\zeta = 0$  (Caso 2). La figura 5.8 muestra un esquema de ambas opciones, las cuales se pueden resumir así.

- Caso 1 ( $\zeta > 0$ ). La corriente eléctrica se emite desde la superficie  $\theta = \zeta$  hacia el semieje positivo  $\theta = 0$ , lo que implica que  $v_\theta < 0$  si  $\theta < \zeta$ . En consecuencia,  $n = 0$  en la región  $\zeta < \theta < \pi - \alpha$ .
- Caso 2 ( $\zeta = 0$ ). La superficie de emisión degenera en el semieje  $\theta = 0$ . Así, la corriente eléctrica es emitida hacia el cono líquido y, en consecuencia,  $v_\theta > 0$  si  $\zeta > 0$ .

Es sencillo mostrar que el Caso 2 ( $\zeta = 0$ ) no es físicamente posible. En efecto, en este caso, el ángulo de emisión  $x = 1$  es un punto singular del sistema angular. Puesto que  $v_\theta > 0$  en  $\theta > 0$ , tenemos que  $F'(x) < 0$  si  $x < 1$  y el límite  $L_1$  (ver ecuación (5.23)) es negativo:

$$L_1 = \lim_{x \rightarrow 1_-} (1 - x^2) N(x) F'(x) < 0 \quad \text{pero finito} . \tag{5.57}$$

Observando la tabla 5.2, encontramos que el único comportamiento asintótico de las funciones angulares cuando  $x \rightarrow 1_-$  que satisface la condición anterior (5.57) está dado por la Opción 1A(+) con  $s = +1$  (notar que debe ser  $F(1) > 0$  puesto que el spray de gotas sale del vértice). Pero recordemos que la Opción 1A lleva siempre a una solución que no satisface las condiciones de regularidad en  $x = 1$  y esto implica que el Caso 2 ( $\zeta = 0$ ) no es admisible físicamente.

Consideremos ahora el Caso 1 ( $0 < \zeta < \pi - \alpha$ ). En este caso, el ángulo de emisión  $x = x_\zeta$  (con  $x_\zeta = \cos \zeta$ ) es un punto singular del segundo tipo, es decir,  $F'(x_\zeta) = 0$  (ver sección 5.3.2). Además, puesto que  $v_\theta < 0$  en  $\theta < \zeta$ , tenemos que  $F'(x) > 0$  si  $x > x_\zeta$ . En consecuencia, el límite  $L_\zeta$  (recordar la ecuación (5.32)) es positivo:

$$L_\zeta = \lim_{x \rightarrow x_{\zeta+}} (1 - x^2) N(x) F'(x) > 0 \quad \text{pero finito} , \tag{5.58}$$

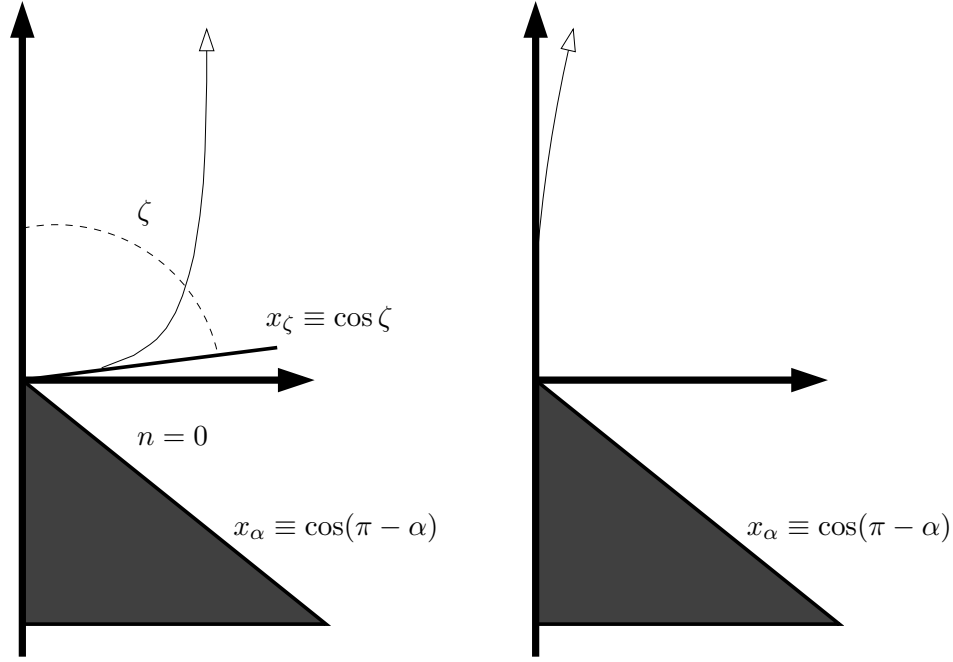


Figura 5.8: Superficie singular de emisión: casos. A la izquierda, Caso 1 ( $\zeta > 0$ ). A la derecha, Caso 2 ( $\zeta = 0$ ).

y, además,  $N(x) = 0$  si  $x_\alpha < x < x_\zeta$ . Observando la tabla 5.3, encontramos dos posibles comportamientos asintóticos cuando  $x \rightarrow x_{\zeta+}$  compatibles con la condición (5.58): Opción  $\beta A(+)$  ( $p'(x_{\zeta+}) = 0$ ) y Opción  $\beta B(+)$  ( $p'(x_{\zeta+}) > 0$ ) con  $s = +1$  (notar que, puesto que la carga sale del vértice, debe ser  $F(x_\zeta) > 0$ ). No obstante, un sencillo análisis (ver debajo) que la opción correcta para este caso es la que corresponde a la Opción  $\beta A(+)$ . En cualquier caso, encontramos que el Caso 1 ( $\zeta > 0$ ) constituye, en principio, una opción físicamente posible.

En resumen, admitiremos que el electrospray se emite desde el vértice del cono en la dirección  $\zeta$ , donde  $0 < \zeta < \pi - \alpha$  y postularemos que la dirección de emisión define una superficie singular de emisión de corriente. Esto induce la correspondiente singularidad de la carga espacial sobre dicha superficie. De esta forma, encontramos que la densidad numérica  $n$  no sólo es singular en el vértice del cono ( $r = 0$ ), sino sobre toda la superficie de emisión  $\theta = \zeta$ . Analizaremos, a continuación, la forma de esta singularidad y las implicaciones que tiene.

### Análisis

Demostremos, en primer lugar, que la singularidad existente en la superficie  $\theta = \zeta$  es la correspondiente a la Opción  $\beta A$  (esto es,  $p'(x_{\zeta+}) = 0$ ). El razonamiento está basado, de nuevo, en la ecuación de Newton para las gotas del electrospray. Recordando la forma matemática del campo eléctrico  $\mathbf{E}$  (ver tabla 5.1), la forma adimensional de la ecuación de Newton para una gota cualquiera conduce a las siguientes ecuaciones:

$$\frac{1}{2} \tilde{r}^{-1/2} p(\cos \theta) = \frac{d^2 \tilde{r}}{d\tilde{t}^2} - \tilde{r} \left( \frac{d\theta}{d\tilde{t}} \right)^2, \quad (5.59)$$

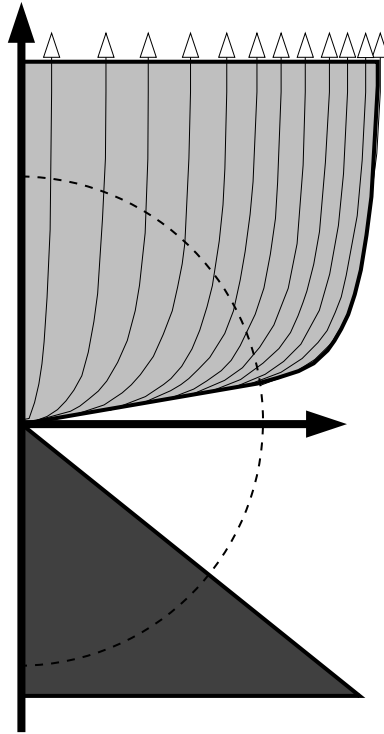


Figura 5.9: Esquema de las trayectorias emitidas desde el vértice

$$\tilde{r}^{-1/2} \frac{d}{d\theta} p(\cos \theta) = \tilde{r} \frac{d^2 \theta}{dt^2} + 2 \frac{d\tilde{r}}{dt} \frac{d\theta}{dt}. \quad (5.60)$$

Puesto que  $v_r > 0$  y  $v_\theta = 0$  sobre la superficie de emisión ( $\theta = \zeta$ ), encontramos que la propia dirección de emisión  $\theta = \zeta$  es una trayectoria y, entonces, debe satisfacer idénticamente las ecuaciones (5.59) y (5.60). En particular, al sustituir en la ecuación (5.60) encontramos:

$$\tilde{r}^{-1/2} \left. \frac{d}{d\theta} p(\cos \theta) \right|_{(\tilde{r}, \theta = \zeta)} = 0. \quad (5.61)$$

Como la ecuación (5.61) debe cumplirse para cualquier  $\tilde{r} > 0$ , se infiere necesariamente que  $p'(x_{\zeta+}) = 0$ . En consecuencia, la Opción  $\beta A(+)$  es la que debe considerarse en este caso, tal y como habíamos adelantado antes.

Las trayectorias de las gotas se podrían calcular formalmente integrando el sistema de ecuaciones (5.59) y (5.60). No obstante, podemos obtener una imagen cualitativa de las mismas de una forma más sencilla con sólo examinar la dependencia funcional del vector densidad de corriente  $\mathbf{J}$  (ver, otra vez, tabla 5.1) y la forma de la singularidad en  $\theta = \zeta$  (Opción  $\beta A(+)$ ). En efecto, considerando la componente radial y la componente angular del vector  $\mathbf{J}$ , encontramos que  $J_r \rightarrow +\infty$  y  $J_\theta < 0$  (pero finito) cuando  $\theta \rightarrow \zeta_-$ . Físicamente, esto significa que las trayectorias se separan tangencialmente de la superficie de emisión  $\theta = \zeta$  hacia  $\theta < \zeta$  (ver figura 5.9).

Puesto que la corriente eléctrica se emite desde la superficie de emisión, es claro que dicha superficie debe contener una cierta densidad superficial de carga positiva  $\omega > 0$ , la cual debe depender de  $\tilde{r}$ . Además, esta carga superficial se mueve sobre la superficie de emisión y entonces

da lugar, a su vez, a una densidad de corriente superficial  $\mathbf{J}_s$ , definida por  $\mathbf{J}_s = \omega \mathbf{v}$ . Después de hacer los correspondientes cálculos (ver tabla 5.1), obtenemos

$$\mathbf{J}_s(\tilde{r}) = \frac{5\sqrt{2}}{4} v_{sc} F(x_\zeta) \omega(\tilde{r}) \tilde{r}^{1/4} \mathbf{u}_r. \quad (5.62)$$

Además, teniendo en cuenta que la corriente total  $I$  emitida por el electrospray debe ser finita, la corriente sólo podrá ser emitida desde una pequeña parte de la superficie de emisión cercana al vértice ( $r \leq R_s$ ); esto es, la superficie de emisión debe estar acotada y viene representada, más propiamente, por la superficie  $r \leq R_s, \theta = \zeta$ , donde  $R_s < \infty$  denota el tamaño de dicha superficie. De esta forma, la condición de conservación de la carga (ecuación (5.54)) debe ser modificada con objeto de incluir la contribución de la densidad de corriente superficial  $\mathbf{J}_s$ , esto es,

$$I = \int_S (\mathbf{J} + \mathbf{J}_s \delta_s) \cdot \mathbf{n} \, da, \quad (5.63)$$

donde  $S$  es una superficie regular que englobe por completo a la superficie singular de emisión, pero arbitraria por los demás, y  $\delta_s$  es la función delta superficial correspondiente a la superficie singular de emisión. En nuestro caso particular, usando el hecho de que  $\delta_s = \delta(\theta - \zeta)/r$  es la función delta superficial correspondiente a la superficie cónica  $\theta = \zeta$  [2], donde  $\delta$  denota la función delta de Dirac, y eligiendo como superficie de integración  $S$  la dada por la superficie esférica de radio  $R_s$  y centro el vértice del cono, la condición anterior se reduce a

$$I = 2\pi R_s^2 \left( \frac{J_s}{R_s} \sin \zeta + \int_0^\zeta J_r \sin \theta \, d\theta \right). \quad (5.64)$$

El hecho de introducir una densidad superficial de carga  $\omega$  y una densidad superficial de corriente  $\mathbf{J}_s$  obliga a resolver el problema en sentido de distribuciones. No obstante, del análisis de las condiciones de contorno sobre la superficie de emisión obtendremos una inconsistencia en la condición de conservación de la carga (ver debajo).

Sobre la superficie de emisión  $r \leq R_s, \theta = \zeta$  debemos imponer dos condiciones de contorno:

- Primero, puesto que existe una densidad de carga superficial sobre la superficie de emisión, esperamos una discontinuidad en la componente normal del campo eléctrico  $\mathbf{E}$  sobre esta superficie [31]. En particular,

$$\omega = \epsilon_0 \mathbf{E} \cdot \mathbf{u}_\theta|_{(r < R_s, \theta \rightarrow \zeta_+)} - \epsilon_0 \mathbf{E} \cdot \mathbf{u}_\theta|_{(r < R_s, \theta \rightarrow \zeta_-)}. \quad (5.65)$$

Recordando que  $p'(x_{\zeta_+}) = 0$ , tenemos que  $E_\theta = 0$  cuando  $\theta \rightarrow \zeta_-$  y la relación anterior en nuestro caso se reduce a

$$\omega = \epsilon_0 \mathbf{E} \cdot \mathbf{u}_\theta|_{(r < R_s, \theta \rightarrow \zeta_+)}. \quad (5.66)$$

- Por otra parte, teniendo en cuenta que  $n = 0$  en la región  $\zeta < \theta < \pi - \alpha$ , la condición de conservación de la carga sobre la superficie de emisión implica que

$$\nabla_s \cdot \mathbf{J}_s = \mathbf{u}_\theta \cdot \mathbf{J}|_{(r < R_s, \theta \rightarrow \zeta_-)}, \quad (5.67)$$

donde  $\nabla_s$  denota la divergencia superficial [2].

Consideremos la condición (5.66). Esta condición implica, a su vez, una discontinuidad en la derivada de la función  $p(x)$  en el punto singular  $z = x_\zeta$ . En efecto, usando la tabla 5.1, tenemos que la ecuación (5.66) lleva al resultado

$$\omega(\tilde{r}) = -\epsilon_0 E_{sc} (1 - x_\zeta^2)^{1/2} p'(x_{\zeta-}) \tilde{r}^{-1/2} \quad (\tilde{r} \leq \tilde{R}_s). \quad (5.68)$$

Consideremos ahora la condición (5.67). Insertando (5.68) en la ecuación (5.62) y calculando la divergencia superficial de  $\mathbf{J}_s$ , obtenemos que el primer miembro de la ecuación (5.67) está dado por

$$\nabla_s \cdot \mathbf{J}_s = -\frac{15\sqrt{2}}{16} \cdot \frac{I}{\ell^2} (1 - x_\zeta^2)^{1/2} p'(x_{\zeta-}) F(x_\zeta) \tilde{r}^{-5/4} \quad (\tilde{r} < \tilde{R}_s). \quad (5.69)$$

Por otra parte, por medio de la tabla 5.1, se obtiene el segundo miembro de la ecuación (5.67):

$$\mathbf{u}_\theta \cdot \mathbf{J}|_{(r < R_s, \theta \rightarrow \zeta-)} = -2^{1/2} \cdot \frac{I}{\ell^2} (1 - x_\zeta^2)^{-1/2} L_\zeta \tilde{r}^{-5/4} \quad (\tilde{r} < \tilde{R}_s), \quad (5.70)$$

donde  $L_\zeta$  es el límite definido en (5.58). En total, de la ecuación (5.67) obtenemos el resultado

$$p'(x_{\zeta-}) = \frac{16 L_\zeta}{15 (1 - x_\zeta^2) F(x_\zeta)}. \quad (5.71)$$

Recordemos que  $F(x_\zeta) > 0$  y  $L_\zeta > 0$  y esto implica  $p'(x_{\zeta-}) > 0$ . Así, por medio de la ecuación (5.68) encontramos que  $\omega < 0$ . Este resultado es absurdo porque la carga emitida desde el vértice del cono es positiva, lo que implica que la densidad de carga superficial  $\omega$  también debe ser positiva.

En resumen, del análisis realizado encontramos que la emisión de un electro spray desde el vértice de un cono de Taylor es físicamente imposible, al menos bajo la condición de un campo de velocidades irrotacional (ecuación (3.9)).

## Discusión

Después de todo el recorrido hecho hasta ahora se habrá podido comprobar que el SEM es un modelo matemático sencillo, pero a la vez riguroso, y supone una idealización bastante razonable en el límite de una conductividad eléctrica infinita. De hecho, ha proporcionado unos resultados físicamente admisibles para explicar el proceso de la vaporización iónica desde superficies líquidas cónicas cerca del vértice. Por contra, lleva a contradicción cuando se intenta aplicar al caso límite de emisión desde el propio vértice. La principal conclusión es que el SEM no permite explicar el fenómeno de la emisión limitada por distribución de carga espacial en interfases líquidas perfectamente cónicas. En este sentido, sería interesante hacer una pequeña reflexión sobre las posibles causas que impiden la descripción de este fenómeno dentro del SEM.

Debemos recordar que la condición de un campo de velocidades irrotacional en el problema presente es correcta sólo si se cumplen ciertas condiciones: régimen estacionario, simetría azimutal, conductividad eléctrica infinita y emisión de partículas con la misma velocidad, las cuales se han asumido por hipótesis. No obstante, la emisión de carga desde el vértice del cono es un fenómeno crítico muy singular en el que caben demasiadas posibilidades. Así, admitir

tantas condiciones supone una idealización excesiva y puede ser el motivo de la contradicción encontrada. En particular, la condición de que todas las gotas sean emitidas desde el vértice con la misma velocidad (cero en nuestro caso) quizá sea una condición muy restrictiva que no tenga por qué cumplirse. De esta forma, si esta condición no se cumple, entonces no es correcto inferir que el campo de velocidades del electrospray derive de un potencial, lo que invalida el SEM.

En último término, la suposición de que todas las partículas sean emitidas desde el vértice con la misma velocidad tiene su origen en la propia geometría del problema. En efecto, esta hipótesis es consecuencia de admitir que todas las partículas son emitidas con la misma energía mecánica (dada por la suma de su energía cinética y potencial eléctrica). Así, puesto que la superficie del cono es equipotencial, se deduce que la velocidad de emisión de todas las partículas tendría que ser la misma. No obstante, en la realidad los líquidos tienen una conductividad alta (pero siempre finita) y los experimentos muestran que el electrospray no se emite desde un punto, sino más bien desde un *jet* (chorro o filamento) de longitud finita (ver, entre otros, [8, 9] y [23]), de forma que las gotas se forman por rotura del *jet*. La velocidad de salida de las gotas depende de su energía potencial en el punto desde el cual son emitidas, y el valor de esta energía depende, a su vez, de la posición que ocupa dicho punto en el *jet* [26]. Como las gotas son emitidas desde distintos puntos del *jet*, su velocidad, en principio, no tiene por qué ser la misma. De esta forma, en el caso límite en el que todas las gotas se emitan desde el mismo punto, deberíamos tener que todas las gotas son emitidas con la misma velocidad, condición que llevada a nuestro caso parece controvertida.

Por tanto, es posible que el origen último de la dificultad encontrada al intentar explicar el fenómeno de la emisión limitada por carga espacial desde superficies líquidas cónicas haya que buscarlo en la propia geometría de la superficie líquida que hemos considerado. Esto puede quedar definitivamente confirmado si tenemos en cuenta que el campo eléctrico  $\mathbf{E}$  cerca de interfases líquidas cónicas debe variar como  $E \propto r^{-1/2}$  y, por tanto, es singular en el vértice del cono  $r = 0$ , imposibilitando, posiblemente, la emisión de carga en el límite de un campo externo nulo. Puede ser, entonces, que si relajamos la suposición ideal de que la superficie del cono de Taylor no se modifica por efectos de carga espacial, la emisión limitada por carga espacial sea físicamente posible. Si la interfase líquida no es cónica, la ecuación de balance sobre la interfase incorpora un término de presión. De esta forma, el campo eléctrico sobre la superficie de la interfase líquida desde la que se emite la carga podría ser, eventualmente, nulo, pues la presión ejercida por el líquido puede, en este caso, contrarrestar la presión capilar. Así, considerando la posibilidad de que la interfase líquida no es necesariamente cónica, el fenómeno de emisión limitada por carga espacial podría ser explicado dentro del SEM. No obstante, en tal caso, la alta simetría que teníamos para un cono líquido perfecto se rompe y, aunque el SEM podría ser formalmente aplicado, no podríamos esperar una solución sencilla dada en términos de funciones autosemejantes. Más bien, cabe la posibilidad de que la descripción de este problema (considerablemente más complejo que el asumido en este trabajo) pudiera hacerse mediante un desarrollo perturbativo. En este desarrollo, cada término proporcionaría una corrección del anterior y, en particular, la solución del SEM en términos de funciones autosemejantes representaría el orden más bajo de dicho desarrollo, en el cual la superficie emisora se aproximaría por un punto. En cualquier caso, este problema queda fuera del marco de este trabajo y no será considerado.





# Capítulo 6

## Aplicación del SEM para la dispersión de carga desde un filamento

### 6.1. Geometría y problema angular

Investigaremos ahora el caso límite en el que la emisión de iones ocurra desde la superficie lateral de un cono líquido infinitamente agudo (esto es,  $\alpha \rightarrow 0$ ); en este caso, el cono líquido degenera, en realidad, en un chorro o filamento líquido ocupando todo el semieje negativo. En principio, del resultado de que el ángulo  $\alpha$  está acotado por los valores  $\alpha_M$  y  $\alpha_T$  (ver capítulo 5) podría inferirse que esta posibilidad es físicamente imposible. Pero esto no es así, como fácilmente se puede comprobar. En efecto, la acotación del valor del ángulo  $\alpha$  es consecuencia directa de imponer el cumplimiento exacto de la condición de equilibrio mecánico sobre la superficie del cono. Pero, en el caso de un filamento líquido semi-infinito no tenemos la restricción de la condición de equilibrio mecánico, la cual debe ser reemplazada por la condición de que la componente angular del campo eléctrico diverja sobre el filamento.

Por otra parte, el estudio de este problema es de interés de cara a estudios teóricos futuros sobre la vaporización de iones en un cono-chorro. En efecto, como se comentó en el capítulo 2, la hipótesis de considerar que la carga se emite desde un cono líquido perfecto no es del todo realista, porque la forma cónica cerca del vértice es modificada por efectos de carga espacial [15]. En particular, lo que usualmente se ve en los experimentos de electrosprays en vacío es un *cone-jet* [8, 9] o cono-chorro (ver figura 2.1), esto es, un cono líquido que emite un chorro o filamento muy delgado (*jet*), bastante estable y de longitud finita, el cual se rompe y genera el spray de gotas cargadas. En este sentido, conviene recordar que el régimen *cone-jet* es el más estudiado tanto desde el punto de vista teórico como desde el punto de vista experimental por ser el más interesante en las aplicaciones [13]. En particular, los estudios muestran que el radio del chorro disminuye conforme se consideran líquidos más conductores [16], encontrando chorros infinitamente delgados en el límite de líquidos infinitamente conductores. Como se ha dicho, la longitud del chorro es finita y en el problema ideal que nosotros vamos a estudiar consideraremos un filamento líquido semi-infinito e infinitamente conductor. No obstante, como se discutirá al final de este capítulo, los resultados obtenidos del análisis de este problema ideal podrían ser válidos cerca del vértice del *jet*.

La geometría del problema que vamos a estudiar se muestra en la figura 6.1. En este problema

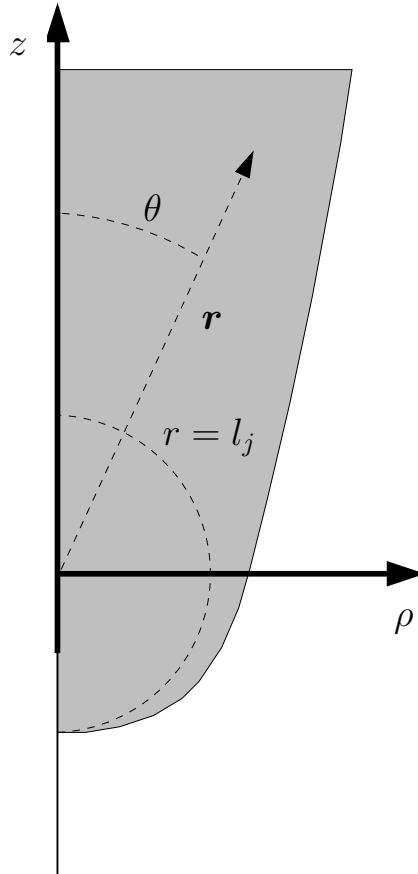


Figura 6.1: Emisión desde un filamento líquido.

asumimos que el electrospray es emitido desde un cono de Taylor infinitamente agudo, el cual puede asimilarse a un filamento infinitamente delgado ocupando todo el semieje negativo,  $\theta = \pi$ . En particular, suponemos que la emisión ocurre desde una cierta porción del filamento líquido de longitud  $l_j$  y que incluye el vértice. De esta forma, la superficie de emisión degenera realmente en el segmento definido por  $r \leq l_j, \theta = \pi$  y que denominaremos, más propiamente, *línea de emisión*. Además, se asume (otra vez) que todas las gotas son emitidas con velocidad inicial nula. Es importante observar que este problema puede verse como un caso particular del problema general formulado en la sección 3.3 en el límite en el que el semiángulo del cono de Taylor  $\alpha$  tienda a cero, esto es,  $\alpha \rightarrow 0$ . Esto, en principio, deja como único parámetro del problema a la longitud  $l_j$ , la cual no es conocida a priori y debería obtenerse del análisis como parte de la solución. Claramente, este problema ideal corresponde físicamente a un problema de emisión por efecto de campo en un filamento líquido semi-infinito e infinitamente conductor.

Es importante recordar que en el problema general se encontraba que la función densidad numérica  $n$  tendía a infinito sobre la superficie de emisión. Este resultado era consecuencia de la condición de conservación de la carga, al imponer que la intensidad de corriente  $I$  es finita a la vez que la velocidad con la que son emitidos las partículas es cero. Por la misma razón, este mismo comportamiento singular de la función  $n$  debe esperarse en el caso límite presente, en esta ocasión sobre el segmento de emisión  $r \leq l_j, \theta = \pi$ . Esta singularidad de la densidad de carga espacial puede resolverse usando el método basado en soluciones autosemejantes del SEM

que empleamos en el caso general. Como entonces, la solución que obtengamos en términos de funciones de semejanza proporciona sólo la forma asintótica de los tres campos escalares  $\psi$ ,  $\phi$  y  $n$  cerca del vértice o extremo del filamento (el cual se localiza en el punto  $r = 0$ ), donde la simetría del problema es muy alta. Esta solución asintótica podría usarse después para iniciar la correspondiente integración numérica del problema que permita prolongar la solución a distancias mayores del vértice. El estudio que realizaremos en este capítulo se centrará precisamente en la resolución de la singularidad por medio de funciones autosemejantes del SEM en coordenadas esféricas. Veamos, primero, cómo se formula el correspondiente problema angular.

### Formulación del problema angular

Asumiendo la hipótesis de autosemejanza, la forma matemática de todos los campos es la que se muestra en la tabla 5.1. En particular, los tres campos escalares  $\psi$ ,  $\phi$  y  $n$  vienen dados por las ecuaciones (5.7)-(5.9):

$$\tilde{\psi} = 2^{1/2} \tilde{r}^m F(x), \quad (6.1)$$

$$\tilde{\phi} = -\tilde{r}^{2m-2} p(x), \quad (6.2)$$

$$\tilde{n} = \tilde{r}^{2m-4} N(x), \quad (6.3)$$

donde, como es usual,  $x = \cos \theta$  y  $m$  es un número real a determinar. El valor de este exponente para el caso de una interfase líquida con forma cónica ( $m = 5/4$ ) se obtenía por medio de la condición de equilibrio mecánico, dada por el balance exacto entre la tensión eléctrica y la tensión superficial sobre la interfase (ver ecuación (5.13)). Como ya hemos dicho, en el caso límite presente la interfase líquida degenera en un filamento semi-infinito sobre el que la componente angular del campo eléctrico tiende a infinito; de esta forma, la condición de equilibrio mecánico ya no puede usarse para calcular el valor de  $m$ , el cual queda entonces pendiente de obtener (ver debajo).

El sistema de EDOs para las funciones angulares está dado por las ecuaciones (5.10)-(5.12). Debemos notar que en el problema presente la carga es emitida desde el filamento ( $x = -1$ ) hacia el semieje positivo ( $x = 1$ ). Entonces, en la solución de la ecuación (5.10) se debe elegir el signo positivo para  $F'(x)$ . Teniendo en cuenta esto, el sistema angular está dado por las ecuaciones

$$\frac{dF}{dx} = \left( \frac{p - m^2 F^2}{1 - x^2} \right)^{1/2}, \quad (6.4)$$

$$(2m - 2)(2m - 1)p + \frac{d}{dx} \left( (1 - x^2) \frac{dp}{dx} \right) = N, \quad (6.5)$$

$$3m(m - 1)NF + \frac{d}{dx} \left( (1 - x^2) N \frac{dF}{dx} \right) = 0. \quad (6.6)$$

Por otra parte, el sistema (6.4)-(6.6) debe acompañarse de las condiciones de contorno sobre el filamento líquido ( $x = -1$ ) y las usuales condiciones de regularidad en el semieje positivo ( $x = 1$ ), dadas por las ecuaciones (5.15). En particular, las condiciones de contorno en  $x = -1$

se deducen con facilidad a partir de las condiciones de contorno sobre la superficie del cono líquido  $\theta = \pi - \alpha$  (ver ecuación (3.100)) tomando límite  $\alpha \rightarrow 0$ , y están dadas por:

$$p(-1) = 0, \quad \lim_{x \rightarrow -1+} p'(x) = +\infty, \quad F(-1) = 0. \quad (6.7)$$

Notar que la condición de equilibrio mecánico impone sólo que la componente angular del campo eléctrico  $E_\theta$  se haga infinita sobre el filamento,  $\tilde{E}_\theta \Big|_{(\tilde{r}, \theta \rightarrow \pi_-)} = -\infty$ , lo que, a su vez, conduce finalmente a que la función  $p(x)$  diverja en  $x = -1$ .

Por otra parte, la forma autosemejante de la condición de conservación de la carga en este problema se obtiene de la condición general (3.95) pero considerando, en este caso, una esfera de radio adimensional  $\tilde{l}_j \equiv l_j/\ell$  para evaluar la integral de superficie. El resultado es:

$$2^{3/2}\pi m \tilde{l}_j^{3(m-1)} \int_{-1}^1 N(x) F(x) dx = 1. \quad (6.8)$$

Como en el caso general, la integral de la ecuación (6.8) puede ser computada por medio de una integración directa de la ecuación (6.6); de esta forma, la ecuación anterior (6.8) se puede escribir en la forma

$$\tilde{l}_j^{3(m-1)} = \frac{3(m-1)}{2^{3/2}\pi (L(-1) - L(1))}, \quad (6.9)$$

donde, otra vez, se ha definido  $L(x) \equiv (1 - x^2) N(x) F'(x)$ .

En resumen, el problema angular para la emisión de carga desde el filamento líquido semi-infinito consiste en la resolución del sistema angular (6.4)-(6.6) en el intervalo  $-1 < x < 1$  junto con las condiciones en  $x = -1$  (ecuación (6.7)), las condiciones de regularidad en el semieje positivo  $x = 1$  (ecuación (5.15)) y la condición de conservación de la carga (6.9). El valor del exponente  $m$  deberá obtenerse como parte de la solución de este problema.

## 6.2. Integración numérica del problema angular

El problema angular formulado antes debe ser integrado de forma numérica. No obstante, como ya se habrá advertido, el sistema angular (6.4)-(6.6) presenta singularidades en los puntos  $x = -1$  y  $x = 1$ . Para solventar la dificultad, vamos a proceder como en el caso general, esto es, consideraremos el correspondiente problema de valores iniciales en la interfase líquida (en el caso presente, el punto singular  $x = -1$ ) e impondremos que la solución cumpla las condiciones de regularidad en el semieje positivo (es decir, el punto singular  $x = 1$ ). Una dificultad añadida que presenta la integración del problema angular es que, en este caso, el valor del exponente  $m$  no es conocido y debe obtenerse una vez resuelto el problema.

El problema de valores iniciales que debemos considerar consta del sistema angular (6.4)-(6.6) junto con las condiciones de contorno en el punto  $x = -1$  (ecuaciones (6.7)). Una propiedad notable que se deduce de forma inmediata es que este problema de valores iniciales es un problema homogéneo. Esto es, si  $p(x)$ ,  $F(x)$  y  $N(x)$  es una solución de este problema de valores iniciales, entonces  $a p(x)$ ,  $a^{1/2} F(x)$  y  $a N(x)$  (donde  $a > 0$  es una constante arbitraria) también es solución del problema. La conclusión es que, fijado el valor de  $m$ , la solución del problema (en el caso de que exista) es única salvo un factor constante.

Puesto que el punto  $x = -1$  es singular, el cálculo numérico no puede iniciarse en dicho punto, sino en una posición ligeramente desplazada:  $x = -1 + \varepsilon$ , con  $\varepsilon \ll 1$ . Esto requiere conocer la forma asintótica de las tres funciones angulares cerca de la singularidad. En este sentido, es claro que, con independencia del valor de  $m$  que se fije, el único comportamiento asintótico en  $x = -1$  compatible con las condiciones de contorno en dicho punto (ver ecuaciones (6.7)) es el dado por el equivalente a la Opción 1A (ver tabla 5.2) pero en el semieje negativo  $x = -1$ . Además, puesto que la carga es emitida ( $F_1 \geq 0$ ) hacia el semieje positivo ( $F_0 > 0$ ), debemos considerar la Opción 1A con  $s = 1$  y signo positivo para  $F_0$ . En total, el comportamiento asintótico de las funciones angulares cuando  $x \rightarrow -1_+$  está dado por

$$F(x) \simeq \frac{9N_1^{1/2}}{4} (1+x)^{2/3}, \quad (6.10)$$

$$p(x) \simeq \frac{9N_1}{2} (1+x)^{1/3}, \quad (6.11)$$

$$N(x) \simeq N_1 (1+x)^{-2/3}, \quad (6.12)$$

y, como podemos ver, depende de un sólo parámetro:  $N_1 > 0$ . Notemos que  $N(x) \rightarrow +\infty$  cuando  $x \rightarrow -1_+$ , lo cual era de esperar recordando que la función  $n$  debía tender a infinito sobre el filamento líquido desde el cual se emite los iones.

El comportamiento asintótico de las funciones angulares en el punto  $x = -1$  debe usarse, entonces, para iniciar la integración numérica del problema angular en el punto desplazado  $x = -1 + \varepsilon$ , una vez que el valor de  $m$  haya sido fijado. La propiedad de homogeneidad que presenta el problema de valores iniciales implica que, para cada valor de  $m$ , los distintos valores de  $N_1 > 0$  llevan a la misma solución del problema, salvo constante.

### Cálculo del exponente $m$

La integración numérica del problema de valores iniciales sólo puede hacerse una vez el valor del parámetro  $m$  haya sido fijado. Como se ha comentado anteriormente, el valor o valores de  $m$  físicamente admisibles para el problema presente son desconocidos a priori y deben calcularse como parte de la solución. Estos valores son obtenidos después de imponer ciertos requerimientos físicos (ver debajo).

En primer lugar, en el punto  $x = 1$  debemos requerir que la solución cumpla las condiciones de regularidad (5.15). Teniendo en cuenta la propiedad de homogeneidad del problema de valores iniciales, es evidente que la regularidad de cualquier solución que sea obtenida tras resolver dicho problema depende sólo del valor de  $m$ , pero no del valor del coeficiente  $N_1$ . Por tanto, de aquí inferimos que los valores de  $m$  con significado físico en el problema deben encontrarse necesariamente entre aquellos que conduzcan a una solución regular en  $x = 1$ .

La condición de regularidad de las soluciones en  $x = 1$  constituye, entonces, un primer criterio de búsqueda de  $m$ . No obstante, es posible deducir más condiciones necesarias que debe cumplir cualquier valor de  $m$  físicamente admisible en este problema estudiando cómo debe ser la dependencia radial de los campos (ver tabla 5.1) en el sistema físico que estamos estudiando.

- Por una parte, el filamento líquido está a potencial eléctrico cero y las gotas son emitidas desde allí con velocidad inicial nula. Esto, en particular, debe ser cierto en el extremo  $\tilde{r} = 0$ . En consecuencia, debemos tener  $m > 1$ .

- Por otra parte, podemos deducir otra condición relacionando el sistema físico presente con el electrospray. En este sentido, recordemos que el filamento líquido es, en realidad, una aproximación más o menos realista al *jet* o chorro que se expelle desde el vértice del cono de Taylor y que se observa usualmente en los experimentos. Además, en la vecindad del vértice ( $\tilde{r} < 1$ ) los efectos de carga espacial son dominantes [15] y, por eso, la repulsión eléctrica entre las gotas es la fuerza dominante [23]. Esto implica que en la región  $\tilde{r} < 1$  el campo eléctrico externo (que tiene ley  $\tilde{r}^{-1/2}$ ) es despreciable comparado con el campo eléctrico producido por la distribución de carga espacial (con ley  $\tilde{r}^{2m-3}$ ). En consecuencia,  $2m - 3 < -1/2$ , es decir,  $m < 5/4$ .

En resumen, concluimos que los valores del exponente  $m$  físicamente relevantes para nuestro problema deben encontrarse necesariamente en el intervalo

$$1 < m < \frac{5}{4}. \quad (6.13)$$

Lo anterior proporciona la siguiente estrategia para el cálculo numérico del exponente o exponentes  $m$  físicamente relevantes en el problema:

1. Fijar un valor arbitrario y positivo para el coeficiente  $N_1$  (por ejemplo  $N_1 = 1$ ) en el comportamiento asintótico de  $N(x)$  en el filamento líquido (ecuaciones (6.10)-(6.12)).
2. Fijar un valor de  $m$  que se encuentre en el intervalo de interés,  $m \in (1, 5/4)$ .
3. Integrar el sistema angular entre  $x = -1 + \varepsilon$  y  $x = 1$  como un problema de valores iniciales, con condiciones iniciales  $F(-1 + \varepsilon)$ ,  $p(-1 + \varepsilon)$ ,  $N(-1 + \varepsilon)$  y  $p'(-1 + \varepsilon)$  obtenidas de las ecuaciones (6.10)-(6.12).
4. Verificar si la solución numérica obtenida cumple las condiciones de regularidad en  $x = 1$  (ecuaciones (5.15)). En caso afirmativo, el valor de  $m$  prescrito en el paso 2 es físicamente admisible; en caso contrario, debe ser descartado.

La estrategia anterior ha sido usada fijando, en todos los cálculos, el valor  $\varepsilon = 10^{-9}$  (la independencia de los resultados con  $\varepsilon$  fue también comprobada). Una vez recorrido todo el rango de valores de  $m$  en el intervalo de interés (6.13), se encuentra un único valor  $m = m_j$  en dicho intervalo que lleva a una solución que cumple las condiciones de regularidad en  $x = 1$ . Veamos, con detalle, los resultados obtenidos.

La discusión del problema de valores iniciales se realiza de una forma muy similar a la que se hizo en su momento en el respectivo problema para el caso  $\alpha > 0$  (ver sección 5.4). En el caso presente, la solución numérica del problema de valores iniciales alcanza siempre una singularidad en un cierto punto  $x = x_\eta \leq 1$ , donde  $x_\eta$  depende sólo del valor de  $m$  que haya sido fijado. Dependiendo de la localización de esta singularidad y del correspondiente comportamiento asintótico, encontramos tres posibles casos (1, 2 y 3). En los Casos 1 y 2 la singularidad está localizada en el semieje positivo ( $x_\eta = 1$ ). No obstante, hay una diferencia sustancial entre ambos casos en lo que se refiere al comportamiento asintótico en el punto  $x = 1$ . En el Caso 1 encontramos que las tres funciones no están acotadas en  $x = 1$  (mostrando singularidades que no pueden describirse mediante leyes de potencias) y, por tanto, la solución

no es regular en  $x = 1$ . En consecuencia, el Caso 1 no es físicamente aceptable. En cambio, en el Caso 2 el comportamiento asintótico corresponde a la Opción 1C (ver tabla 5.2) y la solución obtenida cumple las condiciones de regularidad en el punto  $x = 1$ . Por tanto, el Caso 2 es físicamente admisible. En el Caso 3 la singularidad está localizada en  $x_\eta < 1$  con  $F'(x_\eta) = p'(x_\eta) = N(x_\eta) = 0$  y corresponde, entonces, al análogo “por la izquierda” de la Opción  $\beta D$  (ver tabla 5.3). Puesto que, por hipótesis, la carga eléctrica sólo es emitida desde el semieje  $x = -1$ , encontramos que  $N(x) = 0$  para  $x_\eta < x \leq 1$ . Esto implica inmediatamente que la función  $p(x)$  no está acotada en  $x = 1$  (recordar el razonamiento que hicimos en el problema anterior) y, entonces, no satisface la condición de regularidad en dicho punto. De esta forma, el Caso 3 es físicamente inadmisibles.

Nuestros resultados muestran que el caso físicamente aceptable (Caso 2) se obtiene sólo para un único valor del parámetro  $m$  en el intervalo de interés (6.13), el cuál está dado por  $m = m_j \simeq 1,1846$ . Además, si  $1 < m < m_j$  sólo se encuentra el Caso 1 y si  $m_j < m < 5/4$  sólo se encuentra el Caso 3.

En resumen, de todo el análisis anterior se concluye que existe un único valor de  $m$  físicamente admisible para nuestro problema dado por

$$m = m_j \simeq 1,1846. \quad (6.14)$$

Para este valor de  $m$ , el comportamiento asintótico observado cuando  $x \rightarrow 1_-$  es el correspondiente a la Opción 1C(+) con  $s = +1$ , es decir, está dado por

$$F(x) \simeq p_1^{1/2} \left[ \frac{1}{m_j} + \frac{1}{2} \left( -m_j + \sqrt{-3m_j^2 + 6m_j - 2} \right) (1 - x) \right], \quad (6.15)$$

$$p(x) \simeq p_1 \left[ 1 + (-2m_j^2 + 3m_j - 1) (1 - x) \right], \quad (6.16)$$

$$N(x) \simeq N_1 (1 - x)^{\lambda_j}, \quad (6.17)$$

donde  $\lambda_j$  se obtiene eligiendo el signo + en la ecuación (5.28):

$$\lambda_j \equiv \frac{3(1 - m_j)}{-m_j + \sqrt{-3m_j^2 + 6m_j - 2}} - 1 \simeq 1,3358. \quad (6.18)$$

Como se observa, las tres funciones angulares  $F(x)$ ,  $p(x)$  y  $N(x)$  cumplen las condiciones de regularidad en el punto  $x = 1$ . En particular, tanto la función  $N(x)$  como su derivada se anulan en  $x = 1$ .

### Relación entre el coeficiente $N_1$ y la longitud adimensional $\tilde{l}_j$

Es posible obtener una relación directa entre el coeficiente  $N_1$  y la longitud adimensional de la línea de emisión,  $\tilde{l}_j$ , para el exponente físicamente relevante,  $m = m_j$  (ecuación (6.14)). Esta relación se obtiene por medio de la ecuación de conservación de la carga (6.9) (ver debajo).

En primer lugar, teniendo en cuenta que el comportamiento asintótico cuando  $x \rightarrow -1_+$  (ecuaciones (6.10)-(6.12)) es el dado por la Opción 1A, se obtiene que  $L(-1) = L_{-1} = 3N_1^{3/2}$  (ver tabla 5.2). Por otra parte, para el valor  $m = m_j$  la solución cumple las condiciones de



regularidad en  $x = 1$ , lo que implica de inmediato que  $L(1) = L_1 = 0$ . En total, usando la ecuación (6.9), se obtiene la relación

$$N_1 = \frac{1}{2} \left( \frac{m_j - 1}{\pi} \right)^{2/3} \tilde{l}_j^{2-2m_j} \simeq 0,0756 \tilde{l}_j^{-0,3692}, \quad (6.19)$$

la cual, en particular, proporciona el valor de la amplitud  $N_1$  como función de la longitud sin dimensiones  $\tilde{l}_j$ .

La ecuación (6.19) permite obtener la solución para un valor prescrito de  $\tilde{l}_j > 0$ . En efecto, fijado el valor de  $\tilde{l}_j$ , basta resolver numéricamente el problema de valores iniciales con  $m = m_j$  y con el valor  $N_1$  obtenido por medio de la ecuación (6.19).

### 6.3. Resultados y discusión

El análisis mostrado anteriormente muestra que existe un único valor del exponente  $m = m_j \simeq 1,1846$  físicamente admisible para el problema presente. Para dicho valor de  $m$ , encontramos  $\phi \propto r^{0,3692}$ ,  $n \propto r^{-1,6308}$ ,  $\mathbf{v} \propto r^{0,1846}$ ,  $\mathbf{E} \propto r^{-0,6308}$ ,  $\mathbf{J} \propto r^{-1,4462}$ . Además, para dicho valor de  $m$  encontramos una infinidad de soluciones del problema angular, las cuales son obtenidas dando valores positivos a la longitud adimensional  $\tilde{l}_j$  y que cumplen la propiedad de diferir sólo en una constante. De esta forma, el valor  $\tilde{l}_j$  representa simplemente un factor de escala de las funciones angulares, el cual queda determinado en un caso práctico real por medio de la longitud finita de la línea de emisión.

Debemos notar que, a pesar de tener una infinidad de soluciones dependiendo del parámetro  $\tilde{l}_j$ , es suficiente con conocer la solución para un sólo valor de  $\tilde{l}_j$  pues, en ese caso, la solución para cualquier otro valor de  $\tilde{l}_j$  se calcula sin dificultad multiplicando por el correspondiente factor de escala. Este factor de escala se obtiene por medio de la ecuación (6.19). En particular, supongamos que la solución para  $\tilde{l}_j = 1$  es conocida y está dada por las funciones angulares  $F(x) = F_0(x)$ ,  $p(x) = p_0(x)$  y  $N(x) = N_0(x)$ . Entonces, la solución para un valor arbitrario  $\tilde{l}_j = k > 0$  es inmediatamente conocida a partir de la anterior, pues es la dada por las funciones  $F(x) = a^{1/2} F_0(x)$ ,  $p(x) = a p_0(x)$  y  $N(x) = a N_0(x)$  donde el factor de escala  $a$  está dado por  $a = k^{2-2m_j} \simeq k^{-0,3692}$ . La representación gráfica de las funciones angulares para el caso  $\tilde{l}_j = 1$  se muestra en la figura 6.2. Observar, de nuevo, el resultado de “haz hueco”.

Por otra parte, las trayectorias de las gotas se obtienen de una forma totalmente análoga al problema general de la vaporización iónica desde la superficie de un cono líquido (ver fórmula (5.45)). No obstante, en el caso presente tenemos que  $m = m_j$  y fijamos la condición inicial sobre la línea de emisión  $r \leq l_j, \theta = \pi$ . La fórmula que resulta es la siguiente:

$$\tilde{r}(x) = \tilde{r}_0 \left( \frac{L_1}{(1-x^2) N(x) F'(x)} \right)^{1/[3(m_j-1)]}, \quad (6.20)$$

donde  $L_1 = 3N_1^{3/2}$  corresponde, en este caso, al valor límite de  $(1-x^2) N(x) F'(x)$  en  $x = -1$  (ver tabla 5.2). Notar, además, que diferentes valores de la condición inicial  $r_0$  (con  $r_0 \leq l_j$ ) llevan a diferentes trayectorias. En la figura 6.3 se muestran las trayectorias obtenidas para el valor  $\tilde{l}_j = 1$ . Las trayectorias han sido calculadas a través de la ecuación (6.20) y corresponden

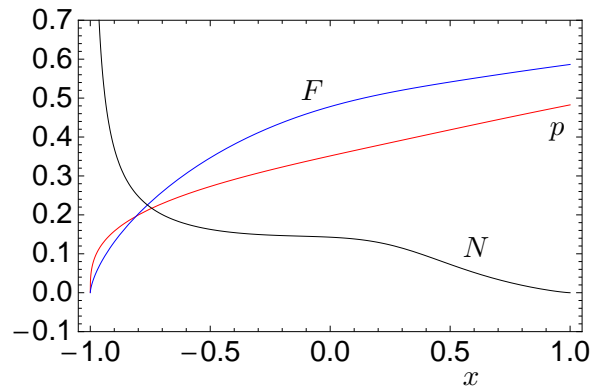


Figura 6.2: Funciones angulares correspondientes al problema de la emisión de carga desde un filamento líquido semi-infinito para el valor  $\tilde{l}_j = 1$ . Usando (6.19), obtenemos, para este caso,  $N_1 = 7,5573 \times 10^{-2}$ .

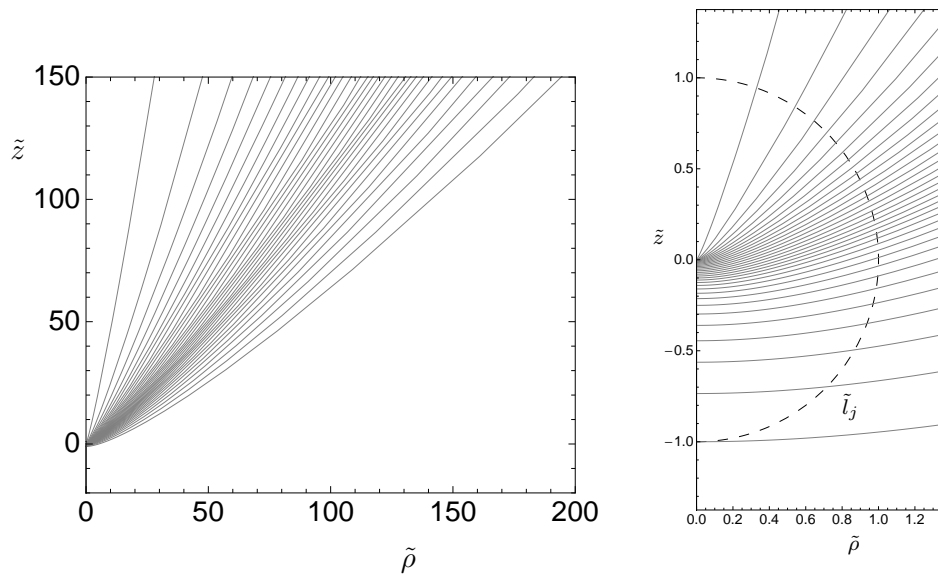


Figura 6.3: Trayectorias de las gotas correspondientes al problema de la emisión de carga desde un filamento líquido semi-infinito para el valor  $\tilde{l}_j = 1$ . El detalle cerca de la región del vértice se muestra para valores de  $r$  de orden  $l_j$  (derecha), mientras que la panorámica general se muestra para valores de  $r$  de orden  $100 l_j$  (izquierda).

a varias condiciones iniciales entre  $\tilde{r}_0 = 0$  (no incluida) and  $\tilde{r}_0 = \tilde{l}_j$  (incluida). El criterio de selección de las condiciones iniciales es el mismo que el usado en el problema general y, de esta forma, la densidad de líneas es proporcional a la densidad numérica de gotas. Por otra parte, como era de esperar, las trayectorias son ortogonales a la línea de emisión.

El análisis estadístico de la distribución de la carga eléctrica se obtiene de una forma idéntica al problema general. En este caso, el ángulo promedio  $\langle\theta\rangle$  viene dado por

$$\langle\theta\rangle = \frac{\int_{-1}^1 \arccos x N(x) dx}{\int_{-1}^1 N(x) dx}. \quad (6.21)$$

La desviación estándar viene dada por  $\Delta\theta = (\langle\theta^2\rangle - \langle\theta\rangle^2)^{1/2}$ , donde

$$\langle\theta^2\rangle = \frac{\int_{-1}^1 (\arccos x)^2 N(x) dx}{\int_{-1}^1 N(x) dx}. \quad (6.22)$$

Evidentemente, los dos parámetros ( $\langle\theta\rangle$  y  $\Delta\theta$ ) son completamente independientes del valor de  $\tilde{l}_j$  prescrito. En particular, según nuestros cálculos, el ángulo promedio toma el valor  $\langle\theta\rangle = 126,2^\circ$  y la desviación estándar vale  $\Delta\theta = 38,28^\circ$ . Es interesante observar que los valores obtenidos para  $\langle\theta\rangle$  y  $\Delta\theta$  en el caso presente son ligeramente superiores a los obtenidos en el caso de emisión desde la superficie de un cono líquido para el ángulo límite inferior ( $\alpha = \alpha_M \simeq 21,89^\circ$ ), en cuyo caso obtenemos un ángulo promedio aproximadamente de  $122^\circ$  y una desviación estándar de unos  $36^\circ$  (ver figura 5.6).

Finalmente, la corriente total  $I$  tiene un valor finito y de esto se deduce que la longitud  $l_j$  debe ser finita, es decir,  $l_j < \infty$ . A distancias  $r$  del orden de  $l_j$  o mayor la alta simetría que presenta del problema cerca del extremo del filamento se rompe, y la solución encontrada, basada en funciones de semejanza del SEM, no puede aplicarse. De hecho, la solución obtenida proporciona sólo el comportamiento asintótico de la solución exacta cuando  $r \ll l_j$ . En este sentido, hay que subrayar que la longitud  $l_j$  queda como un parámetro independiente en el límite  $r \rightarrow 0$ , el cual, según lo visto, proporciona un factor de escala para los campos. En realidad, el valor de  $l_j$  debe depender de la intensidad de corriente  $I$  y esta relación debería ser obtenida una vez resuelto el problema en regiones más extensas, fijando la correspondiente condición de contorno lejana para el potencial eléctrico. La solución del problema en regiones más extensas debe obtenerse mediante procedimientos numéricos usando el comportamiento asintótico que hemos obtenido, válido cuando  $r \rightarrow 0$ , para iniciar el cálculo.

## Discusión

La motivación principal que nos ha llevado a considerar el problema de la vaporización iónica en un filamento líquido y semi-infinito es proporcionar una descripción aproximada de la distribución de carga espacial que existe cerca del *jet* o microchorro que se emite desde el vértice de un cono de Taylor, y que frecuentemente se observa en los experimentos de electrosprays

en vacío. El resultado más relevante que se deduce de nuestro análisis es, sin duda, la ley  $n \propto r^{-1,6308}$  para la densidad de carga espacial cerca del extremo del filamento. No obstante, aún queda por ver si la aplicación de este modelo ideal de filamento líquido, semi-infinito e infinitamente delgado está lo suficientemente justificada como para que esta ley de dependencia radial encontrada se pueda considerar aproximadamente correcta en las cercanías del *jet* de un cono de Taylor.

La hipótesis de filamento semi-infinito se ha hecho con el fin de preservar la simetría del problema y posibilitar, de esta forma, la resolución del mismo en términos de soluciones autosemejantes del SEM. Pero, a priori, encontramos dos hechos que podrían invalidar esta hipótesis y echar atrás este modelo de filamento para la descripción del *jet*. En primer lugar, en los experimentos con electrosprays se observa que el microchorro emitido tiene, en realidad, un diámetro finito,  $D_j$ , y una longitud finita  $L_j$  (ver, por ejemplo, [16] y [8, 9]). Por otra, es evidente que el modelo ideal de filamento no tiene en cuenta la contribución del menisco, el cual es cónico con un semiángulo vertical  $\alpha$ . Veamos las implicaciones de estos dos hechos y su grado de afectación.

Con respecto a la primera cuestión, hay que decir que, a pesar de sus dimensiones finitas, el *jet* es bastante largo en comparación con sus dimensiones transversales, especialmente en líquidos conductores. En particular, el diámetro del *jet* puede variar desde las dimensiones atómicas en metales líquidos hasta el orden de las micras en líquidos con conductividades en el rango de  $10^{-7} \text{ S m}^{-1}$  [16]. Los experimentos de J. Fernández de la Mora y I.G. Loscertales [16] muestran que el valor del diámetro  $D_j$  depende de la conductividad eléctrica del líquido,  $K$ , de acuerdo a la ley  $D_j \propto K^{-1/3}$  (ver ecuación (2.2)). De esta forma, se observan chorros más delgados conforme aumenta la conductividad del líquido y, en particular, se deberían obtener chorros infinitamente delgados (es decir,  $D_j \rightarrow 0$ ) en el límite de líquidos infinitamente conductores (esto es, cuando  $K \rightarrow \infty$ ). Por otra parte, los experimentos de W. Driesel y Ch. Dietzsch [9] en aleaciones de metales líquidos muestran chorros nanométricos, más largos y más anchos conforme aumenta el valor de la corriente iónica emitida  $I$ , encontrando, en todos los casos en los que el *jet* es visible, razones entre longitud y anchura,  $L_j/D_j$ , por encima de 10. En este sentido, nuestro modelo ideal de filamento líquido semi-infinito para la descripción de un *jet* podría ser plausible, particularmente en líquidos muy conductores. Es más, la emisión de carga desde un cono-chorro ocurre desde el vértice del menisco y desde el propio *jet* [22], [26], y esto, en principio, permitiría identificar la longitud del segmento de emisión (la cual ha sido denotada en el problema del filamento por  $l_j$ ) con la propia longitud del microchorro  $L_j$ .

En cuanto al segundo hecho, en líquidos altamente conductores encontramos que el diámetro del *jet*  $D_j$  es varios órdenes de magnitud más pequeño que el diámetro del tubo capilar [16]. Esta disparidad de escalas permite desacoplar el problema en dos dominios independientes [13]: el del menisco cónico y el del *jet*. Por esta razón, la descripción del *jet* con la hipótesis por la que se le asimila a un filamento líquido independiente del menisco cónico está justificada, al menos cerca de la punta del chorro.

La conclusión definitiva es que el modelo ideal de filamento líquido semi-infinito podría proporcionar resultados válidos en la región próxima a la punta del *jet*. En particular, es de esperar que la mencionada dependencia radial que hemos obtenido para la densidad de carga,  $n \propto r^{-1,6308}$ , se pueda considerar aproximadamente correcta en el límite cuando  $r \rightarrow 0$ . Por supuesto, el análisis del problema de vaporización iónica en un *cone-jet* a distancias mayores de

la punta del chorro requeriría considerar el sistema conjunto (cono más chorro). En particular, es evidente que las relaciones  $L_j = L_j(I)$  y  $\alpha = \alpha(I)$  vendrían determinadas por el comportamiento del sistema a distancias del orden del radio del tubo capilar y deberían obtenerse como parte de la solución. Este problema es extraordinariamente complejo y escapa del ámbito de este trabajo. En cualquier caso, nuestra aportación ha sido proporcionar una solución sencilla, válida asintóticamente cerca del extremo del *jet*, y quizá pueda ser usada, en el futuro, para iniciar cálculos numéricos dentro de este problema completo.

Para terminar, debemos señalar que, además de su aplicación a electrosprays, el estudio teórico que hemos realizado en este capítulo podría también ser de interés para la descripción de la emisión de carga desde puntas o filamentos electrificados.

# Capítulo 7

## Aplicación del SEM para la dispersión de carga lejos del vértice de un cono

### 7.1. Problema regular

En este capítulo retomamos el problema de la vaporización iónica desde la superficie de un cono de Taylor de semiángulo vertical  $\alpha$  (con  $\alpha > 0$ ) (ver sección 3.3 y figura 3.7). La integración numérica de este problema requiere conocer la forma de la singularidad de la densidad de carga espacial existente sobre la superficie de emisión,  $r \leq r_s$ ,  $\theta = \pi - \alpha$ , desde la cual se emite la carga. Esta parte del problema (parte singular del problema o problema singular) fue abordada con detalle en el capítulo 5 por medio de funciones de semejanza del SEM. La forma de esta singularidad, que ya es conocida, se puede usar para iniciar el cálculo numérico del problema. Esta parte del problema (parte regular del problema o problema regular) será el objeto del capítulo presente. Por otra parte, la parte regular del problema para el caso límite del filamento líquido semi-infinito (ver capítulo 6) no será considerada en este trabajo.

Dada la singularidad que presenta la función densidad numérica de gotas  $n$  sobre la superficie de emisión, el problema regular se aborda separando dicha función como suma de dos componentes: la *componente singular*,  $n_s$ , y la *componente regular*,  $n_r$ , es decir, usando variables adimensionales,

$$\tilde{n} = \tilde{n}_s + \tilde{n}_r. \quad (7.1)$$

La componente singular  $n_s$  está dada en términos de funciones de semejanza con  $m = 5/4$  (ver capítulo 5) y, por tanto, ya es conocida. De esta forma, el problema regular se reduce a calcular tres campos escalares regulares: la componente regular de la densidad numérica de gotas,  $n_r$ , el potencial eléctrico  $\phi$  y el potencial de velocidad  $\psi$ , lo cual es susceptible de resolverse numéricamente en coordenadas esféricas  $(r, \theta)$  usando un esquema en diferencias finitas análogo al que se implementó en el capítulo 4.

La definición de la componente singular de la densidad numérica de gotas,  $n_s$ , debe tener en cuenta que el valor del radio de la superficie de emisión,  $r_s$ , está acotado en el rango de ángulos  $\alpha$  físicamente admisible (ecuación (5.48)), esto es,  $\alpha_M \simeq 21,89^\circ < \alpha < \alpha_T \simeq 49,29^\circ$ . De esta forma, la trayectoria autosemejante más externa, es decir, la que se inicia en el punto  $r = r_s$ ,  $\theta = \pi - \alpha$ , define la frontera del electrospray *en sentido autosemejante* (ver figuras 5.4 y

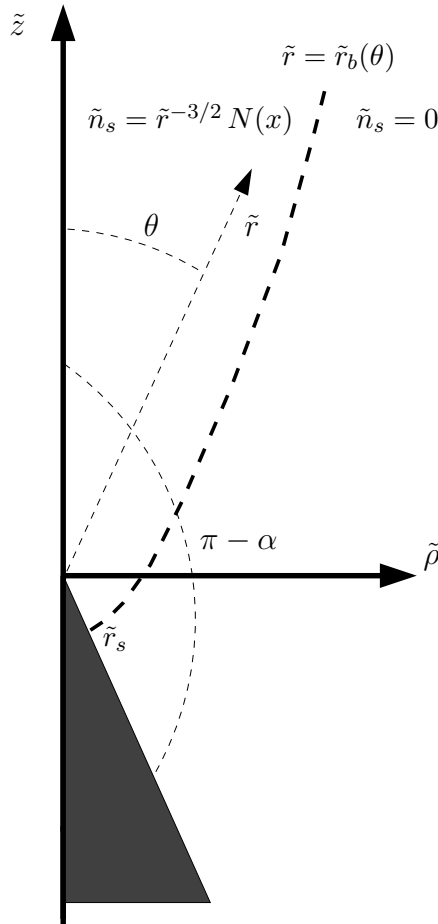


Figura 7.1: Esquema de la componente singular de la función  $\tilde{n}$

5.5). Esta frontera constituye, entonces, una superficie de discontinuidad en la función  $n_s$ , pues en la región interna se tendrá que  $n_s \neq 0$  está por la correspondiente función autosemejante y en la región externa se tendrá que  $n_s = 0$  (ver figura 7.1). La frontera autosemejante viene dada matemáticamente por una cierta función  $r = r_b(\theta)$ , donde  $r_b(\theta)$  se obtiene inmediatamente usando la ecuación (5.45) con  $m = 5/4$  y  $r_0 = r_s$ , es decir

$$\tilde{r}_b(\theta) = \tilde{r}_s \left( \frac{L_\alpha}{\sin^2 \theta N(\cos \theta) F'(\cos \theta)} \right)^{4/3}, \tag{7.2}$$

y donde  $L_\alpha$  es el valor límite de  $(1 - x^2) N(x) F'(x)$  en la superficie del cono  $x = x_\alpha$ , el cual es mayor que cero pero siempre finito (ver ecuación (5.32) y Opción  $\beta B$  de la tabla 5.3). En consecuencia, la función  $n_s$  está definida por

$$\tilde{n}_s(\tilde{r}, \theta) = \begin{cases} \tilde{r}^{-3/2} N(\cos \theta) & \text{si } \tilde{r} \leq \tilde{r}_b(\theta), \\ 0 & \text{si } \tilde{r} > \tilde{r}_b(\theta). \end{cases} \tag{7.3}$$

Como se explicó en el capítulo 2, el objetivo final es el análisis de la distribución espacial de la carga emitida en regiones que varían desde  $r \rightarrow 0$  (donde los efectos de carga espacial son dominantes) hasta distancias más allá de la región espacial, pero mucho menores que las

dimensiones capilares (donde los efectos de carga espacial, aunque aún son relevantes, se van haciendo gradualmente menos importantes frente al efecto del campo externo del cono). Esto, en particular, tiene dos implicaciones importantes en el problema regular. En primer lugar, el semiángulo del cono líquido  $\alpha$  permanece, también, como un parámetro libre para esta parte del problema, el cual debe tomar valores en el rango físicamente admisible obtenido del análisis del problema singular (ecuación (5.48)), esto es,  $\alpha_M \simeq 21,89^\circ < \alpha < \alpha_T \simeq 49,29^\circ$ . Por otra parte, la condición de campo lejano para el potencial eléctrico  $\phi$  debe fijarse en el infinito (esto es, en  $r \rightarrow \infty$ ). Recordemos que esto ya se hizo en el capítulo 4, al estudiar el problema numérico de la dispersión de carga procedente de un cono redondeado. Veamos qué forma adopta dicha condición en el caso presente.

### Condición de campo lejano

Recordemos que en el problema del cono redondeado la condición de campo lejano consistía en requerir que el potencial eléctrico  $\phi$  tienda al potencial de Taylor  $\phi_T$  cuando  $r \rightarrow \infty$ . De la misma forma, en el problema que nos ocupa parece natural imponer que lejos del vértice el potencial eléctrico  $\phi$  siga también la ley de Taylor  $r^{1/2}$  [15]. Pero, como veremos a continuación, para un cono de ángulo  $\alpha$  distinto al ángulo de Taylor hay un pequeño matiz que diferencia ambos casos.

En un cono líquido de semiángulo  $\alpha < \alpha_T$  el equivalente al potencial de Taylor con ley  $r^{1/2}$  es el potencial eléctrico dado por la función  $\phi_\alpha$  (ver ecuaciones (2.15), (2.16) y (2.17)):

$$\tilde{\phi}_\alpha(\tilde{r}, \theta) = -\tilde{r}^{1/2} [a_\alpha P_{1/2}(\cos \theta) + b_\alpha Q_{1/2}(\cos \theta)] \quad (\tilde{r} \geq 0, \quad 0 \leq \theta < \pi - \alpha), \quad (7.4)$$

donde, para un cono con polaridad positiva, las constantes  $a_\alpha$  y  $b_\alpha$  están dadas por:

$$a_\alpha = -\sin^{1/2} 2\alpha Q_{1/2}(x_\alpha), \quad b_\alpha = \sin^{1/2} 2\alpha P_{1/2}(x_\alpha). \quad (7.5)$$

Recordemos (sección 2.3) que este potencial se obtiene formalmente al resolver el problema definido por la ecuación de Laplace junto con la condición de equipotencialidad y la condición de equilibrio mecánico sobre la superficie del cono. Como ya se advirtió, el potencial eléctrico  $\phi_\alpha$  presenta una singularidad en el semieje  $\theta = 0$ , y entonces no cumple la condición de regularidad exigida. Por esta razón, no parece físicamente admisible imponer que  $\phi_\alpha$  sea un límite para el potencial eléctrico  $\phi$  lejos del vértice. La cuestión, entonces, es definir una función  $\phi_\infty$  que sea un límite lícito del potencial eléctrico  $\phi$  a grandes distancias del vértice.

Parece más o menos evidente que lejos del vértice y cerca de la superficie del cono líquido el potencial eléctrico debe aproximarse a la función  $\phi_\alpha$ . Por otra parte, lejos del vértice y cerca del eje el potencial eléctrico debe ser regular y variar como  $z^{1/2}$  [15]. Una posibilidad sencilla que satisfaga estos requerimientos consistiría en construir la función  $\phi_\infty$  de la siguiente forma:

$$\tilde{\phi}_\infty(\tilde{r}, \theta) = \begin{cases} \tilde{\phi}_\alpha(\tilde{r}, \zeta_\infty) & \text{si } 0 \leq \theta \leq \zeta_\infty, \\ \tilde{\phi}_\alpha(\tilde{r}, \theta) & \text{si } \zeta_\infty < \theta \leq \pi - \alpha, \end{cases} \quad (7.6)$$

donde, en la variable  $x$  ( $x_\infty \equiv \cos \zeta_\infty$ ), el ángulo  $\zeta_\infty$  cumple la condición:

$$P'_{1/2}(x_\infty) Q_{1/2}(x_\alpha) - P_{1/2}(x_\alpha) Q'_{1/2}(x_\infty) = 0. \quad (7.7)$$



La función  $\phi_\infty$  es, por construcción, una función continua y con derivada continua en  $\theta = \zeta_\infty$ . Además, se habrá observado que  $\phi_\infty$  presenta uniformidad angular cerca del eje, lo cual es una condición realista para el potencial eléctrico lejos del vértice; de hecho, la función  $\phi_\infty$  coincide la dada para el potencial eléctrico en el modelo cónico de J. Fernández de la Mora [12].

En resumen, en el problema presente asumiremos que cuando  $r \rightarrow \infty$  el potencial eléctrico  $\phi$  está dado por la función  $\phi_\infty$  (ecuaciones (7.6) y (7.7)). En cualquier caso, podría prescribirse cualquier otra condición de campo lejano siempre que cumpla las condiciones mínimas de regularidad y tenga significado físico dentro del contexto del problema.

### 7.1.1. Formulación matemática

Después de los preliminares anteriores, pasamos a formular matemáticamente el problema regular para las funciones incógnita  $\tilde{n}_r$ ,  $\tilde{\phi}$  y  $\tilde{\psi}$ , con las ecuaciones y las correspondientes condiciones de contorno. El problema regular consiste en resolver las ecuaciones adimensionales del SEM en coordenadas esféricas:

$$\left(\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tilde{r}}\right)^2 + \frac{1}{\tilde{r}^2} \left(\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \theta}\right)^2 + 2\tilde{\phi} = 0, \tag{7.8}$$

$$\frac{1}{\tilde{r}^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{r}} \left( \tilde{r}^2 \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial \tilde{r}} \right) + \frac{1}{\tilde{r}^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial \theta} \right) + \tilde{n}_s + \tilde{n}_r = 0, \tag{7.9}$$

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{r}} \left[ \tilde{r}^2 (\tilde{n}_s + \tilde{n}_r) \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tilde{r}} \right] + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[ (\tilde{n}_s + \tilde{n}_r) \sin \theta \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \theta} \right] = 0, \tag{7.10}$$

en la región  $\tilde{r} > 0$ ,  $0 < \theta < \pi - \alpha$ , junto con las las condiciones de contorno sobre la superficie del cono:

$$\begin{aligned} \tilde{\phi} \Big|_{(\tilde{r}>0, \theta=\pi-\alpha)} &= 0, & \tilde{\psi} \Big|_{(\tilde{r}>0, \theta=\pi-\alpha)} &= 0, \\ \tilde{\mathbf{J}} \Big|_{(\tilde{r}, \theta=\pi-\alpha)} &= \begin{cases} -2^{1/2} \tilde{r}^{-5/4} (1 - x_\alpha^2)^{-1/2} L_\alpha \mathbf{u}_\theta & \text{si } 0 < \tilde{r} < \tilde{r}_s, \\ \mathbf{0} & \text{si } \tilde{r} > \tilde{r}_s, \end{cases} \end{aligned} \tag{7.11}$$

donde  $\tilde{\mathbf{J}} = \tilde{n} \tilde{\mathbf{v}} = (\tilde{n}_s + \tilde{n}_r) \tilde{\mathbf{v}}$  es la densidad de corriente, las condiciones de regularidad en el eje:

$$\frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial \theta} \Big|_{(\tilde{r}>0, \theta=0)} = 0, \quad \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \theta} \Big|_{(\tilde{r}>0, \theta=0)} = 0, \quad \frac{\partial \tilde{n}_r}{\partial \theta} \Big|_{(\tilde{r}>0, \theta=0)} = 0, \tag{7.12}$$

y, finalmente, la condición de campo lejano:

$$\tilde{\phi} \Big|_{(\tilde{r} \rightarrow \infty, 0 < \theta < \pi - \alpha)} = \tilde{\phi}_\infty \Big|_{(\tilde{r} \rightarrow \infty, 0 < \theta < \pi - \alpha)}, \tag{7.13}$$

donde la función  $\phi_\infty$  está definida por las ecuaciones (7.6) y (7.7).

Es importante hacer un par de observaciones sobre el problema que se acaba de formular. En primer lugar, puesto que el valor adimensional  $\tilde{r}_s$  depende del ángulo  $\alpha$  del cono líquido en

la forma dada por la figura 5.2, la condición de contorno para el campo  $\mathbf{J}$  sobre la superficie del cono (ver ecuación (7.11)) garantiza automáticamente el cumplimiento de la condición de conservación de la carga (ecuación (3.102)). Por otra parte, la condición de equilibrio mecánico (ver ecuación (3.100)) no ha sido requerida. La razón es que ya se ha impuesto una condición de campo lejano para el potencial eléctrico y, en el caso de imponer además la condición de equilibrio mecánico, resultaría que el problema regular (en lo que se refiere a la parte relativa a la ecuación de Poisson) estaría sobredeterminado, esto es, tendría más restricciones o ligaduras (dadas por las condiciones de contorno) que las que debe tener [31]. En consecuencia, en el problema regular que se acaba de formular se han impuesto todas las condiciones de contorno que fueron inicialmente requeridas (ver sección 3.3) salvo la condición de equilibrio mecánico.

Lo anterior plantea de forma natural la cuestión de investigar si existe algún valor del ángulo del cono líquido  $\alpha$  en el intervalo físicamente admisible  $\alpha_M < \alpha < \alpha_T$  compatible con todas las condiciones requeridas, incluida la condición de equilibrio mecánico. En el límite  $r \ll r_s$ , donde la solución del problema está dada en términos de funciones autosemejantes, la inmensa simetría existente permite que cualquier ángulo  $\alpha$  en el rango  $\alpha_M < \alpha < \alpha_T$  sea físicamente posible. Ahora, nos proponemos resolver numéricamente el problema regular (7.8)-(7.13) en todo el rango admisible de valores del ángulo  $\alpha$  para encontrar (en el caso de que exista) el valor de  $\alpha$  que sea compatible con la condición de equilibrio mecánico fuera de la región autosemejante. Los resultados mostrarán (ver debajo) que la respuesta es negativa, esto es, no existe ningún ángulo  $\alpha$  para el que se cumpla la condición de equilibrio mecánico, más allá de la región autosemejante. Esto nos llevará, finalmente, a cuestionar la hipótesis ideal por la que se asume una interfase líquida con forma cónica perfecta y que ha sido admitida a lo largo de todo este trabajo.

## 7.2. Resultados y análisis

Una vez que se fije el valor del semiángulo del cono  $\alpha$  dentro del rango  $\alpha_M < \alpha < \alpha_T$ , el problema regular ya es susceptible de resolverse numéricamente. En particular, la resolución numérica se realizará usando el algoritmo, basado en el método de diferencias finitas a orden dos, que se implementó para el problema de la dispersión de carga en un cono redondeado (ver capítulo 4), el cual puede ser adaptado sin dificultad al caso que nos ocupa.

El algoritmo numérico se explicó con todo detalle en la sección 4.3 y todas las consideraciones hechas entonces son aplicables al problema actual. No obstante, en el caso presente debemos hacer dos observaciones importantes:

- El problema incluye sólo una región en coordenadas esféricas. Está región no está acotada, lo que obliga a prescribir la condición de campo lejano (ecuación (7.13)) a una cierta distancia finita del vértice,  $r = r_1$ , la cual debe cumplir  $r_1 > r_s$ .
- La singularidad geométrica existente en el vértice del cono impide iniciar la integración numérica en el punto  $r = 0$ . Esto obliga a iniciar el cálculo a una distancia muy pequeña del vértice,  $r = r_0 > 0$ , la cual debe cumplir la condición  $r_0 < r_s$ .

De esta forma, el dominio donde se resuelve el problema numérico es la subregión acotada definida, en variables adimensionales, por  $\tilde{r}_0 \leq \tilde{r} \leq \tilde{r}_1, 0 \leq \theta \leq \pi - \alpha$ . En particular, en  $\tilde{r} = \tilde{r}_0$

se fijan las condiciones iniciales para las tres funciones incógnitas:

$$\begin{aligned} \tilde{\phi} \Big|_{(\tilde{r}=\tilde{r}_0, 0<\theta<\pi-\alpha)} &= -\tilde{r}_0^{1/2} p(\cos \theta), \\ \tilde{\psi} \Big|_{(\tilde{r}=\tilde{r}_0, 0<\theta<\pi-\alpha)} &= 2^{1/2} \tilde{r}_0^{5/4} F(\cos \theta), \\ \tilde{n}_r \Big|_{(\tilde{r}=\tilde{r}_0, 0<\theta<\pi-\alpha)} &= 0. \end{aligned} \tag{7.14}$$

Las condiciones iniciales para los campos  $\tilde{\phi}$  y  $\tilde{\psi}$  están dadas por funciones autosemejantes. En este sentido, es importante recordar que las soluciones autosemejantes sólo proporcionan una buena aproximación a distancias  $\tilde{r} \ll \tilde{r}_s$ , donde la alta simetría existente hace posible su uso. Por esta razón, debe considerarse  $\tilde{r}_0 \ll \tilde{r}_s$  con el fin de obtener más precisión en los resultados numéricos.

### 7.2.1. Análisis de un ejemplo concreto

El problema se ha resuelto para varios valores del ángulo  $\alpha$  en el rango  $\alpha \in (\alpha_M, \alpha_T)$ . Aunque después hagamos una discusión de los resultados obtenidos en todo el rango de valores de  $\alpha$ , analizaremos, primero, los resultados obtenidos para un ángulo particular (ver debajo). Como ejemplo, hemos elegido el ángulo  $\alpha = 36^\circ$ . Recordemos que este valor también fue uno de los escogidos en el capítulo 5 al resolver la parte singular del problema.

La tabla 7.1 muestra los datos correspondientes al mallado y al algoritmo numérico que han sido elegidos en la simulación. La gráfica del mallado resultante se muestra en la figura 7.2. El valor de  $\tilde{r}_0$  elegido es un orden de magnitud inferior a  $\tilde{r}_s$  (en particular,  $\tilde{r}_0 \approx 0,065 \tilde{r}_s$ ). Por otra parte, el valor de  $\tilde{r}_1$  que se ha escogido es dos órdenes de magnitud superior a  $\tilde{r}_s$  (en particular,  $\tilde{r}_1 \approx 98 \tilde{r}_s$ ). Debemos observar que estos valores cumplen las condiciones que habíamos pedido anteriormente. Por otra parte, la cota de error fijada es  $\epsilon = 10^{-6}$ .

Después de correr el algoritmo se obtiene convergencia después de 14 iteraciones y con cotas de error en los tres campos dados por  $\epsilon_\phi = 5,5 \times 10^{-11}$ ,  $\epsilon_\psi = 8,7 \times 10^{-12}$  y  $\epsilon_n = 4,5 \times 10^{-7}$ . La figura 7.3 muestra las gráficas de los tres campos escalares,  $\tilde{n}$ ,  $\tilde{\phi}$  y  $\tilde{\psi}$ . Se observa la divergencia que presenta la densidad numérica de gotas  $\tilde{n}$  sobre la superficie de emisión. Podemos apreciar el decaimiento de los valores de la función  $\tilde{n}$  a medida que nos alejamos del vértice del cono y de la superficie de emisión. Se observa, también, que la densidad de carga se anula a lo largo de todo el semieje  $\theta = 0$  (resultado que ya se tenía en el límite  $\tilde{r} \rightarrow 0$  y que fue obtenido al resolver la singularidad de la densidad de carga espacial por medio de las funciones autosemejantes). A este respecto, es interesante recordar que este resultado de “haz hueco” también se encontraba al estudiar el problema numérico de la dispersión de carga eléctrica emitida desde un cono redondeado.

La variación espacial de la densidad de carga se puede analizar con más detalle representando la función  $\tilde{n}$  como función del ángulo  $\theta$  a valores fijos de la coordenada radial  $\tilde{r}$ . Esto se ha hecho en la figura 7.4, donde también se muestra la correspondiente solución separable o autosemejante de la función  $\tilde{n}$  (es decir,  $\tilde{n} = \tilde{r}^{-3/2} N(\cos \theta)$ ) como función de  $\theta$ . Esto permite estudiar cuánto difiere la solución numérica obtenida para el campo  $\tilde{n}$  de la forma matemática dada por la correspondiente solución autosemejante. A la vista de las gráficas podemos concluir que ambas soluciones son parecidas para valores pequeños de  $\tilde{r}$  y las diferencias se hacen más

Semiángulo vertical del cono líquido
$\alpha = 36^\circ$ ( $x_\alpha = -0,8090$ ) $\rightarrow \tilde{r}_s = 0,1538$ , $L_\alpha = 0,3437$
Datos correspondientes al mallado: dimensiones y número de nodos
$\tilde{r}_0 = 0,01$ , $\tilde{r}_1 = 15$
$n_w = 60$ , $n_\theta = 40$
Cota máxima de error para los tres campos
$\epsilon = 10^{-6}$

Tabla 7.1: Valores elegidos para la simulación en el caso  $\alpha = 36^\circ$ . La gráfica que resulta para el mallado se muestra en la figura 7.2.

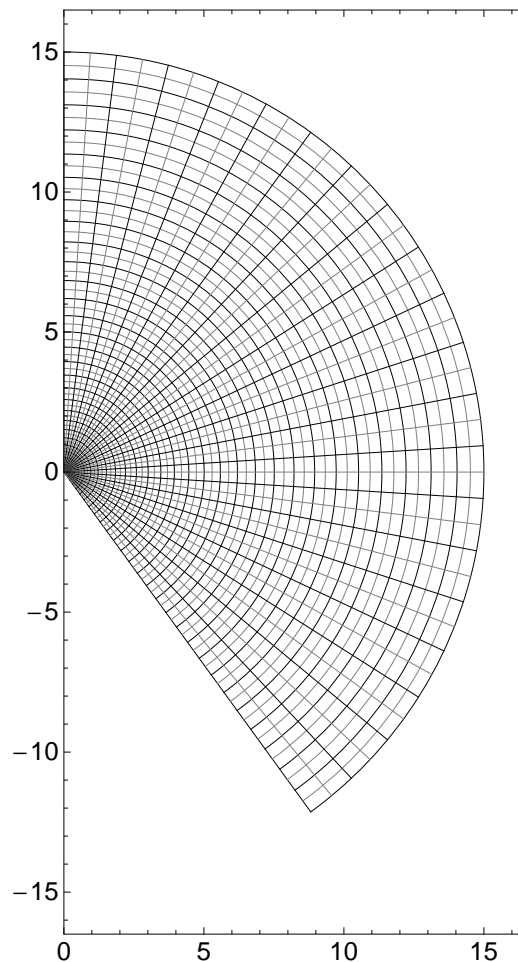


Figura 7.2: Mallado en diferencias finitas para los valores de la tabla 7.1. Los pasos de este mallado son  $h_w = 0,063$  y  $h_\theta = 0,063$ .

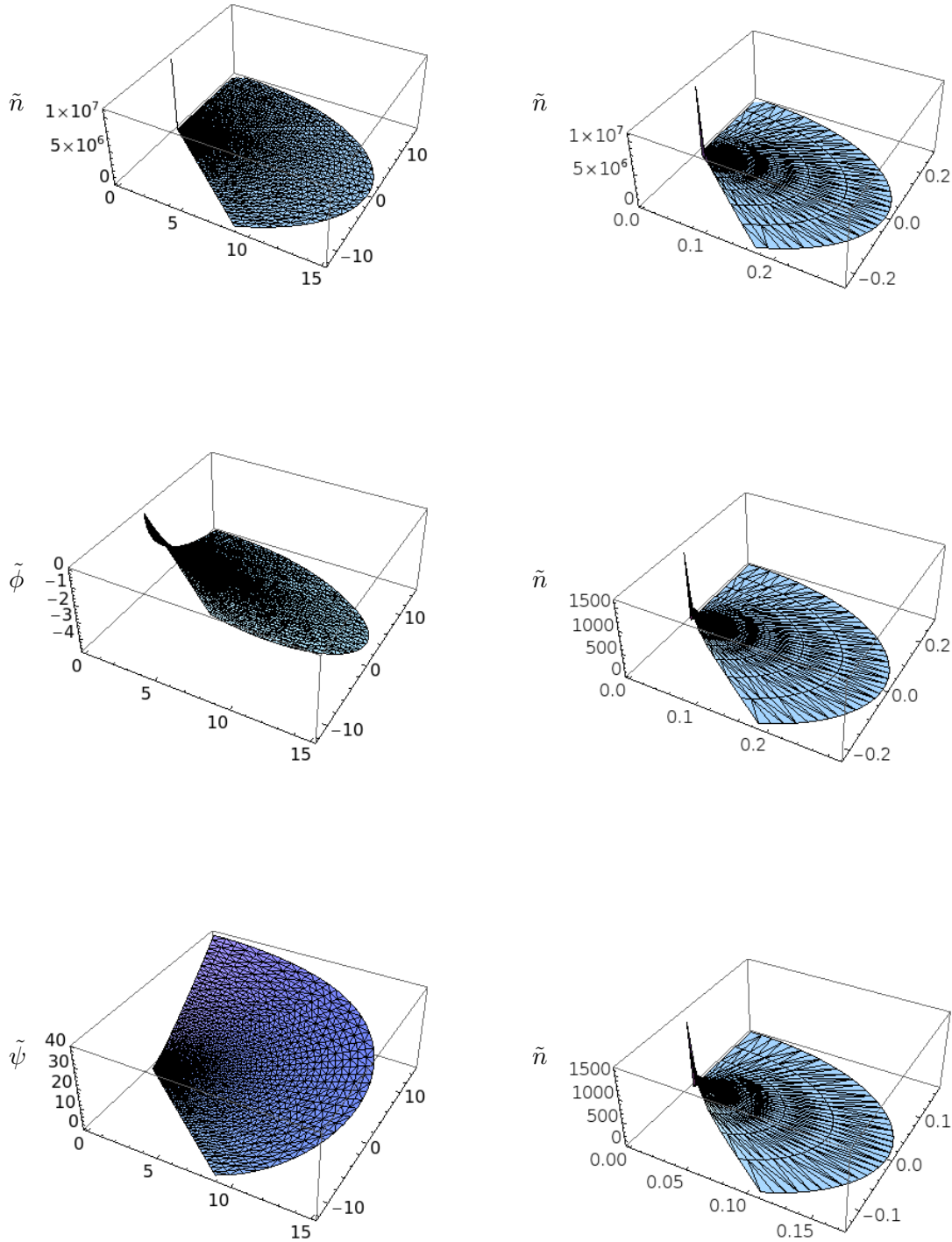


Figura 7.3: Gráficas de los campos  $\tilde{n}$ ,  $\tilde{\phi}$  y  $\tilde{\psi}$  para  $\alpha = 36^\circ$ . A la derecha, detalle de la gráfica de  $\tilde{n}$  a dos distancias próximas al vértice:  $\tilde{r} = 0,3$  y  $\tilde{r} = 0,15$  (en las dos gráficas de abajo, el campo  $\tilde{n}$  se representa en el intervalo angular  $0 \leq \theta \leq (\pi - \alpha) - h_\theta$  para evitar la divergencia existente en la superficie de emisión y apreciar mejor la variación espacial)

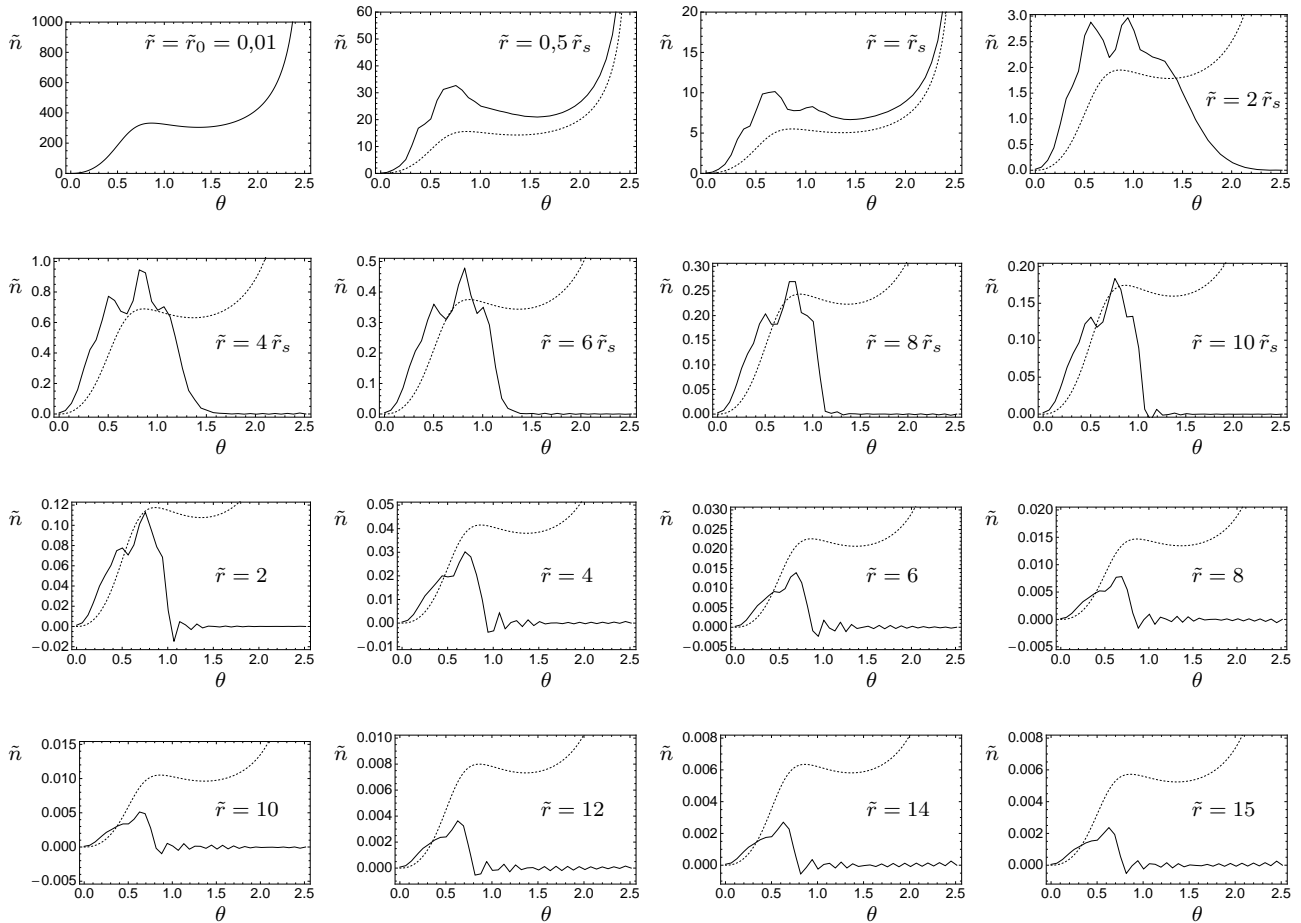


Figura 7.4: Densidad numérica de gotas  $\tilde{n}$  como función del ángulo  $\theta$  a  $\tilde{r}$  constante para varias distancias en el intervalo  $\tilde{r} \leq \tilde{r}_1$  en el caso  $\alpha = 36^\circ$ . En cada gráfica, la curva discontinua representa la solución autosemejante de la función  $\tilde{n}$  como función de  $\theta$ .

grandes conforme aumenta el valor de  $\tilde{r}$ , lo cual entra dentro de lo esperado. No obstante, una observación más en detalle permite deducir otros resultados interesantes (ver debajo).

Por hipótesis, cuando  $\tilde{r} = \tilde{r}_0$ , la solución para  $\tilde{n}$  coincide evidentemente con la dada por la función autosemejante, la cual presenta un máximo local en un cierto valor del ángulo  $\theta = \theta_{max} \approx 48^\circ$ . Esto es evidente recordando la forma de la función angular  $N(x)$  para el caso  $\alpha = 36^\circ$  (ver figura 5.3 (b)). Notar que en todo el rango de valores de  $\tilde{r}$  este máximo local aún persiste, alcanzándose en una posición cercana a  $\theta = \theta_{max}$  a distancias pequeñas del vértice y desplazándose ligeramente hacia el eje conforme aumenta la distancia, hasta localizarse en torno al valor  $\theta = 35^\circ$  a grandes distancias del vértice. Por otra parte, el valor de este máximo local disminuye al aumentar la distancia con una ley que, a grandes distancias del vértice, no difiere demasiado de la dada por la solución autosemejante ( $\tilde{r}^{-3/2}$ ).

Para cada valor de  $\tilde{r}$  comprendido en el rango de valores entre  $\tilde{r} = \tilde{r}_0$  y  $\tilde{r} = \tilde{r}_s$ , la solución numérica encontrada para el campo  $\tilde{n}$  tiene una forma parecida a la correspondiente solución autosemejante. En particular, las diferencias entre ambas son mínimas en puntos cercanos al eje  $\theta = 0$  y, por supuesto, cerca de la superficie de emisión  $\theta = \pi - \alpha$  donde, por hipótesis, el campo  $\tilde{n}$  sigue la ley asintótica dada por la función  $N(x)$  (esto es, tiende a infinito como  $(\cos \theta + \cos \alpha)^{-1/2}$ ). No obstante, para valores intermedios de  $\theta$  la solución numérica toma valores mayores que la correspondiente solución autosemejante.

Para cada valor de  $\tilde{r}$  mayor que  $\tilde{r}_s$ , la posición del máximo local separa dos intervalos con distinto comportamiento. A la izquierda del máximo y cerca del eje, la solución numérica obtenida para el campo  $\tilde{n}$  sigue siendo muy próxima a la dada por la solución autosemejante. Pero a la derecha del máximo local, las diferencias son considerables. En particular, encontramos que el campo  $\tilde{n}$  se anula a partir de un cierto ángulo,  $\theta = \theta_0$ , cuyo valor disminuye al aumentar el valor de  $\tilde{r}$  (pasando de tomar el máximo teórico de  $144^\circ$ , cuando  $\tilde{r} = \tilde{r}_s$ , a estabilizarse en torno a unos  $46^\circ$ , cuando se consideran valores de  $\tilde{r}$  cercanos a  $\tilde{r}_1 = 15$ ). De esto se infiere que el electro spray emitido tiene una frontera física más o menos nítida, la cual vendría dada teóricamente por la superficie definida por la ecuación  $\theta_0 = \theta_0(\tilde{r})$ , con  $\tilde{r} > \tilde{r}_s$ . Se observa también que, una vez superada la distancia  $\tilde{r} = 2 \approx 13\tilde{r}_s$ , el valor máximo del campo  $\tilde{n}$  está siempre por debajo del valor del máximo local de la correspondiente función autosemejante.

### Análisis estadístico de la distribución de carga

Una forma de caracterizar la distribución espacial del electro spray emitido es por medio del análisis estadístico de la función  $\tilde{n}$  (ver apéndice C). En particular, la distribución angular viene determinada por el ángulo medio  $\langle \theta \rangle$ :

$$\langle \theta \rangle = \frac{\int_0^{\pi-\alpha} \int_0^{+\infty} \theta \tilde{n}(\tilde{r}, \theta) \tilde{r}^2 \sin \theta \, d\tilde{r} \, d\theta}{\int_0^{\pi-\alpha} \int_0^{+\infty} \tilde{n}(\tilde{r}, \theta) \tilde{r}^2 \sin \theta \, d\tilde{r} \, d\theta}, \tag{7.15}$$

y la correspondiente desviación estándar  $\Delta\theta = (\langle \theta^2 \rangle - \langle \theta \rangle^2)^{1/2}$ , donde

$$\langle \theta^2 \rangle = \frac{\int_0^{\pi-\alpha} \int_0^{+\infty} \theta^2 \tilde{n}(\tilde{r}, \theta) \tilde{r}^2 \sin \theta \, d\tilde{r} \, d\theta}{\int_0^{\pi-\alpha} \int_0^{+\infty} \tilde{n}(\tilde{r}, \theta) \tilde{r}^2 \sin \theta \, d\tilde{r} \, d\theta}. \tag{7.16}$$

Como en el caso del problema del cono redondeado, el cálculo numérico de estas integrales se ha hecho con dos aproximaciones. En primer lugar, el campo  $\tilde{n}$  es aproximado por la corres-

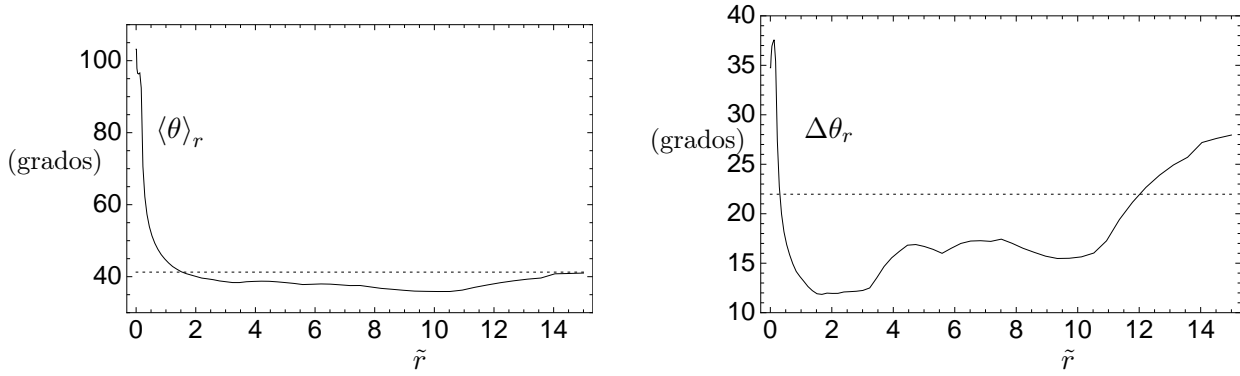


Figura 7.5: Parámetros estadísticos (ángulo medio  $\langle \theta \rangle_r$  y desviación estándar  $\Delta\theta_r$ ) correspondientes a la distribución de la carga emitida en el caso  $\alpha = 36^\circ$  como función de  $\tilde{r}$  en el rango  $\tilde{r} \leq \tilde{r}_1$ . Las líneas discontinuas en las tres gráficas dan el correspondiente valor de  $\langle \theta \rangle$  y  $\Delta\theta$ .

pendiente función de interpolación lineal. Por otra parte, aunque teóricamente las integrales en la variable radial  $\tilde{r}$  que aparecen en las ecuaciones anteriores deben evaluarse entre  $\tilde{r} = 0$  y  $\tilde{r} = +\infty$ , hemos despreciado la contribución en  $\tilde{r} > \tilde{r}_1$ , habida cuenta del decaimiento de la densidad de gotas al aumentar la distancia.

Los cálculos que hemos realizado para el caso  $\alpha = 36^\circ$  dan como resultado que  $\langle \theta \rangle \approx 41^\circ$  y  $\Delta\theta \approx 22^\circ$ . Esto es, la distribución angular del electrospray se puede representar globalmente en el intervalo  $(\langle \theta \rangle - (1/2)\Delta\theta, \langle \theta \rangle + (1/2)\Delta\theta) \approx (30^\circ, 52^\circ)$ .

No obstante, la distribución angular del electrospray no es homogénea y, por esta razón, es interesante calcular los parámetros anteriores a cada valor  $\tilde{r}$ , esto es, el ángulo medio  $\langle \theta \rangle_r$

$$\langle \theta \rangle_r = \frac{\int_0^{\pi-\alpha} \theta \tilde{n}(\tilde{r}, \theta) \sin \theta d\theta}{\int_0^{\pi-\alpha} \tilde{n}(\tilde{r}, \theta) \sin \theta d\theta}, \quad (7.17)$$

y su correspondiente desviación estándar  $\Delta\theta_r = (\langle \theta^2 \rangle_r - \langle \theta \rangle_r^2)^{1/2}$ , con

$$\langle \theta^2 \rangle_r = \frac{\int_0^{\pi-\alpha} \theta^2 \tilde{n}(\tilde{r}, \theta) \sin \theta d\theta}{\int_0^{\pi-\alpha} \tilde{n}(\tilde{r}, \theta) \sin \theta d\theta}. \quad (7.18)$$

La figura 7.5 muestra el valor de  $\langle \theta \rangle_r$  y  $\Delta\theta_r$  como función de  $\tilde{r}$  en el rango  $0 \leq \tilde{r} \leq \tilde{r}_1 = 15$ . Por otra parte, en la figura 7.6 se muestra la distribución angular del electrospray emitido a  $\tilde{r}$  constante, la cual está dada por el intervalo  $(\langle \theta \rangle_r - (1/2)\Delta\theta_r, \langle \theta \rangle_r + (1/2)\Delta\theta_r)$ . Observando la forma de las gráficas se deduce fácilmente que la anchura angular del haz, una vez emitido, disminuye conforme aumenta la distancia al vértice, lo cual entra dentro de lo esperado. Una observación más detallada de ambas figuras permite hacer el siguiente análisis en función de la distancia  $\tilde{r}$  (ver debajo).

En la inmediata vecindad del vértice el valor del ángulo medio  $\langle \theta \rangle_r$  y su desviación estándar  $\Delta\theta_r$  están dados por los obtenidos por medio de la solución autosemejante y, entonces, dependen sólo de la función angular  $N(x)$ . En particular, para el caso  $\alpha = 36^\circ$  obtuvimos  $\langle \theta \rangle_r \approx 103^\circ$  y  $\Delta\theta_r \approx 35^\circ$  (ver gráfica 5.6). Ambos parámetros experimentan fuertes disminuciones a distancias  $\tilde{r}$  en torno a  $\tilde{r}_s$ , lo cual se explica de una forma sencilla recordando que las trayectorias



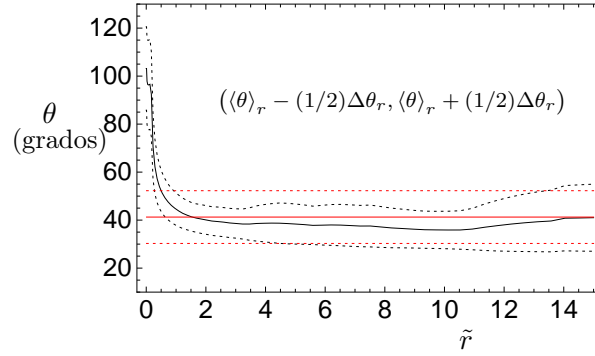


Figura 7.6: Distribución angular del electro spray emitido en el caso  $\alpha = 36^\circ$  como función de  $\tilde{r}$  en el rango  $\tilde{r} \leq \tilde{r}_1$ . En rojo, se muestra el intervalo angular total:  $(\langle \theta \rangle - (1/2)\Delta\theta, \langle \theta \rangle + (1/2)\Delta\theta)$ .

de las gotas (y en concreto, la más externa, la cual marca teóricamente la frontera física del electro spray) son perpendiculares a la superficie del cono. En particular, el ángulo medio  $\langle \theta \rangle_r$  disminuye hasta que, en torno a  $\tilde{r} = 1,5 \approx 10 \tilde{r}_s$ , alcanza el valor dado por el ángulo medio total,  $\langle \theta \rangle \approx 41^\circ$ , estabilizándose alrededor de ese valor sin cambios significativos. Por su parte, la desviación estándar  $\Delta \theta_r$  no tiene un comportamiento monótono. Después de un pequeño aumento, también empieza a disminuir bruscamente al aumentar la distancia al vértice, igualando el valor de la desviación estándar total ( $\Delta \theta \approx 22^\circ$ ) en torno a  $\tilde{r} = 0,3 \approx 2 \tilde{r}_s$ , hasta alcanzar un mínimo absoluto de unos  $12^\circ$  en torno a  $r = 1,5$ ; no obstante, a partir de esta distancia comienza a aumentar (aunque no de una forma monótona) hasta volver a alcanzar el valor de la desviación estándar total  $\Delta \theta$  en torno a  $\tilde{r} = 12$ .

A pesar del comportamiento no monótono de la desviación estándar  $\Delta \theta_r$ , se observa (ver figura 7.6) que para distancias mayores que  $\tilde{r} \approx 1 \approx 7 \tilde{r}_s$ , la distribución angular del electro spray está aproximadamente confinada en el correspondiente intervalo global,  $(30^\circ, 52^\circ)$ . Además, para distancias  $\tilde{r} > 3 \approx 20 \tilde{r}_s$  la distribución angular se hace aproximadamente constante, lo cual muestra que, en dicho rango de distancias, la solución obtenida para el campo  $\tilde{n}$  debe seguir una ley que no difiere demasiado de una función separable en parte radial y en parte angular.

### Evaluación del cumplimiento de la condición de equilibrio mecánico

Como se comentó con anterioridad, una vez resuelto el problema regular debemos comprobar el cumplimiento de la condición de equilibrio mecánico. Para ello debemos computar la diferencia entre la presión capilar y la presión eléctrica sobre la superficie del cono líquido  $\theta = \pi - \alpha$  para cada  $\tilde{r} > \tilde{r}_0$ ; esto es, determinar la función  $\delta \tilde{p}(\tilde{r})$  definida por:

$$\delta \tilde{p}(\tilde{r}) = \frac{\cot \alpha}{\tilde{r}} - \frac{1}{2} \left( \frac{1}{\tilde{r}} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial \theta} \right)^2 \Bigg|_{(\tilde{r} > \tilde{r}_0, \theta = \pi - \alpha)} \quad (7.19)$$

Notemos que en el caso en el que la condición de balance sobre la superficie del cono fuera satisfecha estrictamente, deberíamos obtener que  $\delta \tilde{p}(\tilde{r}) = 0$ . De esta manera, la desviación de

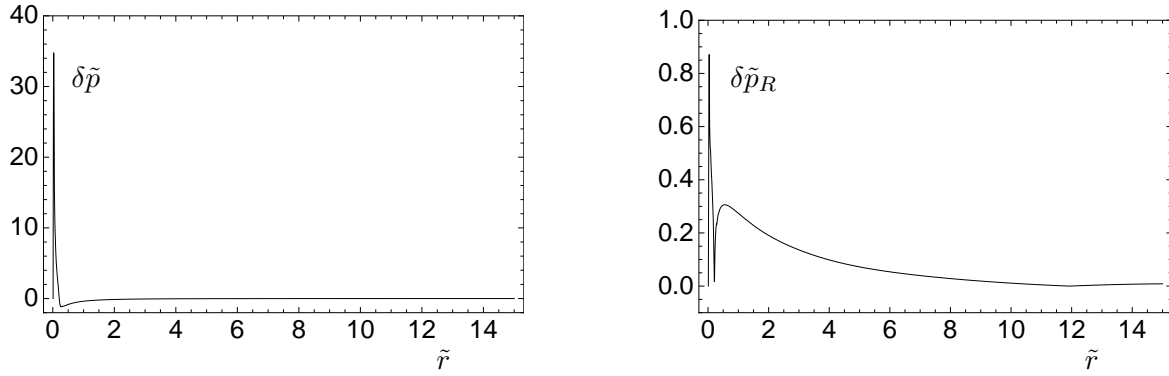


Figura 7.7: Evaluación de la condición de equilibrio mecánico en el caso  $\alpha = 36^\circ$  (ver ecuaciones (7.19) y (7.20))

la forma cónica viene dada matemáticamente por la función  $\delta\tilde{p}(\tilde{r})$ . En la figura 7.7 se muestra la función  $\delta\tilde{p}(\tilde{r})$  (ecuación (7.19)) para el caso presente, de donde se deduce que la condición de equilibrio mecánico no se satisface para el ángulo  $\alpha = 36^\circ$ .

Una manera de cuantificar el grado de cumplimiento de la condición de equilibrio mecánico es obtener el valor absoluto de la función  $\delta\tilde{p}(\tilde{r})$ , pero relativo al valor de la presión capilar. Así, introduciremos la función  $\delta\tilde{p}_R(\tilde{r})$

$$\delta\tilde{p}_R(\tilde{r}) = \frac{|\delta\tilde{p}(\tilde{r})|}{\cot \alpha / \tilde{r}}. \quad (7.20)$$

Es claro que el parámetro  $\delta\tilde{p}_R(\tilde{r})$  representa matemáticamente el *error relativo* en el cumplimiento de la condición de balance. De esta forma, el valor  $100 \delta\tilde{p}_R(\tilde{r})$  proporciona, para cada  $\tilde{r} > \tilde{r}_0$  sobre la superficie del cono, el porcentaje de desviación relativa al valor de la presión capilar.

La figura 7.7 muestra también la gráfica de la función  $\delta\tilde{p}_R(\tilde{r})$  obtenida para el caso presente,  $\alpha = 36^\circ$ . Se puede observar que el error aumenta bruscamente cerca del valor de  $\tilde{r}$  donde se fija la condición inicial para la integración numérica, alcanzando un valor máximo de aproximadamente 0,87 en torno a  $\tilde{r} = 0,04 \approx 0,3 \tilde{r}_s$ . No obstante, conforme se consideran distancias más grandes, el error empieza a disminuir, haciéndose insignificante a grandes distancias del vértice.

### 7.2.2. Análisis en el rango admisible de valores para el ángulo del cono

El problema regular fue resuelto de una forma análoga para otros valores del semiángulo del cono  $\alpha$  en el rango físicamente admisible ( $\alpha_M \simeq 21,89^\circ < \alpha < \alpha_T \simeq 49,29^\circ$ ). Como resultado más relevante cabe señalar que no se encontró ningún valor del ángulo  $\alpha$  que fuera compatible con la condición de equilibrio mecánico más allá de la inmediata vecindad del vértice del cono. No obstante, como se verá a continuación, los resultados numéricos obtenidos parecen proporcionar una imagen realista del electrospray emitido. Antes de pasar a ellos, es importante hacer dos consideraciones desde el punto de vista numérico.

En primer lugar, los ángulos  $\alpha$  próximos a los extremos del intervalo admisible (esto es,  $\alpha_M$

y  $\alpha_T$ ) acarrear dificultades de índole numérico, tanto más cuanto más cerca se encuentren de ellos. Esto es fácil de entender teniendo en cuenta el carácter singular que presentan los valores límite para el semiángulo del cono  $\alpha$ , lo cual se deduce de la relación  $\tilde{r}_s = \tilde{r}_s(\alpha)$  (ver figura 5.2). Así, cuando  $\alpha \rightarrow \alpha_M$ , entonces  $\tilde{r}_s \rightarrow 0$  y la amplitud  $N_\alpha$  diverge (ver ecuación 5.43); por otra parte, cuando  $\alpha \rightarrow \alpha_T$ , entonces  $\tilde{r}_s \rightarrow \infty$ . Por esta razón, a la hora de elegir los valores del ángulo  $\alpha$  en los que se realizan las simulaciones, debemos renunciar a valores muy próximos a los ángulos límite. En este sentido, vamos a considerar el conjunto valores del ángulo  $\alpha$ , dado por:

$$\alpha_i = \alpha_{min} + \frac{i}{N+1} (\alpha_{max} - \alpha_{min}) \quad (i = 1, 2, 3, \dots, N), \quad (7.21)$$

donde  $\alpha_M < \alpha_{min} < \alpha_{max} < \alpha_T$ . Lo anterior genera un conjunto de  $N$  valores del ángulo  $\alpha$  equiespaciados entre dos ciertos ángulos  $\alpha_{min}$  y  $\alpha_{max}$  dentro del intervalo angular admisible, lo que permite cubrir todo el rango pero sin acercarse (demasiado) a los casos límite, que son problemáticos.

En segundo lugar, con el fin de comparar resultados para valores distintos del ángulo  $\alpha$ , debemos buscar un criterio de elección, tanto para el valor adimensional de la distancia donde se fija la condición inicial (es decir,  $\tilde{r}_0$ ), como para el valor adimensional de la distancia donde se prescribe la condición de campo lejano (esto es,  $\tilde{r}_1$ ). En este sentido, hemos considerado dos estrategias de cálculo, denominadas *Estrategia A* y *Estrategia B*. En ambas estrategias se considera el mismo valor de  $\tilde{r}_0$  en todos los valores del ángulo  $\alpha$ , pero difieren en la forma de elegir el valor de  $\tilde{r}_1$ . En la Estrategia A se considera también el mismo valor de  $\tilde{r}_1$  para todos los valores de  $\alpha$ . En cambio, en la Estrategia B se considera en cada valor del ángulo el mismo valor de  $\tilde{r}_1$ , pero relativo al valor de  $\tilde{r}_s$  del ángulo en cuestión, es decir, se considera el mismo valor del cociente  $\tilde{r}_1/\tilde{r}_s$  en todos los valores del ángulo  $\alpha$ .

En cuanto al conjunto de valores del ángulo  $\alpha$ , hemos elegido  $\alpha_{min} = 22^\circ$ ,  $\alpha_{max} = 49^\circ$  y  $N = 8$ , lo que genera el conjunto de ocho ángulos:  $25^\circ, 28^\circ, 31^\circ, \dots, 46^\circ$  en el intervalo  $(\alpha_M, \alpha_T)$ . Conforme se consideran valores de  $\alpha$  próximos a  $25^\circ$  y  $46^\circ$ , las dificultades numéricas son mayores, lo que exige aumentar la resolución en la coordenada radial, ya no sólo para obtener resultados más precisos sino también para que el propio algoritmo numérico converja.

Por lo que se refiere al valor de  $\tilde{r}_0$ , hay que tener presente que debe ser obligatoriamente inferior al valor de  $\tilde{r}_s$  correspondiente al ángulo de  $25^\circ$  (esto es,  $1,151 \times 10^{-2}$ ), lo que garantiza que también lo sea para todos los demás valores de  $\alpha$ . En este caso ( $\alpha = 25^\circ$ ) se precisaba un mallado de al menos 100 nodos en la coordenada radial para obtener convergencia con un valor  $\tilde{r}_0 < \tilde{r}_s = 1,151 \times 10^{-2}$ . En particular, el valor  $\tilde{r}_0 = 0,01$  fue elegido en todas las simulaciones numéricas realizadas con las dos estrategias de cálculo. Por su parte, el valor de  $\tilde{r}_1$  debe ser mayor que el valor de  $\tilde{r}_s$  correspondiente al ángulo  $46^\circ$  (esto es,  $2,0636$ ), lo que garantiza que también lo sea para los demás ángulos. Teniendo esto presente, hemos hecho la siguiente elección en las dos estrategias.

- Estrategia A:  $\tilde{r}_1 = 15$ . Así, el valor de  $\tilde{r}_1$  supera en unas 7 veces el valor de  $\tilde{r}_s$  correspondiente a  $\alpha = 46^\circ$  y en más de 1300 veces el valor de  $\tilde{r}_s$  para  $\alpha = 25^\circ$ .
- Estrategia B:  $\tilde{r}_1 = 100 \tilde{r}_s$ . De esta forma, el valor de  $\tilde{r}_1$  cambia con el valor de  $\alpha$ ; en particular,  $\tilde{r}_1 = 1,15$  para  $\alpha = 25^\circ$  y  $\tilde{r}_1 = 206,36$  para  $\alpha = 46^\circ$ .

Debe notarse que en torno al ángulo  $\alpha = 36^\circ$  (para el cual,  $\tilde{r}_s = 0,1538$ ) el valor de  $\tilde{r}_1$  que se

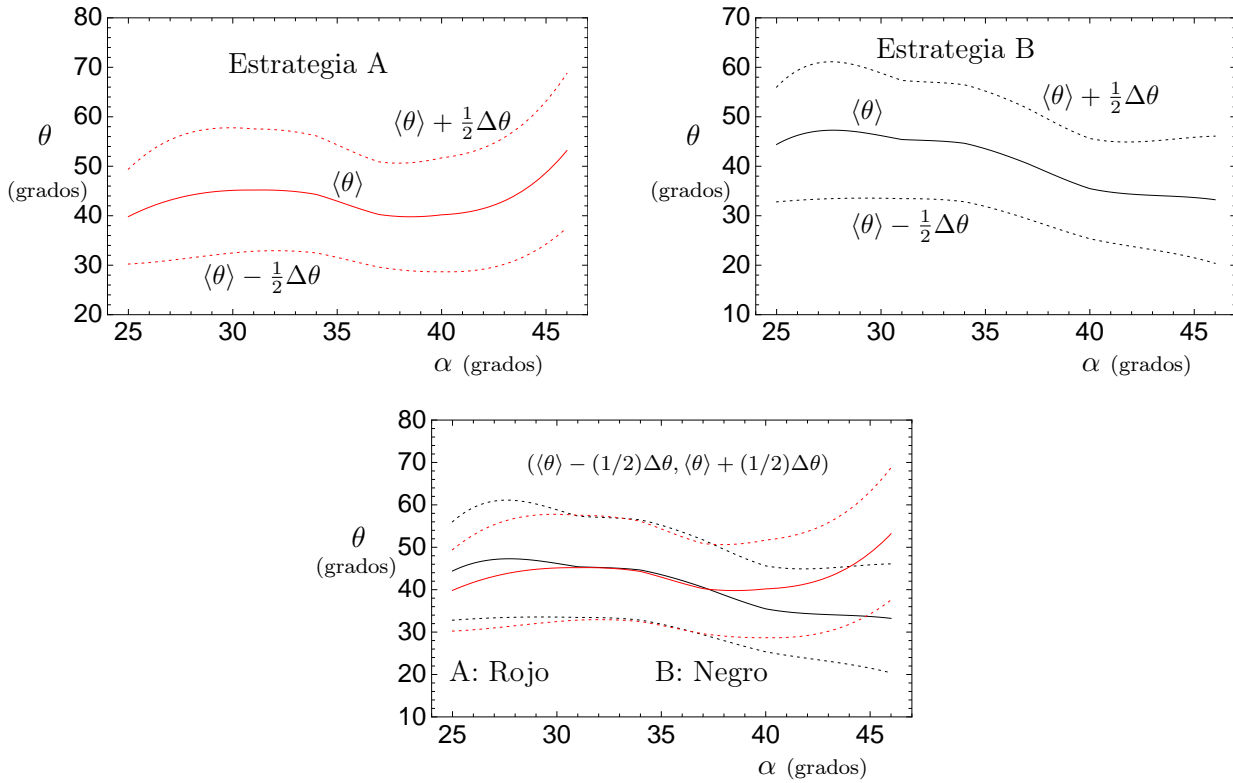


Figura 7.8: Distribución angular del electro spray emitido en función de  $\alpha$  obtenida para los dos estrategias: A y B. Abajo se muestran los resultados para las dos estrategias juntas.

fija en las dos estrategias es muy próximo y, por tanto, ambas deben producir resultados muy parecidos, los cuales también lo serán a los comentados con detalle anteriormente para dicho valor del ángulo.

En todos nuestros cálculos hemos fijado cotas máximas de error  $\epsilon = 10^{-6}$  y, como se ha comentado antes, hemos usado mallados con resoluciones que varían desde  $60 \times 40$  para valores del ángulo  $\alpha$  intermedios hasta  $100 \times 40$  para valores del ángulo  $\alpha$  cercanos a los extremos. En todo el conjunto de valores del ángulo  $\alpha$  considerado, encontramos que la forma de los tres campos escalares es similar a la comentada anteriormente para el ángulo  $\alpha = 36^\circ$ . En particular, se observa el decaimiento de la densidad de carga al aumentar la distancia al vértice del cono y se encuentra que la densidad de carga es nula en el eje.

Por otra parte, en la figura 7.8 se muestra la estadística de la distribución angular de la carga emitida, obtenida en ambas estrategias, en función del ángulo del cono  $\alpha$ . Los resultados obtenidos son los que se esperaban, habida cuenta de la variación de  $\tilde{r}_s$  con  $\alpha$ . Para ángulos muy próximos al valor máximo de  $\alpha$  considerado (es decir,  $46^\circ$ ), el valor de  $\tilde{r}_1$  que se fija en la Estrategia A ( $\tilde{r}_1 = 15$ ) es mucho menor que el que se fija en la Estrategia B ( $\tilde{r}_1 = 100 \tilde{r}_s$ ) y las diferencias entre los resultados obtenidos son notables. Para ángulos menores que  $40^\circ$ , el valor de  $\tilde{r}_1$  fijado en la Estrategia A ya supera en 40 veces el correspondiente valor de  $\tilde{r}_s$  y los resultados encontrados en las dos estrategias son muy similares. Por ejemplo, en el caso  $\alpha = 31^\circ$  el valor  $\tilde{r}_1 = 15$ , fijado en la Estrategia A, supera en 250 su valor de  $\tilde{r}_s$  y los resultados encontrados en las dos estrategias son idénticos. Conforme se consideran ángulos más próximos

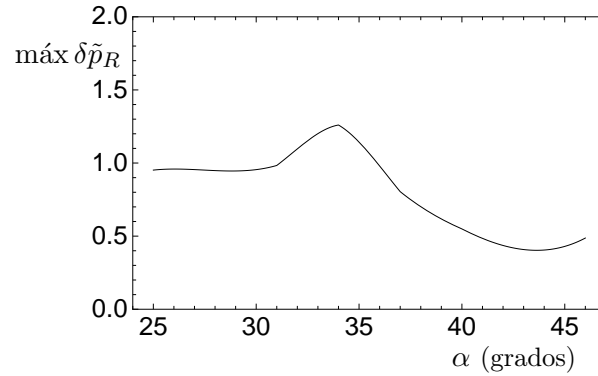


Figura 7.9: Evaluación de la condición de balance en función de  $\alpha$  (Estrategia B).

al valor mínimo de  $\alpha$  (esto es,  $25^\circ$ ), el valor  $\tilde{r}_1 = 15$  (fijado en la Estrategia A) se va haciendo mucho mayor que el valor  $100\tilde{r}_s$  (fijado en la Estrategia B), pero los resultados de las dos estrategias no difieren mucho. Esto puede observarse, en particular, en el ángulo de  $25^\circ$ , en el cual el valor de  $\tilde{r}_1 = 15$  supera en 1303 veces su valor de  $\tilde{r}_s$ .

Lo anterior parece mostrar que cuando el cociente  $\tilde{r}_1/\tilde{r}_s$  se hace muy grande, la independencia de los resultados con  $\tilde{r}_1$  también se hace mayor. De esta forma, cuando el valor de este cociente supera un cierto valor, los resultados se pueden considerar aproximadamente independientes del valor de  $\tilde{r}_1$ , tanto más cuanto mayor sea el valor de dicho cociente. Por esta razón, la Estrategia B parece más apropiada para comparar resultados correspondientes a diferentes valores del semiángulo del cono líquido,  $\alpha$ . En nuestro caso particular, el valor elegido para este cociente,  $\tilde{r}_1/\tilde{r}_s = 100$ , es lo suficientemente grande como para proporcionar una razonable independencia de los resultados con  $\tilde{r}_1$ . En consecuencia, el análisis de la distribución angular de la carga emitida en función del ángulo  $\alpha$  se hará asumiendo los resultados obtenidos usando la Estrategia B. En este sentido, dichos resultados (ver la correspondiente gráfica de la figura 7.8) indican que la anchura del haz aumenta al disminuir el semiángulo del cono líquido, lo cual se encuentra en los experimentos [23]. Esta tendencia no se observa cerca del ángulo mínimo considerado,  $\alpha = 25^\circ$ , muy posiblemente porque, cerca de este ángulo, la condición inicial se llega a fijar en un valor de  $\tilde{r}_0$  muy próximo al valor de  $\tilde{r}_s$ , lo cual no es correcto (recordar que, estrictamente, debe cumplirse la condición  $\tilde{r}_0 \ll \tilde{r}_s$ ).

Como se ha indicado antes, la condición de equilibrio mecánico sobre la superficie del cono no se satisface para ningún valor del semiángulo  $\alpha$ . En todas nuestras simulaciones hemos encontrado que el error, dado por la función  $\delta\tilde{p}_R(\tilde{r})$  (ver ecuación (7.20)), toma siempre su valor máximo a distancias en torno al valor de  $\tilde{r}_0$ , donde se fija la condición inicial, y tiende a cero a distancias grandes del vértice, es decir, la misma tendencia observada en el ejemplo correspondiente a  $\alpha = 36^\circ$  (recordar figura 7.7). Además, por observación de la figura 7.9, inferimos que el valor máximo del error,  $\text{máx } \delta\tilde{p}_R$ , debería aumentar al disminuir el valor del ángulo  $\alpha$ , tendencia que teóricamente se habría obtenido si se hubiera fijado el mismo valor del cociente  $\tilde{r}_0/\tilde{r}_s \ll 1$  en todo el rango de valores de  $\alpha$ .

### 7.2.3. Discusión

La principal conclusión que se deduce del análisis realizado es el no cumplimiento estricto de la hipótesis de una forma cónica para la interfase líquida, al menos fuera de la inmediata vecindad del vértice del cono. La hipótesis de una interfase líquida, infinita y perfectamente cónica con semiángulo  $\alpha$  ha sido asumida a lo largo de todo este trabajo, y nuestro análisis parece mostrar que esto sólo es estrictamente cierto en el límite  $r \rightarrow 0$ . Esto lleva, de una forma natural, a resolver el problema generalizado (y considerablemente más complejo) que pasa por obtener la forma modificada de la interfase líquida como parte de la solución del problema. Este problema queda fuera del ámbito de este trabajo; no obstante, es interesante hacer algunas consideraciones sobre el mismo.

En el problema generalizado, la forma de interfase líquida debe venir representada matemáticamente por una cierta función,  $\theta = \theta(r)$ , desconocida a priori, y que presenta el siguiente comportamiento asintótico. Por un lado, cuando  $r \rightarrow 0$ , entonces  $\theta \rightarrow \pi - \alpha$ , donde el ángulo  $\alpha \in (\alpha_M, \alpha_T)$  representa el ángulo del menisco en el vértice. Por otro lado, cuando  $r \rightarrow \infty$ , entonces  $\theta \rightarrow \pi - \alpha_T$ ; es decir, lejos del vértice el ángulo de la interfase sería el de Taylor, lo cual resolvería las dificultades que encontramos al fijar la condición de campo lejano para el potencial eléctrico  $\phi$ . Este problema incluye un parámetro más, la presión del líquido relativa al medio externo,  $\Delta p$ , el cual también es desconocido. De esta forma, la condición de equilibrio mecánico sobre la interfase (ver ecuación (2.47)), pasa a ser una ecuación diferencial más del problema, del cual, una vez resuelto, se obtienen los tres campos escalares,  $\phi$ ,  $\psi$  y  $n$ , la forma de la interfase,  $\theta = \theta(r)$ , y el término de presión,  $\Delta p$ . Como en el caso ideal considerado en este trabajo, el ángulo del menisco en el vértice  $\alpha$  permanece como un parámetro libre del problema y quedaría determinado por la corriente total emitida  $I$ , fijando un electrodo extractor a una cierta distancia y extendiendo el problema a distancias de orden el radio del tubo capilar,  $r_c$ .

A pesar de que la hipótesis ideal de una interfase de forma cónica no es estrictamente válida, podemos afirmar que los resultados numéricos proporcionados por el problema regular (ver sección 7.1) son razonables, especialmente si la condición de campo lejano se prescribe a una distancia  $r_1 \gg r_s$ . Por otra parte, si la condición de campo lejano se prescribe a la misma distancia relativa al correspondiente valor de  $r_s$  en todo el rango de ángulos  $\alpha \in (\alpha_M, \alpha_T)$ , esto es, se fija el mismo valor del cociente  $k_1 = r_1/r_s \gg 1$  para todos los valores del ángulo  $\alpha$ , obtenemos un criterio correcto de análisis en función del ángulo del cono, ya que permite comparar los resultados correspondientes a valores distintos del ángulo  $\alpha$  en igualdad de condiciones. Es más, como se explica debajo, este criterio parece reproducir las condiciones típicas de operación en experimentos con electrosprays en vacío (ver, entre otros, [8, 9] y [23]).

Recordemos que en un montaje experimental típico (ver figura 2.5) se considera un electrodo extractor a tierra, a una distancia fija  $l_e$  del vértice de orden el radio capilar  $r_c$ , de forma que el tubo capilar se carga a un cierto potencial positivo  $v_e$  relativo al extractor, el cual debe superar un cierto valor umbral. Al variar el caudal del líquido inyectado,  $Q$ , varía la corriente total emitida  $I$  y se observan cambios en el semiángulo del menisco  $\alpha$ . En estas condiciones, el voltaje  $v_e$  no varía o varía muy poco. En resumen, la distancia  $l_e$  y el voltaje  $v_e$  son constantes conocidas en el experimento, del cual se obtiene la relación  $\alpha = \alpha(I)$ , de manera que  $\alpha$  disminuye cuando  $I$  aumenta [8, 9]. En nuestro problema teórico consideramos distancias  $r \ll r_c$ ; no obstante, podemos considerar que la correspondiente condición de contorno sobre el electrodo extractor es sustituida por la condición de campo lejano, prescrita a una distancia  $r_1 = k_1 r_s$ , donde

$k_1 \gg 1$  es una constante dada, lo cual puede escribirse en la forma

$$\frac{r_1}{k_1} = \tilde{r}_s \ell. \quad (7.22)$$

Por otra parte, el potencial eléctrico lejano cerca del eje, dado por  $\phi_1 = \phi_\infty(r_1, 0)$ , está dado por (ver ecuaciones (7.4) y (7.6)):

$$\phi_1 = -\tilde{r}_1^{1/2} p_\alpha(x_\infty) \phi_{sc} = -\left(\frac{\gamma}{\epsilon_0}\right)^{1/2} r_1^{1/2} p_\alpha(x_\infty), \quad (7.23)$$

donde la función  $p_\alpha(x)$  está definida en la ecuación (2.16) y hemos usado la definición de  $\phi_{sc}$  (tabla 3.4). Supongamos que fijamos el valor de  $r_1$ , esto es, consideramos que  $r_1$  es también una constante conocida en el intervalo  $\alpha_M < \alpha < \alpha_T$ . Entonces, el potencial  $\phi_1$  queda determinado. Además, puede comprobarse sin dificultad que el valor de  $p_\alpha(x_\infty)$  experimenta una escasa variación con el ángulo  $\alpha$  en el intervalo  $\alpha_M < \alpha < \alpha_T$  (apenas, del 14%). Por esta razón, el valor de  $\phi_1$  es aproximadamente constante en ese intervalo de valores de  $\alpha$ . En consecuencia, al reemplazar la condición de contorno *experimental* sobre el extractor, la cual requiere dos constantes conocidas ( $l_e$  y  $v_e$ ) por la condición de contorno de campo lejano, también con dos constantes conocidas ( $k_1$  y  $r_1$ ), se reproducen aproximadamente las condiciones del laboratorio, tal como se había anticipado.

Como ya se ha dicho, la obtención teórica de la relación  $\alpha = \alpha(I)$  requeriría conocer la geometría particular del electrodo extractor y resolver el problema a distancias de orden el radio capilar. Por esta razón, dicha relación no puede ser formalmente obtenida de nuestro análisis. No obstante, teniendo en cuenta el razonamiento del párrafo anterior, sí se puede obtener una forma aproximada de la relación  $\alpha = \alpha(I)$ . En efecto, si se introduce la definición de la longitud  $\ell$  (ver ecuación (3.96)) en la ecuación (7.22) se obtiene

$$I^{4/3} \tilde{r}_s = \frac{r_1}{k_1} \gamma \left(\frac{e^2 \epsilon_0}{m_d^2}\right)^{1/3}. \quad (7.24)$$

Asumiendo que  $r_1$  sea constante y dada la relación existente entre  $\tilde{r}_s$  y  $\alpha$  (ver figura 5.2), encontramos que la ecuación (7.24) proporciona realmente una relación funcional entre el semiángulo del cono  $\alpha$  y la corriente  $I$ . En particular, predice un valor más pequeño del ángulo  $\alpha$  cuando el valor de la corriente  $I$  aumenta, tendencia observada en los experimentos [8, 9]. Además, considerando los comportamientos asintóticos cerca de los ángulos límite, se encuentra que  $I = 0$  cuando  $\alpha \rightarrow \alpha_T$  y  $I \rightarrow \infty$  en el límite opuesto  $\alpha \rightarrow \alpha_M$ .

En resumen, los resultados numéricos obtenidos por medio de la Estrategia B (donde  $k_1 = 100$ ) parecen proporcionar una descripción realista del electrospray emitido en todo el rango de valores del semiángulo del cono  $\alpha$ . En particular, nuestros resultados predicen que haces más anchos y valores menores del ángulo  $\alpha$  corresponden a valores mayores de la corriente  $I$ , en completo acuerdo con lo observado experimentalmente. En cualquier caso, la futura resolución (vía SEM) del problema generalizado con interfase líquida de forma desconocida a priori podrá servir para testar los resultados numéricos obtenidos con la hipótesis ideal de una interfase líquida con forma cónica perfecta y, en definitiva, evaluar el grado de validez de dicha hipótesis.

# Capítulo 8

## Conclusiones generales y trabajo futuro

### 8.1. Conclusiones generales

La cuestión tratada en este trabajo corresponde al análisis detallado del Modelo Euleriano Simplificado (SEM) y su posible aplicación a la descripción del fenómeno de la dispersión de carga en electrosprays, incluyendo los efectos de carga espacial. Este modelo está basado en la ecuación de continuidad y en la ecuación de Newton escrita en forma euleriana por una parte, y la ecuación de Poisson para el potencial eléctrico por otra. Repasemos, a continuación, el problema particular considerado.

Las principales hipótesis que se han asumido en el análisis son las siguientes:

1. Hipótesis del continuo, lo que permite la descripción del electrospray con un modelo euleriano por medio de tres campos: la densidad numérica de gotas  $n$ , la velocidad  $\mathbf{v}$  y el potencial eléctrico  $\phi$ .
2. Régimen estacionario, por lo que los tres campos dependen sólo de la posición respecto a un origen dado.
3. Simetría azimutal, por lo que la dependencia espacial está dada sólo por dos coordenadas espaciales independientes.
4. Líquido infinitamente conductor con tensión superficial  $\gamma$  conocida e interfase perfectamente cónica.
5. Electrospray monodisperso, esto es, formado por gotas idénticas con masa  $m_d$  y carga  $e$  que se supondrán conocidas, las cuales son emitidas desde una pequeña parte de la superficie del cono líquido (la cual incluye el vértice) con la misma velocidad (cero, en nuestros cálculos) y no se evaporan después de ser emitidas.

Nuestro trabajo se ha centrado en la parte del dominio del problema correspondiente a la vecindad del vértice del cono que abarca distancias pequeñas comparadas con las dimensiones físicas del tubo capilar. En esta región del espacio los efectos de carga espacial son significativos y, necesariamente, deben tenerse en cuenta. Con las hipótesis asumidas, el problema matemático se reduce a la obtención de los tres campos ( $n$ ,  $\mathbf{v}$  y  $\phi$ ), los cuales, usando coordenadas



esféricas, dependen sólo de la coordenada radial  $r$  y la coordenada angular polar  $\theta$ . El sistema de ecuaciones en derivadas parciales para los tres campos es el formado por la ecuación del momento para las partículas emitidas, la ecuación de Poisson y la ecuación de continuidad. Estas ecuaciones deben resolverse junto con las condiciones de contorno apropiadas sobre la interfase líquida, la condición de campo lejano fijada en el infinito y las condiciones de regularidad en el eje. En todo el problema se ha asumido que la corriente eléctrica transportada por el electropray,  $I$ , es un dato y, por tanto, conocida. A pesar de las simplificaciones que introducen las hipótesis anteriores, la resolución del problema es complicada, debido a dos razones. En primer lugar, la complejidad de las ecuaciones, lo que implica que el problema sólo sea susceptible de resolverse de una forma numérica. En segundo lugar, la singularidad de la densidad de carga existente sobre la superficie de emisión, la cual debe resolverse de una forma analítica como un paso previo a la resolución numérica del problema completo.

Podemos decir que todos los objetivos inicialmente propuestos para esta tesis han podido cumplirse en mayor o menor medida. Las aportaciones y resultados más importantes de nuestro trabajo se pueden resumir en los puntos siguientes.

1. Se ha demostrado que, con las hipótesis asumidas (régimen estacionario, simetría azimutal y partículas emitidas desde la interfase líquida con la misma energía cinética más energía potencial), el campo de velocidades del electropray  $\mathbf{v}$  es irrotacional, es decir, deriva del gradiente de un campo escalar o potencial de velocidad  $\psi$ . De esta forma, la descripción del electropray puede hacerse por medio de sólo tres campos escalares: el potencial de velocidad  $\psi$ , el potencial eléctrico  $\phi$  y la densidad numérica de las partículas cargadas  $n$ .

2. Se ha introducido una longitud característica para el problema, la cual está definida por el tamaño de la región de carga espacial, o región donde los efectos de carga espacial son dominantes. Esta región abarca la inmediata vecindad del vértice del cono, de orden mucho menor que las dimensiones capilares, y el radio de la misma,  $\ell$ , ha sido estimado en términos de los cuatro parámetros independientes del problema: masa  $m_d$  y carga  $e$  de las gotas, tensión superficial del líquido  $\gamma$  y corriente total emitida  $I$ , por medio de análisis dimensional. De esta forma, la ausencia de una longitud característica geométrica en el problema sugiere elegir el radio  $\ell$  como longitud característica. Esto ha permitido escribir las ecuaciones del SEM en forma adimensional, escalando todas las magnitudes físicas con sus correspondientes valores en la región de carga espacial.

3. Se ha implementado un algoritmo numérico basado en el Método de Diferencias Finitas para describir la dispersión de carga por medio del SEM. Las tres ecuaciones del SEM han sido discretizadas usando un mallado uniforme mediante un esquema en diferencias finitas de orden dos. En particular, para simular condiciones realistas de electrosprays, se necesita una alta resolución espacial cerca del vértice. Por esta razón, se ha introducido un cambio de variable en la coordenada radial, de manera que se pueda usar el mallado uniforme en todo el dominio físico del problema, pero posibilitando el cálculo de los campos en un mayor número de nodos conforme nos acercamos al vértice. El algoritmo se fundamenta en un esquema recursivo que permite, en cada iteración, la obtención sucesiva de los campos resolviendo, numéricamente y una a una, las tres ecuaciones del modelo hasta llegar a un punto de convergencia con una cota

de error fijada a priori.

Este algoritmo ha sido probado, con éxito, para estudiar numéricamente la dispersión de carga eléctrica en vacío procedente de un cono de Taylor, pero evitando la singularidad que la densidad de carga espacial presenta sobre la superficie de emisión. Esto se ha hecho considerando un cono de Taylor redondeado, esto es, aproximando la punta del cono por una pequeña superficie esférica con un radio dado,  $r_0 > 0$ , desde la cual asumimos que se emite la carga eléctrica con una cierta velocidad inicial,  $v_i > 0$ , fijada a priori, y de forma que la densidad de gotas sobre dicha superficie es la dada por una función  $n_0$ , que también debe ser prescrita. Se ha considerado el caso particular en el que la distribución inicial de carga  $n_0$  sea la dada por una gaussiana con máximo de carga en el eje. El principal resultado encontrado es que la distribución gaussiana prescrita sobre la superficie esférica del cono evoluciona hacia un “haz hueco”, esto es, la carga se dispersa de forma que el máximo de carga se va desplazando hacia la periferia con un fuerte decaimiento de su valor en el eje. Este comportamiento tiene su explicación en la repulsión eléctrica existente entre las gotas del spray. De hecho, los resultados numéricos obtenidos parecen indicar que existe una velocidad de inyección mínima, por debajo de la cual la repulsión es tan grande que no puede emitirse carga eléctrica.

4. Se ha descrito la singularidad que presenta la densidad numérica de gotas  $n$  en el vértice del cono de Taylor. Usando el hecho de la ausencia de una longitud geométrica característica en el límite de pequeñas distancias del vértice del cono, la singularidad ha sido descrita por medio de soluciones autosemejantes del SEM en coordenadas esféricas  $(r, \theta)$ , esto es, soluciones separables en parte radial y en parte angular, donde la dependencia radial está descrita por leyes de potencias y con exponentes dados en términos de un valor propio que debe obtenerse como parte de la solución en cada problema particular.

El comportamiento asintótico del sistema en la inmediata vecindad del vértice del cono, esto es, en el límite  $r \rightarrow 0$ , está dado en términos de soluciones autosemejantes. El análisis del sistema en este límite constituye la denominada parte singular del problema, y los principales resultados obtenidos de este análisis son los siguientes:

- La única dependencia radial compatible con la condición de equilibrio mecánico sobre la interfase líquida es la dada por:  $\psi \propto r^{5/4}$ ,  $\phi \propto r^{1/2}$  y  $n \propto r^{-3/2}$ .
- El semiángulo del cono líquido,  $\alpha$ , permanece como un parámetro libre en la inmediata vecindad del vértice del cono.
- El ángulo  $\alpha$  sólo puede tomar valores entre un ángulo mínimo,  $\alpha_M \simeq 21,89^\circ$ , y el ángulo de Taylor  $\alpha_T \simeq 49,29^\circ$ .
- La densidad numérica  $n$  no está acotada sobre la superficie de emisión (aunque la divergencia es integrable), pero de una forma tal que la densidad de corriente  $\mathbf{J}$  permanece acotada sobre esta superficie.
- La densidad numérica  $n$  es cero en el eje de simetría,  $\theta = 0$ .
- El radio de la superficie de emisión,  $r_s$ , muestra una fuerte dependencia con el semiángulo  $\alpha$ , con un comportamiento tal que  $r_s \rightarrow 0$  cuando  $\alpha \rightarrow \alpha_M$  y  $r_s \rightarrow \infty$  cuando  $\alpha \rightarrow \alpha_T$ .

- Valores más pequeños del ángulo  $\alpha$  corresponden a haces más anchos, mientras que valores más grandes de  $\alpha$  corresponden a haces más estrechos.
- Se ha observado que este tipo de emisión no está limitado por carga espacial, ya que, como consecuencia directa de la condición de balance de esfuerzos sobre la interfase, el campo eléctrico sobre la superficie de emisión no es nulo en ningún caso.

5. Se ha investigado, con detalle, el fenómeno de la emisión limitada por carga espacial. Por medio de la ecuación de Newton, hemos deducido que, de acuerdo con el SEM considerado en este trabajo, la emisión en el límite de un campo externo nulo debería implicar que toda la carga debería salir del propio vértice del cono. Este problema ha sido analizado con detalle, en términos de funciones de semejanza del SEM. El análisis conduce, inevitablemente, a una inconsistencia en la condición de conservación de la carga, lo que implica que la emisión desde el vértice del cono es físicamente imposible. En consecuencia, la conclusión definitiva es que el SEM no permite describir el mencionado fenómeno, al menos en la hipótesis de una interfase líquida perfectamente cónica.

6. Se ha considerado el problema en el que la emisión de carga ocurra desde un filamento líquido conductor, el cual puede asimilarse a una superficie líquida infinitamente aguda (esto es, con semiángulo  $\alpha \rightarrow 0$ ). En este sentido, el problema puede considerarse un caso límite del problema general que estamos considerando en este trabajo. La alta simetría del problema cerca del extremo del filamento posibilita, otra vez, que el comportamiento asintótico de los campos cerca de este punto pueda obtenerse por medio de soluciones autosemejantes del SEM. En este sentido, el principal resultado obtenido del análisis del correspondiente problema angular es la ley  $n \propto r^{-1,6308}$  para la densidad de carga cerca del extremo del filamento.

El interés de este problema es notable, pues se ha justificado que la ley  $n \propto r^{-1,6308}$  puede representar la forma asintótica de la densidad de carga cerca del vértice del *jet* en un *cone-jet* o cono-chorro, régimen que se observa frecuentemente en los experimentos de electrosprays en vacío.

7. Se ha estudiado numéricamente el comportamiento del sistema lejos del vértice del cono de Taylor. En particular, se ha usado el algoritmo numérico implementado para el SEM, basado en diferencias finitas, para prolongar las soluciones obtenidas en términos de funciones autosemejantes ( $\psi \propto r^{5/4}$ ,  $\phi \propto r^{1/2}$  y  $n \propto r^{-3/2}$ ), válidas en el límite  $r \rightarrow 0$ , a regiones más extensas, abarcando distancias de orden del tamaño de la superficie de emisión,  $r_s$ , o mayores. En esta parte del problema (o problema regular) el semiángulo del cono  $\alpha$  permanece, aún, como un parámetro libre en el intervalo físicamente admisible  $\alpha_M < \alpha < \alpha_T$ .

El problema regular ha sido resuelto para un amplio conjunto de valores de  $\alpha$  en dicho intervalo. El principal resultado que se deduce de nuestros cálculos es que no existe ningún valor del ángulo  $\alpha$  compatible con la condición de equilibrio mecánico sobre la superficie del cono, más allá de la estricta vecindad del vértice. Esto invalida estrictamente la hipótesis ideal considerada en todo nuestro trabajo por la que se asume una forma cónica para la interfase líquida. A pesar del no cumplimiento estricto de dicha hipótesis, los resultados numéricos obtenidos

proporcionan una descripción realista del electrospray emitido. Estos resultados se resumen en los tres puntos siguientes:

- Se observa un decaimiento de carga conforme aumenta la distancia radial  $r$ .
- En puntos cerca del semieje  $\theta = 0$  la densidad de carga  $n$  está dada, aproximadamente, por la correspondiente función autosemejante. En particular, encontramos que la densidad de carga es cero en los puntos del semieje (resultado de “haz hueco”).
- Los haces obtenidos tienen una frontera física nítida y son más estrechos conforme aumenta el semiángulo  $\alpha$ , tendencia dada también por las soluciones autosemejantes.

Finalmente, la relación  $\alpha = \alpha(I)$  no puede ser deducida formalmente del análisis numérico realizado. No obstante, el SEM predice una relación funcional teórica entre el semiángulo  $\alpha$  y la corriente total emitida  $I$ . Según esta relación, valores de  $\alpha$  más pequeños corresponden a valores de  $I$  más grandes, de forma que  $I \rightarrow 0$  cuando  $\alpha \rightarrow \alpha_T$  y  $I \rightarrow \infty$  cuando  $\alpha \rightarrow \alpha_M$ . La relación predicha está en buen acuerdo con la tendencia observada en los experimentos (al menos para caudales pequeños, donde el cono es estable).

## 8.2. Trabajo futuro

Creemos que el trabajo realizado en esta tesis admite distintas extensiones. En primer lugar, aunque el problema central de nuestro trabajo es el estudio de electrosprays, se ha comentado que nuestro SEM puede aplicarse en otros problemas. En particular, el análisis matemático realizado de las soluciones autosemejantes del SEM se ha hecho de una forma general, preveyendo, precisamente, futuras aplicaciones a otros sistemas físicos (diodos cónicos, líneas electrizadas, problemas de redistribución de carga espacial, etc.).

Centrándonos ya en el tema tratado en este trabajo, todas las posibles líneas de investigación futura deben estar encaminadas a completar y generalizar el estudio que hemos realizado y a corregir las limitaciones del mismo. Comentemos algunas cuestiones de potencial interés.

1. La relación entre el semiángulo del cono  $\alpha$  y la corriente total emitida  $I$  no ha podido ser obtenida formalmente de nuestro análisis, pues ello requiere estudiar el comportamiento del sistema a distancias de orden el radio del tubo capilar  $r_c$ , introduciendo la geometría particular del electrodo extractor como una condición de contorno de campo lejano. En este sentido, a partir de una sencilla relación dimensional entre los distintos parámetros del sistema a grandes distancias del vértice, y usando la relación obtenida entre el radio de la superficie de emisión  $r_s$  y el ángulo  $\alpha$ , sólo se ha podido inferir una tendencia aproximada de dicha relación. Una extensión interesante del trabajo sería, desde luego, obtener la relación  $\alpha = \alpha(I)$  para una geometría particular dada para el electrodo extractor, y compararla con lo observado en los experimentos.

2. La hipótesis asumida de una interfase líquida con forma cónica sólo es válida, estrictamente, en el límite  $r \rightarrow 0$ . Ya se ha comentado que la mencionada hipótesis ha sido considerada para

simplificar el problema matemático. En efecto, debemos recordar que la condición de equilibrio mecánico estricta sobre la interfase incorpora un término de presión,  $\Delta p$ , el cual define la presión del líquido relativa al medio externo. En nuestro modelo se ha asumido directamente la forma cónica, lo que implica imponer que este término de presión es nulo,  $\Delta p = 0$ . De esta forma, la condición de balance se reduce sólo a una condición de contorno para el problema externo con la consiguiente simplificación. No obstante, la suposición  $\Delta p = 0$  no es correcta. Por contra, el término de presión  $\Delta p$  es desconocido a priori y debe ser obtenido del análisis, lo que, a la postre, permite obtener la forma de la interfase como parte de la solución del problema.

En consecuencia, una extensión razonable a este trabajo sería considerar el problema generalizado en el que la interfase líquida es desconocida a priori. La resolución de este problema requiere introducir la condición de balance completa, incluyendo el término de presión  $\Delta p$ , como un parámetro desconocido. De esta forma, dicha condición de balance proporciona una ecuación diferencial más dentro del problema, lo que permite encontrar la forma modificada de la interfase líquida como parte de la solución. La resolución de este problema de frontera desconocida podría hacerse dentro del SEM, generalizando los análisis numéricos realizados en ausencia de carga espacial, disponibles en la literatura. En este sentido, los comportamientos asintóticos de los campos escalares dados en términos de soluciones autosemejantes, válidos en el límite  $r \rightarrow 0$ , podrían usarse para iniciar futuros cálculos numéricos. Más aún, es muy posible que dentro de este nuevo escenario, el SEM permita describir el fenómeno de la emisión limitada por carga espacial, cuestión que quedó pendiente en nuestro análisis.

3. La hipótesis que supone una forma perfectamente cónica para la interfase líquida es la más fuerte de todas las consideradas en nuestro análisis y, como se acaba de comentar, una futura línea de investigación pasa por relajar dicha hipótesis, lo cual puede hacerse dentro del SEM. Pero hay otras hipótesis más que también han sido asumidas en el presente trabajo con el fin de simplificar el análisis matemático y que podrían ser igualmente relajadas. En particular, el presente SEM podría generalizarse fácilmente para considerar el caso de electrosprays polidispersos, esto es, electrosprays constituidos por dos poblaciones de gotas distintas (principales y secundarias), algo que se observa usualmente en los experimentos. Igualmente, nuestro estudio podría también generalizarse relajando la hipótesis de conductor perfecto, esto es, considerando el caso de líquidos con una conductividad finita  $K$ , lo que implicaría incorporar al análisis el correspondiente problema de transporte dentro del líquido. La generalización al caso de líquidos con conductividad finita sería una extensión muy interesante, ya que, en principio, permitiría obtener una relación entre la corriente total  $I$  y el caudal del líquido  $Q$  y compararla con la encontrada en los experimentos ( $I \propto (KQ)^{1/2}$ ).

### 8.3. Aportaciones del trabajo

Algunas versiones preliminares de partes de este trabajo de investigación han sido presentadas en los siguientes congresos internacionales:

- C. Hernández-San José and M. Arias-Zugasti  
*Analysis of the Space Charge Singularity near the Taylor Cone Apex via Simplified Eulerian Model for Electrospray Beams in Vacuum*

Póster en 4th Iberian Meeting on Aerosol Science and Technology, RICTA2016. Aveiro, Portugal, 29/06/2016-01/07/2016.

- C. Hernández-San José and M. Arias-Zugasti  
*Analysis of Space Charge Region in Taylor Cone Apex via Simplified Eulerian Model for Electrospray Beams in Vacuum*  
Comunicación oral en EFMC11. 11th European Fluid Mechanics Conference. Sevilla, Spain, 12/09/2016-16/09/2016.
- C. Hernández-San José and M. Arias-Zugasti  
*Analysis of electrospray space charge singularity near the Taylor cone apex based on a simplified irrotational Eulerian model*  
Comunicación oral en Aerosol Technology, AT2018. Bilbao, Spain, 18/06/2018-20/06/2018.
- C. Hernández-San José and M. Arias-Zugasti  
*Description of space charge density in electrospray emission in vacuum via simplified irrotational Eulerian model*  
Póster en 6th Iberian Meeting on Aerosol Science and Technology, RICTA2018. Bilbao, Spain, 20/06/2018-22/06/2018.

El análisis asintótico de los puntos singulares del presente modelo matemático euleriano, y las correspondientes soluciones autosemejantes a las que da lugar en la inmediata vecindad del vértice (capítulo 5) ha sido publicado en:

- C. Hernández-San José and M. Arias-Zugasti  
*Analysis of the space charge singularity near the Taylor cone apex via simplified Eulerian model for electrospray beams in vacuum*  
Journal of Aerosol Science 118, 82-99, 2018.  
<https://doi.org/10.1016/j.jaerosci.2018.02.002>

El análisis de la emisión desde un filamento o punta electrificada (capítulo 6) y el análisis del SEM a distancias del vértice del orden del radio de la superficie de emisión (capítulo 7) serán enviados próximamente para su publicación en Chem. Eng. Sci. y en J. Aerosol Sci. respectivamente.



# Apéndice A

## Coordenadas cilíndricas rotadas

### A.1. Transformación de coordenadas

La figura A.1 muestra las coordenadas cilíndricas usuales  $(\rho, z)$  y las coordenadas cilíndricas rotadas  $(\rho', z')$  correspondientes a un punto dado  $P$  y los correspondientes vectores unitarios en los dos sistemas. En particular, los vectores unitarios correspondientes a las coordenadas cilíndricas  $(\rho, z)$  se denotan por  $\mathbf{u}_\rho$  y  $\mathbf{u}_z$  y los vectores unitarios correspondientes a las coordenadas cilíndricas  $(\rho, z)$  son  $\mathbf{u}_{\rho'}$  y  $\mathbf{u}_{z'}$ .

De la figura se deduce la relación entre los vectores de posición  $\mathbf{r}$  y  $\mathbf{r}'$  del punto  $P$  en los dos sistemas:

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 + \mathbf{r}', \quad (\text{A.1})$$

donde

$$\mathbf{r} = \rho \mathbf{u}_\rho + z \mathbf{u}_z, \quad (\text{A.2})$$

$$\mathbf{r}' = \rho' \mathbf{u}_{\rho'} + z' \mathbf{u}_{z'}, \quad (\text{A.3})$$

$$\mathbf{r}_0 = r_0 \cos \alpha_T \mathbf{u}_\rho + r_0 \sin \alpha_T \mathbf{u}_z. \quad (\text{A.4})$$

Por otra parte, es fácil deducir la relación entre los vectores unitarios en ambos sistemas:

$$\mathbf{u}_{\rho'} = \cos \alpha_T \mathbf{u}_\rho + \sin \alpha_T \mathbf{u}_z, \quad \mathbf{u}_{z'} = \sin \alpha_T \mathbf{u}_\rho - \cos \alpha_T \mathbf{u}_z, \quad (\text{A.5})$$

y

$$\mathbf{u}_\rho = \cos \alpha_T \mathbf{u}_{\rho'} + \sin \alpha_T \mathbf{u}_{z'}, \quad \mathbf{u}_z = \sin \alpha_T \mathbf{u}_{\rho'} - \cos \alpha_T \mathbf{u}_{z'}. \quad (\text{A.6})$$

Insertando (A.2-A.4) en (A.1) y usando (A.5) llegamos a una combinación lineal de los vectores independientes  $\mathbf{u}_\rho$  y  $\mathbf{u}_z$  de las que se deduce finalmente las ecuaciones de transformación de coordenadas entre ambos sistemas:

$$\rho' = \cos \alpha_T \rho + \sin \alpha_T z - r_0, \quad z' = \sin \alpha_T \rho - \cos \alpha_T z, \quad (\text{A.7})$$

y

$$\rho = \cos \alpha_T \rho' + \sin \alpha_T z' + \cos \alpha_T r_0, \quad z = \sin \alpha_T \rho' - \cos \alpha_T z' + \sin \alpha_T r_0. \quad (\text{A.8})$$



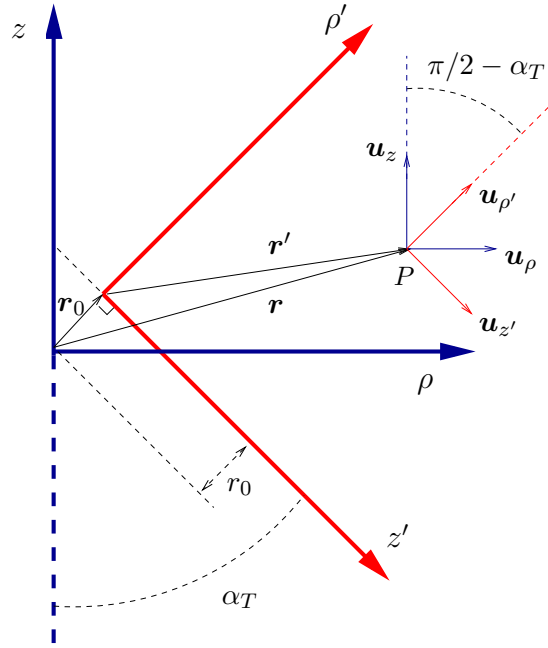


Figura A.1: Transformación de coordenadas.

Veamos ahora como se transforman las componentes de un vector de coordenadas cilíndricas a coordenadas cilíndricas rotadas y viceversa. Supongamos un vector  $\mathbf{F}$  cuya representación en coordenadas cilíndricas y en coordenadas cilíndricas rotadas está dada respectivamente por

$$\mathbf{F} = F_\rho \mathbf{u}_\rho + F_z \mathbf{u}_z, \quad (\text{A.9})$$

$$\mathbf{F} = F_{\rho'} \mathbf{u}_{\rho'} + F_{z'} \mathbf{u}_{z'}. \quad (\text{A.10})$$

Usando (A.6) en (A.9) y comparando con (A.10) se obtiene

$$F_{\rho'} = \cos \alpha_T F_\rho + \sin \alpha_T F_z, \quad F_{z'} = \sin \alpha_T F_\rho - \cos \alpha_T F_z. \quad (\text{A.11})$$

La transformación inversa está dada por:

$$F_\rho = \cos \alpha_T F_{\rho'} + \sin \alpha_T F_{z'}, \quad F_z = \sin \alpha_T F_{\rho'} - \cos \alpha_T F_{z'}. \quad (\text{A.12})$$

## A.2. Operadores diferenciales

Sean  $\Psi(\rho', z')$  un campo escalar y  $\mathbf{F}(\rho', z')$  un campo vectorial en coordenadas cilíndricas rotadas  $(\rho', z')$ . La tabla A.1 muestra la forma que adoptan el gradiente de  $\Psi(\rho', z')$ , la divergencia de  $\mathbf{F}(\rho', z')$  y el laplaciano de  $\Psi(\rho', z')$  en dichas coordenadas.

Para la deducción de estas fórmulas tenemos que ver, en primer lugar, cómo se hace la transformación de las derivadas. Usando la regla de la cadena

$$\frac{\partial}{\partial \rho} = \frac{\partial \rho'}{\partial \rho} \frac{\partial}{\partial \rho'} + \frac{\partial z'}{\partial \rho} \frac{\partial}{\partial z'}, \quad \frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial \rho'}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \rho'} + \frac{\partial z'}{\partial z} \frac{\partial}{\partial z'}. \quad (\text{A.13})$$

Operación	Expresión
Gradiente de $\Psi(\rho', z')$	$\nabla\Psi = \frac{\partial\Psi}{\partial\rho'} \mathbf{u}_{\rho'} + \frac{\partial\Psi}{\partial z'} \mathbf{u}_{z'}$
Divergencia de $\mathbf{F}(\rho', z')$	$\nabla \cdot \mathbf{F} = \frac{\partial F_{\rho'}}{\partial\rho'} + \frac{1}{\rho' + \tan\alpha_T z' + r_0} (F_{\rho'} + \tan\alpha_T F_{z'}) + \frac{\partial F_{z'}}{\partial z'}$
Laplaciano de $\Psi(\rho', z')$	$\nabla^2\Psi = \frac{\partial^2\Psi}{\partial\rho'^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z'^2} + \frac{1}{\rho' + \tan\alpha_T z' + r_0} \left( \frac{\partial\Psi}{\partial\rho'} + \tan\alpha_T \frac{\partial\Psi}{\partial z'} \right)$

Tabla A.1: Gradiente, divergencia y laplaciano en las coordenadas cilíndricas rotadas  $(\rho', z')$ .

Teniendo en cuenta (A.7) obtenemos  $\partial\rho'/\partial\rho = \cos\alpha_T$ ,  $\partial z'/\partial\rho = \sin\alpha_T$ ,  $\partial\rho'/\partial z = \sin\alpha_T$  y  $\partial z'/\partial z = -\cos\alpha_T$ ; al sustituir esto en (A.13) queda finalmente

$$\frac{\partial}{\partial\rho} = \cos\alpha_T \frac{\partial}{\partial\rho'} + \sin\alpha_T \frac{\partial}{\partial z'}, \quad \frac{\partial}{\partial z} = \sin\alpha_T \frac{\partial}{\partial\rho'} - \cos\alpha_T \frac{\partial}{\partial z'}. \quad (\text{A.14})$$

Veamos primero la forma que adopta el gradiente del campo escalar  $\Psi$  en las coordenadas cilíndricas rotadas. En coordenadas cilíndricas  $(\rho, z)$ , tenemos

$$\nabla\Psi = \frac{\partial\Psi}{\partial\rho} \mathbf{u}_\rho + \frac{\partial\Psi}{\partial z} \mathbf{u}_z. \quad (\text{A.15})$$

Aplicando (A.14) a la función  $\Psi$ , recordando (A.6) y operando, podemos escribir la ecuación anterior en la forma

$$\nabla\Psi = \frac{\partial\Psi}{\partial\rho'} \mathbf{u}_{\rho'} + \frac{\partial\Psi}{\partial z'} \mathbf{u}_{z'}, \quad (\text{A.16})$$

que proporciona la fórmula del gradiente del campo escalar  $\Psi$  en las coordenadas cilíndricas rotadas  $(\rho', z')$ .

La divergencia del campo vectorial  $\mathbf{F}$  en las coordenadas rotadas se obtiene de una forma análoga. En coordenadas cilíndricas  $(\rho, z)$ , el campo vectorial  $\mathbf{F}$  se representa por (A.9) y su divergencia está dada por

$$\nabla \cdot \mathbf{F} = \frac{\partial F_\rho}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho} F_\rho + \frac{\partial F_z}{\partial z}. \quad (\text{A.17})$$

Aplicando (A.14) a las componentes  $F_\rho$  y  $F_z$  y usando (A.12), después de operar resulta

$$\frac{\partial F_\rho}{\partial\rho} = \cos^2\alpha_T \frac{\partial F_{\rho'}}{\partial\rho'} + \sin^2\alpha_T \frac{\partial F_{z'}}{\partial z'} + \sin\alpha_T \cos\alpha_T \left( \frac{\partial F_{z'}}{\partial\rho'} + \frac{\partial F_{\rho'}}{\partial z'} \right), \quad (\text{A.18})$$

$$\frac{\partial F_z}{\partial z} = \sin^2\alpha_T \frac{\partial F_{\rho'}}{\partial\rho'} + \cos^2\alpha_T \frac{\partial F_{z'}}{\partial z'} - \sin\alpha_T \cos\alpha_T \left( \frac{\partial F_{z'}}{\partial\rho'} + \frac{\partial F_{\rho'}}{\partial z'} \right), \quad (\text{A.19})$$

Teniendo en cuenta (A.18) y (A.19) junto con (A.8) y (A.12), la ecuación (A.17) se escribe en la forma

$$\nabla \cdot \mathbf{F} = \frac{\partial F_{\rho'}}{\partial\rho'} + \frac{1}{\rho' + \tan\alpha_T z' + r_0} (F_{\rho'} + \tan\alpha_T F_{z'}) + \frac{\partial F_{z'}}{\partial z'}, \quad (\text{A.20})$$

que da la expresión de la divergencia del campo  $\mathbf{F}$  en las coordenadas cilíndricas rotadas.

Por último, veamos el laplaciano del campo escalar  $\Psi(\rho', z')$ . Por definición

$$\nabla^2 \Psi = \nabla \cdot \nabla \Psi. \quad (\text{A.21})$$

Teniendo en cuenta (A.20) y (A.16) y operando se obtiene la fórmula del laplaciano en las coordenadas  $(\rho', z')$

$$\nabla^2 \Psi = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho'^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z'^2} + \frac{1}{\rho' + \tan \alpha_T z' + r_0} \left( \frac{\partial \Psi}{\partial \rho'} + \tan \alpha_T \frac{\partial \Psi}{\partial z'} \right). \quad (\text{A.22})$$

# Apéndice B

## Fórmulas en diferencias finitas

### B.1. Aproximaciones en diferencias finitas

Consideremos una función arbitraria de la variable independiente  $x$ , digamos  $f(x)$ , definida en un cierto intervalo cerrado y acotado  $I = [a, b]$ . Supongamos, además, que la función  $f$  junto con sus derivadas son funciones continuas en el intervalo  $I$ . Usando el teorema de Taylor [45], encontramos

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{1}{2}h^2f''(x) + \frac{1}{6}h^3f'''(x) + \dots \quad (\text{B.1})$$

y

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{1}{2}h^2f''(x) - \frac{1}{6}h^3f'''(x) + \dots, \quad (\text{B.2})$$

donde  $x, x+h, x-h \in I$ .

Sumando las expresiones (B.1) y (B.2), obtenemos

$$f(x+h) + f(x-h) = 2f(x) + h^2f''(x) + O(h^4), \quad (\text{B.3})$$

donde  $O(h^4)$  denota los términos que contienen potencias de  $h$  con exponente cuatro o mayor. Asumiendo que estos términos son pequeños en comparación con potencias de  $h$  más pequeñas, tenemos

$$f''(x) \approx \frac{1}{h^2} [f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)], \quad (\text{B.4})$$

que da una aproximación de orden dos (es decir,  $O(h^2)$ ) para  $f''(x)$ . Análogamente, restando ahora la ecuación (B.2) de la ecuación (B.1) y despreciando potencias de  $h$  de exponente igual o mayor que tres, queda

$$f'(x) \approx \frac{1}{2h} [f(x+h) - f(x-h)], \quad (\text{B.5})$$

que da una aproximación de orden dos ( $O(h^2)$ ) para  $f'(x)$ . Las fórmulas dadas por (B.4) y (B.5) son las fórmulas en *diferencias finitas centradas* de orden dos para la segunda y la primera derivada de la función  $f(x)$  respectivamente.

Notar que, en particular, la fórmula (B.5) aproxima la derivada de la función  $f(x)$  por la pendiente de la recta secante a la curva entre los puntos  $x = x-h$  y  $x = x+h$ . No obstante, la aproximación podría hacerse sustituyendo  $f'(x)$  por la pendiente de la recta secante a la

curva entre los puntos  $x$  y  $x = x + h$  obteniendo la correspondiente aproximación de  $f'(x)$  en *diferencias finitas progresivas*

$$f'(x) \approx \frac{1}{h} [f(x+h) - f(x)], \quad (\text{B.6})$$

o sustituyendo  $f'(x)$  por la pendiente de la recta secante a la curva entre los puntos  $x = x - h$  y  $x$  obteniendo la correspondiente aproximación de  $f'(x)$  en *diferencias finitas regresivas*

$$f'(x) \approx \frac{1}{h} [f(x) - f(x-h)]. \quad (\text{B.7})$$

Las fórmulas anteriores (B.6) y (B.7) se obtienen respectivamente de las ecuaciones (B.1) y (B.2) asumiendo que las potencias de  $h$  de exponente dos o mayor son despreciables; por tanto, ambas aproximaciones son de primer orden (es decir,  $O(h)$ ).

## B.2. Fórmulas en diferencias finitas de orden dos

Subdividamos el intervalo  $I$  en un conjunto de  $n_x + 1$  nodos con paso constante  $h$  definido por

$$h = \frac{b-a}{n_x}. \quad (\text{B.8})$$

Consideremos los puntos o nodos definidos por  $x = x_i$ , donde

$$x_i = a + i h \quad (i = 0, 1, 2, \dots, n_x). \quad (\text{B.9})$$

Denotaremos por  $f_i$  el valor de la función  $f(x)$  en los puntos  $x = x_i$ , es decir,

$$f_i \equiv f(x_i) = f(a + i h) \quad (i = 0, 1, 2, \dots, n_x). \quad (\text{B.10})$$

La misma notación será usada para representar el valor de la derivada (del orden que sea) de la función  $f(x)$  en los puntos  $x_i$ , en particular,

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_i \equiv f'(x_i) = f'(a + i h) \quad (i = 0, 1, 2, \dots, n_x), \quad (\text{B.11})$$

$$\left. \frac{d^2f}{dx^2} \right|_i \equiv f''(x_i) = f''(a + i h) \quad (i = 0, 1, 2, \dots, n_x). \quad (\text{B.12})$$

Un algoritmo para generar las fórmulas en diferencias finitas de orden cualesquiera para las derivadas de la función  $f(x)$  puede consultarse en [20]. En particular, la tabla B.1 muestra las fórmulas de aproximación en diferencias finitas de orden dos para la primera y la segunda derivada de la función  $f(x)$ . Estas fórmulas son válidas sólo para el caso de un mallado uniforme (paso  $h$  constante).

Es claro que todo lo anterior se puede extender sin dificultad a funciones de dos o más variables. Por ejemplo, consideremos una función de dos variables  $f(x, y)$ . El valor de la función en el punto  $(x = x_i, y = y_j)$  se denotaría por  $f_{i,j}$ . La fórmula en diferencias finitas centradas

Diferencias centradas	$\left. \frac{df}{dx} \right _i \approx \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} + O(h^2)$ $\left. \frac{d^2f}{dx^2} \right _i \approx \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} + O(h^2)$
Diferencias progresivas	$\left. \frac{df}{dx} \right _i \approx \frac{-3f_i + 4f_{i+1} - f_{i+2}}{2h} + O(h^2)$ $\left. \frac{d^2f}{dx^2} \right _i \approx \frac{2f_i - 5f_{i+1} + 4f_{i+2} - f_{i+3}}{h^2} + O(h^2)$
Diferencias regresivas	$\left. \frac{df}{dx} \right _i \approx \frac{3f_i - 4f_{i-1} + f_{i-2}}{2h} + O(h^2)$ $\left. \frac{d^2f}{dx^2} \right _i \approx \frac{2f_i - 5f_{i-1} + 4f_{i-2} - f_{i-3}}{h^2} + O(h^2)$

Tabla B.1: Fórmulas en diferencias finitas de orden dos para la primera y la segunda derivada de una función.

de orden dos para la derivada parcial con respecto a la variable  $x$  en ese punto vendría dada por

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{i,j} \approx \frac{f_{i+1,j} - f_{i-1,j}}{2h_x}, \quad (\text{B.13})$$

y la fórmula en diferencias finitas centradas de orden dos para la derivada parcial con respecto a la variable  $y$  en dicho punto vendría dada por

$$\left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{i,j} \approx \frac{f_{i,j+1} - f_{i,j-1}}{2h_y}, \quad (\text{B.14})$$

donde  $h_x$  y  $h_y$  son respectivamente los pasos correspondientes a las variables  $x$  e  $y$ . Análogamente, podríamos escribir las correspondientes fórmulas para todas las derivadas de orden dos, así como las correspondientes fórmulas en diferencias finitas progresivas y regresivas.



# Apéndice C

## Parámetros estadísticos

### C.1. Ángulo medio y desviación estándar

La distribución de carga del electrospray viene determinada matemáticamente por la función densidad numérica de gotas  $\tilde{n}(\tilde{\mathbf{r}})$ , la cual está definida en un cierto dominio  $V_\Gamma$ . En particular, usando coordenadas esféricas, podemos escribir  $\tilde{\mathbf{r}} = (\tilde{r}, \theta) \in V_\Gamma$ .

Para estudiar las propiedades estadísticas de la distribución espacial de carga eléctrica se introduce la función densidad de probabilidad (FDP) [39],  $f(\tilde{r}, \theta)$ , la cual se define formalmente por

$$f(\tilde{r}, \theta) = \begin{cases} \frac{\tilde{n}(\tilde{r}, \theta)}{\int \int_{V_\Gamma} \tilde{n}(\tilde{r}, \theta) \tilde{r}^2 \sin \theta \, d\tilde{r} \, d\theta} & \text{si } (\tilde{r}, \theta) \in V_\Gamma, \\ 0 & \text{si } (\tilde{r}, \theta) \notin V_\Gamma. \end{cases} \quad (\text{C.1})$$

La FDP permite, en particular, caracterizar la distribución de gotas a través del ángulo medio y su desviación estándar (ver debajo).

Consideremos una función arbitraria  $A(\tilde{r}, \theta)$ . Su valor medio se denota por  $\langle A(\tilde{r}, \theta) \rangle$  y, de acuerdo a la anterior FDP, se define [39] por

$$\langle A(\tilde{r}, \theta) \rangle = \int_0^\infty \int_0^\pi A(\tilde{r}, \theta) f(\tilde{r}, \theta) \tilde{r}^2 \sin \theta \, d\theta \, d\tilde{r}. \quad (\text{C.2})$$

En particular, el valor medio del ángulo (o ángulo medio),  $\langle \theta \rangle$ , se obtiene usando la fórmula anterior (ecuación (C.2)) con  $A(\tilde{r}, \theta) = \theta$ :

$$\langle \theta \rangle = \int_0^\infty \int_0^\pi \theta f(\tilde{r}, \theta) \tilde{r}^2 \sin \theta \, d\theta \, d\tilde{r}. \quad (\text{C.3})$$

Usando la definición dada por la ecuación (C.1) en la ecuación (C.3), podemos expresar  $\langle \theta \rangle$  en términos de la función  $\tilde{n}(\tilde{r}, \theta)$ :

$$\langle \theta \rangle = \frac{\int \int_{V_\Gamma} \theta \tilde{n}(\tilde{r}, \theta) \tilde{r}^2 \sin \theta \, d\tilde{r} \, d\theta}{\int \int_{V_\Gamma} \tilde{n}(\tilde{r}, \theta) \tilde{r}^2 \sin \theta \, d\tilde{r} \, d\theta} \quad (\text{C.4})$$



Finalmente, la desviación estándar del ángulo,  $\Delta\theta$  viene dada [39] por

$$\Delta\theta = (\langle\theta^2\rangle - \langle\theta\rangle^2)^{1/2}, \quad (\text{C.5})$$

donde  $\langle\theta\rangle$  está dada por la ecuación (C.4) y  $\langle\theta^2\rangle$  se calcula por medio de la ecuación (C.2), con  $A(\tilde{r}, \theta) = \theta^2$ :

$$\langle\theta^2\rangle = \frac{\int \int_{V_r} \theta^2 \tilde{n}(\tilde{r}, \theta) \tilde{r}^2 \sin\theta \, d\tilde{r} \, d\theta}{\int \int_{V_r} \tilde{n}(\tilde{r}, \theta) \tilde{r}^2 \sin\theta \, d\tilde{r} \, d\theta} \quad (\text{C.6})$$

## C.2. Parámetros a distancia constante

Es útil estudiar las propiedades estadísticas de la distribución de carga como función de la coordenada angular  $\theta$  para un valor fijo de la coordenada  $\tilde{r}$ , esto es, a  $\tilde{r}$  constante. Para ello, se introduce la función densidad de probabilidad condicional a  $\tilde{r} = \text{constante}$  (FDP-r) [39],  $f_r(\theta)$ , que se define por

$$f_r(\theta) = \frac{f(\tilde{r}, \theta)}{\int_0^\pi f(\tilde{r}, \theta) \tilde{r}^2 \sin\theta \, d\theta}, \quad (\text{C.7})$$

donde, en la fórmula anterior,  $f(\tilde{r}, \theta)$  es la FDP (ecuación (C.1)) y la variable  $\tilde{r}$  debe ser sustituida por la constante fijada. Por esta razón, una vez fijada la constante, la FDP-r es sólo una función de la variable  $\theta$ .

De una forma completamente análoga se obtiene el ángulo medio a distancia constante y su correspondiente desviación estándar por medio de la FDP-r. En efecto, consideremos la función  $A(\tilde{r}, \theta)$  para  $\tilde{r} = \text{constante}$ , la cual, efectivamente, será también una función sólo del ángulo:  $A_r(\theta)$ . El valor medio de  $A(\tilde{r}, \theta)$  para  $\tilde{r} = \text{constante}$ ,  $\langle A(\tilde{r}, \theta) \rangle_r$ , se obtiene por medio de la FDP-r

$$\langle A(\tilde{r}, \theta) \rangle_r = \int_0^\pi A_r(\theta) f_r(\theta) \tilde{r}^2 \sin\theta \, d\theta. \quad (\text{C.8})$$

En particular, el valor medio del ángulo  $\theta$  para  $\tilde{r} = \text{constante}$ ,  $\langle\theta\rangle_r$ , está dado por

$$\langle\theta\rangle_r = \int_0^\pi \theta f_r(\theta) \tilde{r}^2 \sin\theta \, d\theta, \quad (\text{C.9})$$

y su desviación estándar,  $\Delta\theta_r$ , se obtiene por medio de  $\Delta\theta_r = (\langle\theta^2\rangle_r - \langle\theta\rangle_r^2)^{1/2}$ , donde  $\langle\theta\rangle_r$  está dada por la ecuación (C.9) y  $\langle\theta^2\rangle_r$  se calcula usando la ecuación (C.8):

$$\langle\theta^2\rangle_r = \int_0^\pi \theta^2 f_r(\theta) \tilde{r}^2 \sin\theta \, d\theta. \quad (\text{C.10})$$

Es importante notar que los parámetros  $\langle\theta\rangle_r$  y  $\Delta\theta_r$  dependen del valor de  $\tilde{r}$  que haya sido fijado. Por esta razón, considerando todos los valores posibles de la coordenada  $\tilde{r}$ , obtenemos que los parámetros anteriores llegan a ser realmente funciones de  $\tilde{r}$ .

# Apéndice D

## Estudio de soluciones analíticas en los semiejes y soluciones exactas del SEM

### D.1. Soluciones analíticas en los semiejes

Vamos a probar que existen soluciones del sistema angular que son analíticas en el semieje positivo  $x = 1$  o en el semieje negativo  $x = -1$  (es decir, desarrollables en serie de Taylor [17]). De hecho, mostraremos que la Option 1B de la tabla 5.2 lleva a soluciones analíticas en el semieje positivo  $x = 1$ . El mismo razonamiento podría hacerse para el otro semieje.

Busquemos una solución del sistema angular (5.10)-(5.12) que sea analítica en  $x = 1$ , esto es, una solución en la que cada una de las funciones angulares  $F(x)$ ,  $p(x)$  y  $N(x)$  sea la suma de una serie de Taylor en torno al punto  $x = 1$ :

$$F(x) = \sum_{i=0}^{\infty} f_i(x-1)^i, \quad (\text{D.1})$$

$$p(x) = \sum_{i=0}^{\infty} p_i(x-1)^i, \quad (\text{D.2})$$

$$N(x) = \sum_{i=0}^{\infty} n_i(x-1)^i. \quad (\text{D.3})$$

Introduciendo las series (D.1)-(D.3) en el sistema angular (5.10)-(5.12) se obtienen relaciones de recurrencia para los coeficientes de las series. Así, introduciendo las series (D.1) y (D.2) en la ecuación (5.10), encontramos

$$p_0 = m^2 f_0^2, \quad (\text{D.4})$$

$$p_1 = 2m^2 f_0 f_1 - 2f_1^2, \quad (\text{D.5})$$

$$\begin{aligned}
 p_i &= m^2 (f_i f_0 + f_{i-1} f_1) - 2i f_i f_1 \\
 &+ \sum_{k=0}^{i-2} \left[ m^2 f_{i-k-2} f_{k+2} - 2(i-k-1)(k+2) f_{i-k-1} f_{k+2} \right. \\
 &\left. - (i-k-1)(k+1) f_{i-k-1} f_{k+1} \right] \quad (i = 2, 3, 4, \dots). \quad (D.6)
 \end{aligned}$$

Similarmente, introduciendo las series (D.2) y (D.3) en la ecuación (5.11) se obtiene

$$\begin{aligned}
 n_i &= -2(i+1)^2 p_{i+1} \\
 &+ [(2m-2)(2m-1) - i(i+1)] p_i \quad (i = 0, 1, 2, \dots). \quad (D.7)
 \end{aligned}$$

Finalmente, introduciendo las series (D.1) y (D.3) en la ecuación (5.12) tenemos

$$n_0 [3m(m-1)f_0 - 2f_1] = 0, \quad (D.8)$$

$$n_0 [(3m(m-1) - 2) f_1 - 8f_2] + n_1 [3m(m-1)f_0 - 4f_1] = 0, \quad (D.9)$$

$$\begin{aligned}
 &n_{i-1} [(3m(m-1) - 2) f_1 - 8f_2] + n_i [3m(m-1)f_0 - 2(1+i)f_1] \\
 &+ \sum_{k=0}^{i-2} \left\{ n_{i-k-2} \left[ (3m(m-1) - (k+2)(k+3)) f_{k+2} - 2(k+3)^2 f_{k+3} \right] \right. \\
 &\left. - (i-k-1) n_{i-k-1} [2(k+2) f_{k+2} + (k+1) f_{k+1}] \right\} = 0 \quad (i = 2, 3, 4, \dots). \quad (D.10)
 \end{aligned}$$

Supongamos, sin pérdida de generalidad, que  $p(1) = 1$ , es decir,  $p_0 = 1$ . Así, de la ecuación (D.4) encontramos que  $f_0 = \pm 1/m$  (donde estamos asumiendo que  $m \neq 0$ ). Por otra parte, considerando el caso tal que las partículas sean emitidas hacia el semieje positivo  $\theta = 0$  (el otro caso sería similar), debemos elegir el signo positivo, es decir,  $f_0 = 1/m$ . Ahora, de la ecuación (D.8) se encuentran dos posibilidades,  $n_0 = 0$  y  $3m(m-1)f_0 - 2f_1 = 0$ , las cuales se analizan con detalle a continuación.

Si  $n_0 = 0$ , entonces la ecuación (D.7) para  $i = 0$  lleva a  $p_1 = 1 - 3m + 2m^2$ , y de la ecuación (D.5) encontramos los dos posibles valores para el coeficiente  $f_1$

$$f_1 = \frac{1}{2} \left( m \pm \sqrt{-2 + 6m - 3m^2} \right). \quad (D.11)$$

Introduciendo el resultado anterior en la ecuación (D.9) encontramos que en ambos casos  $n_0 = 0$  lleva a  $n_1 = 0$ , e iterando el proceso obtenemos  $n_2 = n_3 = \dots = 0$ . Así, en este caso, sólo obtenemos la solución trivial para la función  $N(x)$ .

Si  $3m(m-1)f_0 - 2f_1 = 0$ , entonces hay un único valor para el coeficiente  $f_1$ , dado por

$$f_1 = \frac{3}{2}(m-1). \quad (D.12)$$

En este caso, la ecuación (D.5) lleva a  $p_1 = -(3/2)(3 - 4m + m^2)$  y de la ecuación (D.7) para  $i = 0$  obtenemos  $n_0 = 11 - 18m + 7m^2$ . En este punto, usando la ecuación (D.6) para  $i = 2$ ,

Orden 0	$p_0 = 1$ $f_0 = \frac{1}{m}$ $n_0 = 11 - 18m + 7m^2$
Orden 1	$p_1 = -\frac{3}{2}(3 - 4m + m^2)$ $f_1 = \frac{3}{2}(m - 1)$ $n_1 = 3 \cdot \frac{66 - 53m - 246m^2 + 436m^3 - 252m^4 + 49m^5}{-47 + 37m}$
Orden 2	$p_2 = -\frac{3}{8} \cdot \frac{66 + 370m - 1425m^2 + 1619m^3 - 753m^4 + 123m^5}{-47 + 37m}$ $f_2 = \frac{3}{16} \cdot \frac{-58 + 21m + 181m^2 - 213m^3 + 69m^4}{-47 + 37m}$ $n_2 = \frac{3}{16} \cdot \frac{(-1 + m)^2 h(m)}{(47 - 37m)^2 (-119 + 103m)}$

Tabla D.1: Valores de los primeros coeficientes de las series de Taylor en torno a  $x = 1$  para las funciones angulares (ver ecuaciones (D.1)-(D.3)) como función del exponente  $m$ . Aquí,  $h(m)$  es el polinomio definido por  $h(m) \equiv -2265780 - 268156m + 10287173m^2 - 7469577m^3 - 7351090m^4 + 11087186m^5 - 4729023m^6 + 678867m^7$ .

la ecuación (D.7) para  $i = 1$  y la ecuación (D.9), obtenemos los coeficientes  $p_2$ ,  $n_1$  y  $f_2$ . De una forma similar, la ecuación (D.6) para  $i = S$  junto con las ecuaciones (D.7) y (D.10) para  $i = S - 1$  (donde  $S = 3, 4, 5, \dots$ ) llevan a un sistema lineal que permite el cálculo de los coeficientes  $p_S$ ,  $n_{S-1}$  y  $f_S$  de una forma recursiva. En este sentido, puesto que la relación de recurrencia anterior es lineal, el cálculo recursivo de los coeficientes se puede llevar a cabo sin dificultad hasta un alto número de términos, en el caso que fuera necesario. Esto permite el cálculo preciso de las funciones angulares, incluso en casos de convergencia lenta. La tabla D.1 muestra los resultados para  $p_i$ ,  $f_i$ ,  $n_i$  con  $i = 0, 1, 2$ , como una función del exponente  $m$ , de acuerdo a la presente opción (ecuación (D.12)) para  $f_1$ .

En consecuencia, el valor del coeficiente  $f_1$  dado por la ecuación (D.12) es la única posibilidad que lleva a soluciones no triviales para  $N(x)$ . Notar que el comportamiento asintótico correspondiente a la Opción 1B en la tabla 5.2 proporciona los primeros términos en las series (D.1)-(D.3). Así, el conjunto de valores del exponente  $m$  que lleva a una solución analítica en  $x = 1$  no trivial y físicamente aceptable está dada por la ecuación (5.25).

## D.2. Soluciones autosemejantes exactas

El sistema angular (5.10)-(5.12) se debe resolver numéricamente en la mayor parte de los casos. No obstante, los casos para los que uno de los campos relevantes del SEM sea una función constante conducen a soluciones exactas, las cuales, además, son analíticas en uno o en los dos semiejes.

Las soluciones autosemejantes exactas del SEM se pueden obtener por observación directa de la tabla 5.1, calculando el valor de  $m$  necesario para el cual se obtiene la función constante correspondiente y resolviendo el sistema angular para dicho valor de  $m$ . Por ejemplo, consideremos la condición  $\psi = \text{constante}$ . Esto implica que  $m = 0$  y  $F(x) = \text{constante}$  (ver tabla 5.1). Por otra parte, si  $\psi = \text{constante}$ , entonces  $\mathbf{v} = \mathbf{0}$ . Además, por medio de la ecuación de conservación de la energía, obtenemos  $\phi = 0$ , y por tanto,  $p(x) = 0$ . Finalmente, usando la ecuación de Poisson, se llega a la solución trivial  $n = 0$ , es decir,  $N(x) = 0$ . Notemos que las respectivas funciones angulares para este caso ( $F = \text{constante}$ ,  $p = N = 0$ ) son funciones analíticas. Recordemos que este resultado ya se había obtenido al resolver directamente el sistema angular imponiendo la condiciones de regularidad en el eje  $x = 1$  (ver capítulo 5). De una forma análoga se deducen los demás casos. Todos los resultados se muestran en la tabla D.2. Observemos que tanto la condición  $\mathbf{J} = \text{constante}$ , como la condición  $n = \text{constante}$ , conducen a soluciones distintas de la trivial. Estos casos tienen más interés y se analizan a continuación.

Consideremos, primero, la condición  $\mathbf{J} = \text{constante}$ . Esta condición implica que el vector  $\mathbf{J}$  debe ser paralelo al eje  $z$  en cualquier punto del espacio (recordar la simetría azimutal) y que  $3m - 5 = 0$ , es decir,  $m = 5/3$  (ver tabla 5.1). Dado que  $\mathbf{J}$  tiene la dirección del eje  $z$ , es claro que las trayectorias de las partículas deben ser paralelas a dicho eje, es decir, cada trayectoria está definida por,

$$\tilde{r} \sin \theta = \text{constante} \quad \xleftrightarrow{x=\cos\theta} \quad \tilde{r} = \frac{\text{constante}}{(1-x^2)^{1/2}}. \quad (\text{D.13})$$

Introduciendo la condición (D.13) en la ecuación de las trayectorias (ecuación (5.44)), con  $m =$

Campo constante	Valor de $m$	Funciones angulares	Forma adimensional del campo
$\psi$	$m = 0$	$F(x) = 1$ $p(x) = 0$ $N(x) = 0$	$\tilde{\psi} = 2^{1/2}$
$\phi$	$m = 1$	$F(x) = 1$ $p(x) = 1$ $N(x) = 0$	$\tilde{\phi} = -1$
$\mathbf{v}$	$m = 1$	$F(x) = x$ $p(x) = 1$ $N(x) = 0$	$\tilde{\mathbf{v}} = 2^{1/2} \mathbf{u}_z$
$\mathbf{E}$	$m = \frac{3}{2}$	$F(x) = \frac{2}{3} x^{3/2}$ $p(x) = x$ $N(x) = 0$	$\tilde{\mathbf{E}} = \mathbf{u}_z$
$\mathbf{J}$	$m = \frac{5}{3}$	$F(x) = \frac{3}{5}  x ^{5/3} \text{sign } x$ $p(x) =  x ^{4/3}$ $N(x) = \frac{4}{9}  x ^{-2/3}$	$\tilde{\mathbf{J}} = 2^{5/2} \cdot 3^{-2} \mathbf{u}_z$
$n$	$m = 2$	$F(x) = \frac{3}{4} x^2 - \frac{1}{4}$ $p(x) = \frac{3}{4} x^2 + \frac{1}{4}$ $N(x) = 3$	$\tilde{n} = 3$

Tabla D.2: Soluciones exactas del SEM. Aquí  $\text{sign } x$  denota la *función signo* [40]. En el caso  $m = 0$ , las funciones angulares se han normalizado con la condición  $F(1) = 1$ , y en los demás, con la condición  $p(1) = 1$  y  $F(1) > 0$ . Los casos  $m = 5/3$  y  $m = 2$  conducen a soluciones no triviales para  $n$  ( $n \neq 0$ ).

Potencial de velocidad	$\tilde{\psi}(\tilde{z}) = \frac{3}{5} \cdot 2^{1/2}  \tilde{z} ^{5/3} \text{sign } \tilde{z}$
Potencial eléctrico	$\tilde{\phi}(\tilde{z}) = - \tilde{z} ^{4/3}$
Densidad numérica	$\tilde{n}(\tilde{z}) = \frac{4}{9}  \tilde{z} ^{-2/3}$
Campo de velocidades	$\tilde{\mathbf{v}}(\tilde{z}) = 2^{1/2}  \tilde{z} ^{2/3} \mathbf{u}_z$
Campo eléctrico	$\tilde{\mathbf{E}}(\tilde{z}) = \frac{4}{3}  \tilde{z} ^{1/3} \text{sign } \tilde{z} \mathbf{u}_z$
Densidad de corriente	$\tilde{\mathbf{J}}(\tilde{z}) = 2^{5/2} \cdot 3^{-2} \mathbf{u}_z$

Tabla D.3: Solución correspondiente a  $m = 5/3$ .

Potencial de velocidad	$\tilde{\psi}(\tilde{\rho}, \tilde{z}) = 2^{-3/2} (2\tilde{z}^2 - \tilde{\rho}^2)$
Potencial eléctrico	$\tilde{\phi}(\tilde{\rho}, \tilde{z}) = -\frac{1}{4} (4\tilde{z}^2 + \tilde{\rho}^2)$
Densidad numérica	$\tilde{n}(\tilde{\rho}, \tilde{z}) = 3$
Campo de velocidades	$\tilde{\mathbf{v}}(\tilde{\rho}, \tilde{z}) = 2^{-1/2} (2\tilde{z} \mathbf{u}_z - \tilde{\rho} \mathbf{u}_\rho)$
Campo eléctrico	$\tilde{\mathbf{E}}(\tilde{\rho}, \tilde{z}) = \frac{1}{2} (4\tilde{z} \mathbf{u}_z + \tilde{\rho} \mathbf{u}_\rho)$
Densidad de corriente	$\tilde{\mathbf{J}}(\tilde{\rho}, \tilde{z}) = 3 \cdot 2^{-1/2} (2\tilde{z} \mathbf{u}_z - \tilde{\rho} \mathbf{u}_\rho)$

Tabla D.4: Solución correspondiente a  $m = 2$ .

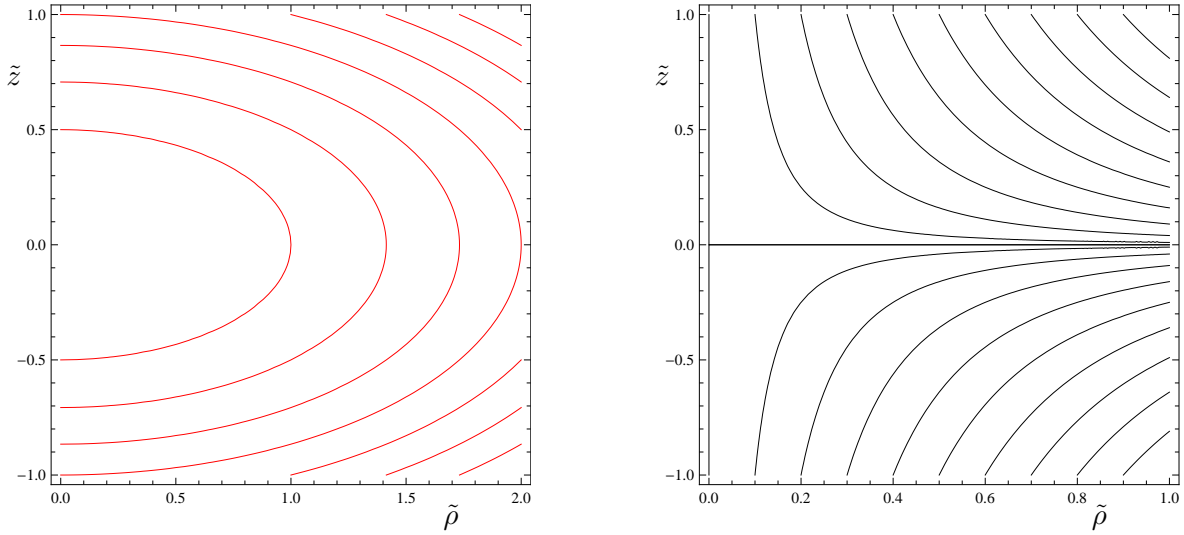


Figura D.1: Superficies equipotenciales del potencial eléctrico (izquierda) y trayectorias (derecha) correspondientes a  $m = 2$ . El sentido de movimiento es el correspondiente desde  $\rho = \infty$  hasta  $z = \pm\infty$ .

5/3), se obtiene la EDO que debe satisfacer la función  $F(x)$ :

$$\frac{F'(x)}{F(x)} = \frac{5}{3} \cdot \frac{1}{x}. \quad (D.14)$$

Al integrar la ecuación (D.14), encontramos que la función  $F(x)$  está dada por  $F(x) = (3/5)|x|^{5/3}$  si  $0 \leq x \leq 1$  y  $F(x) = -(3/5)|x|^{5/3}$  si  $-1 \leq x < 0$ , donde estamos asumiendo que el movimiento ocurre hacia la dirección positiva del eje  $z$  y que  $F(1) = 1/(5/3) = 3/5$ . Por último, las funciones angulares  $p$  y  $N$  se obtienen inmediatamente por medio del sistema angular (con  $m = 5/3$ ). El resultado es el mostrado en la tabla D.2. Debemos notar que el punto  $x = 0$  es un punto singular del sistema con un comportamiento asintótico dado por la Opción  $\beta A$  (ver tabla 5.3). Así, la función  $N(x)$  tiene a infinito en el punto  $x = 0$  y, por esta razón, la solución encontrada debe entenderse como una solución del sistema angular (5.10)-(5.12) en sentido de distribuciones. Observemos, también, que las tres funciones angulares son analíticas en ambos semiejes ( $x = \pm 1$ ). En particular, las tres funciones representan la suma de las series de Taylor en torno a  $x = 1$  construidas antes (y cuyos primeros coeficientes son los dados en la tabla D.1) en el intervalo  $x \in (0, 1]$ . Esto se esperaba teniendo en cuenta que el valor  $m = 5/3$  se encuentra en el rango físicamente aceptable para la Opción 1B (ecuación (5.25)).

Finalmente, veamos la condición  $n = \text{constante}$ . Esta condición implica necesariamente que  $m = 2$  y  $N(x) = \text{constante}$ . Ahora, sólo hay que considerar el sistema angular (5.10)-(5.12) con  $m = 2$  y  $N = \text{constante}$ . Observamos que la ecuación de continuidad (5.12) es una ecuación de Legendre de orden dos para la función  $F$ . Así, teniendo en cuenta la regularidad de  $F$  en  $x = 1$ , deducimos que  $F(x) = A P_2(x)$ , donde  $P_2(x) = (1/2)(3x^2 - 1)$  es la función de Legendre de primera especie de orden 2 [40] y  $A \neq 0$  es una constante. De la ecuación angular de la energía (5.10), obtenemos  $p(x)$  y, finalmente, por medio de la ecuación de Poisson (5.11), encontramos que la función  $N(x)$  es una constante no nula. Normalizando con la condición  $p(1) = 1$  y  $F(1) > 0$  se obtiene la solución mostrada en la tabla D.2. Podemos observar que



las tres funciones angulares son analíticas en todo el intervalo angular,  $-1 \leq x \leq 1$ . Esto era de esperar, pues  $m = 2$  está en el rango físicamente aceptable para la Opción 1B (ecuación (5.25)).

En ambos casos ( $m = 5/3$  y  $m = 2$ ), la forma de los campos es particularmente sencilla en coordenadas cilíndricas  $(\rho, z)$ , la cual se muestra en las tablas D.3 y D.4. En el caso  $m = 5/3$  (ver tabla D.3), todos los campos son unidimensionales en la coordenada  $z$  (solución 1D), como era de esperar. En dicho caso, la solución obtenida representa físicamente un movimiento de carga en la dirección del eje  $z$ , desde  $z = -\infty$  hasta  $z = +\infty$ , cumpliendo la condición  $\tilde{\mathbf{J}} = \text{constante}$ . Debemos notar que la forma matemática de los campos es la misma que la que encontramos para el caso de emisión limitada por carga espacial en el diodo plano (ver capítulo 3). Por su parte, el caso  $m = 2$  lleva a una solución en dos dimensiones (solución 2D) (ver tabla D.4). En este caso, las superficies equipotenciales del potencial eléctrico son los elipsoides  $4\tilde{z}^2 + \tilde{\rho}^2 = \text{constante}$  y las trayectorias de las partículas son las curvas  $\tilde{\rho}|\tilde{z}|^{1/2} = \text{constante}$ . Ambas se muestran en la figura D.1. Observando la figura D.1, es claro que la solución encontrada para  $m = 2$  representa físicamente una redistribución de carga espacial por todo el espacio físico, de forma que en todo punto se cumple la condición  $\tilde{n} = \text{constante}$ . Notar que el campo de velocidades es nulo en el origen de coordenadas ( $\mathbf{r} = \mathbf{0}$ ), lo que físicamente significa que dicho punto es un *punto de estancamiento* o *remanso*.

# Apéndice E

## Problema angular para el potencial eléctrico

### E.1. Ecuación de Legendre no homogénea

En el capítulo 5 hemos deducido que el semiángulo vertical  $\alpha$  de la interfase líquida desde la cual se emite la carga debe ser encontrarse en el rango  $\alpha_M \simeq 21,89^\circ < \alpha < \alpha_T \simeq 49,29^\circ$ . El resultado  $\alpha < \alpha_T$  también fue obtenido en el modelo cónico de J. Fernández de la Mora para electrosprays atmosféricos [12]. Vamos a demostrar que, en realidad, el resultado  $\alpha < \alpha_T$  es completamente general y se puede obtener matemáticamente de una forma muy sencilla. Para ello, basta considerar la ecuación angular de Poisson (ecuación (5.11)), con  $m = 5/4$ , y obtener la fórmula que permita calcular explícitamente la función  $p(x)$  a partir de la función  $N(x)$ , exigiendo sólo que  $N(x)$  sea una función integrable, y que  $p(x)$  sea finita en el semieje  $x = 1$  y cumpla las condiciones de equipotencialidad y de equilibrio mecánico en la interfase líquida  $x = x_\alpha$  (con  $x_\alpha = -\cos \alpha$ ). Esto motiva el problema general que vamos a estudiar a continuación.

Consideremos el problema de valores de contorno consistente en resolver la ecuación diferencial

$$\nu(\nu + 1)u + \frac{d}{dx} \left[ (1 - x^2) \frac{du}{dx} \right] = f, \quad (x_0 < x < 1) \quad (\text{E.1})$$

donde  $\nu$  es un número real arbitrario y  $-1 < x_0 < 1$ , junto con las condiciones de contorno en  $x = x_0$  y en  $x = 1$  dadas por

$$u(x_0) = 0, \quad (\text{E.2})$$

$$-\infty < u(1_-) < \infty. \quad (\text{E.3})$$

En el problema anterior, asumiremos también que la función  $f(x)$  es distinta de la trivial (es decir,  $f(x) \neq 0$ ).

La ecuación (E.1) es la ecuación de Legendre (no homogénea) de orden  $\nu$  y debemos requerir que la función incógnita  $u(x)$  sea una función dos veces diferenciable en el intervalo  $(x_0, 1)$  y que la función  $f(x)$  sea una función integrable en dicho intervalo. Por otra parte, el punto  $x = 1$  es un punto singular de la ecuación (E.1) y se puede demostrar [33] que la condición de finitud

prescrita en dicho punto (E.3) es matemáticamente equivalente a la condición

$$\lim_{x \rightarrow 1^-} [(1 - x^2) u'] = 0. \quad (\text{E.4})$$

El problema definido por (E.1)-(E.3) es un *problema Sturm-Liouville de tercera clase* para la ecuación de Legendre y su resolución se lleva a cabo por medio del *Método de las funciones de Green* [10]. Este método constituye una potente herramienta para resolver problemas de valores de contorno en ecuaciones diferenciales lineales de segundo orden no homogéneas, en particular, el problema que hemos propuesto.

### Solución del problema

Consideremos primero el caso trivial en el que  $\nu = 0$  o  $\nu = -1$ . En este caso, la EDO (E.1) adopta una forma muy sencilla y se puede integrar sin dificultad. Integrando dos veces y aplicando sucesivamente las condiciones (E.4) y (E.2) se obtiene que la solución del problema está dada por

$$u(x) = \int_{x_0}^x \frac{1}{1 - \tau^2} \int_1^\tau f(\xi) d\xi d\tau \quad (x_0 \leq x \leq 1). \quad (\text{E.5})$$

En lo que sigue, consideraremos entonces que  $\nu$  es un número real tal que  $\nu \neq 0$  y  $\nu \neq -1$ . En este caso, el problema se resolverá usando el Método de las funciones de Green. En esencia, el método [10] consiste en obtener la solución del problema a partir de una cierta función de dos variables  $g(x, \xi)$  (llamada *función de Green* del problema), la cual satisface el problema consistente en resolver la misma EDO del problema original pero sustituyendo la parte no homogénea  $f(x)$  por una función delta y junto con unas ciertas condiciones de contorno que deben fijarse convenientemente a partir de las condiciones de contorno prescritas para  $u(x)$ .

En el caso que nos ocupa hemos prescrito condiciones de contorno en  $x = x_0$  y en  $x = 1$ , y son independientes (es decir, están desacopladas). Esto implica que el correspondiente problema para la función de Green es autoadjunto y la función de Green es simétrica, es decir,

$$g(x, \xi) = g(\xi, x). \quad (\text{E.6})$$

En tal caso, la solución del problema se escribe en la forma

$$u(\xi) = - \int_{x_0}^1 f(x) g(x, \xi) dx + \left\{ (1 - x^2) \left[ \frac{dp}{dx} g(x, \xi) - p(x) \frac{dg}{dx} \right] \right\}_{x=x_0}^{x=1}. \quad (\text{E.7})$$

Debemos notar que, de momento y por conveniencia, la solución dada en (E.7) está escrita en términos de la variable  $\xi \in (x_0, 1)$  y usando  $x$  como variable de integración. Fijado  $\xi$ , el correspondiente problema para la función de Green  $g(x, \xi)$  asociada es el dado por

$$\nu(\nu + 1)g + \frac{d}{dx} \left[ (1 - x^2) \frac{dg}{dx} \right] = -\delta(x - \xi) \quad (x_0 < x < 1), \quad (\text{E.8})$$

donde  $\delta(x)$  es la función delta de Dirac [40], junto con las condiciones de contorno dadas por

$$g(x_0, \xi) = 0, \quad (\text{E.9})$$

$$\lim_{x \rightarrow 1^-} \left[ (1-x^2) \frac{dg}{dx} \right] = 0. \quad (\text{E.10})$$

Es importante indicar que, en el método general [10], las condiciones de contorno para la función de Green  $g(x, \xi)$  son las correspondientes condiciones de contorno homogéneas que se prescriben para la función incógnita  $u(x)$ . En nuestro caso particular, las condiciones de contorno para la función  $u(x)$  (ver ecuaciones (E.2) y (E.4)) son ya homogéneas y, entonces, las condiciones de contorno para la función  $g(x, \xi)$  son las mismas que las fijadas para la función  $u(x)$ .

Resolvamos a continuación el problema de Green (E.8)-(E.10). Debemos considerar los dos casos posibles:  $x \neq \xi$  y  $x = \xi$ .

- Para  $x \neq \xi$ , el problema equivale a resolver la EDO

$$\nu(\nu+1)g + \frac{d}{dx} \left[ (1-x^2) \frac{dg}{dx} \right] = 0 \quad (x_0 < x < 1), \quad (\text{E.11})$$

junto con las condiciones de contorno (E.9) y (E.10). Así, si  $x < \xi$ , se obtiene

$$g(x, \xi) = A P_\nu(x) + B Q_\nu(x), \quad (\text{E.12})$$

y si  $x > \xi$ ,

$$g(x, \xi) = C P_\nu(x) + D Q_\nu(x), \quad (\text{E.13})$$

donde  $P_\nu(x)$  y  $Q_\nu(x)$  son las funciones de Legendre de primera y segunda especie de orden  $\nu$  y  $A, B, C$  y  $D$  son constantes a determinar.

- Para  $x = \xi$ , debemos imponer la continuidad de la función de la función  $g(x, \xi)$  y la condición de discontinuidad para la derivada (respecto de  $x$ ) de  $g(x, \xi)$ , que está dada por

$$(1-x^2) \frac{dg}{dx}(x, \xi) \Big|_{x=\xi^-}^{x=\xi^+} = -1. \quad (\text{E.14})$$

La condición (E.14) se obtiene integrando la ecuación (E.8) entre  $x = \xi - \varepsilon$  y  $x = \xi + \varepsilon$ , tomando el límite  $\varepsilon \rightarrow 0$  y teniendo en cuenta la continuidad de la función  $g(x, \xi)$  en  $x = \xi$  y la definición de la función  $\delta(x)$ .

Los coeficientes  $A, B, C$  y  $D$  se calculan a partir de las cuatro condiciones anteriores. La condición de finitud en  $x = 1$  (E.10) implica directamente que  $D = 0$ . La condición en  $x = x_0$  (E.9), la condición de continuidad de  $g(x, \xi)$  en  $x = \xi$  y la condición (E.14) implican respectivamente

$$\begin{aligned} A P_\nu(x_0) + B Q_\nu(x_0) &= 0, & A P_\nu(\xi) + B Q_\nu(\xi) - C P_\nu(\xi) &= 0, \\ C P'_\nu(\xi) - A P'_\nu(\xi) - B Q'_\nu(\xi) &= -\frac{1}{1-\xi^2}, \end{aligned} \quad (\text{E.15})$$

donde hemos puesto ya que  $D = 0$ . Resolviendo el sistema (E.15), obtenemos

$$A = -\frac{Q_\nu(x_0)}{P_\nu(x_0)} P_\nu(\xi), \quad B = P_\nu(\xi), \quad C = \frac{Q_\nu(\xi) P_\nu(x_0) - Q_\nu(x_0) P_\nu(\xi)}{P_\nu(x_0)} \quad (\text{E.16})$$

En total, la función de Green  $g(x, \xi)$  está dada por

$$g(x, \xi) = \frac{1}{P_\nu(x_0)} \begin{cases} P_\nu(\xi) [P_\nu(x_0) Q_\nu(x) - Q_\nu(x_0) P_\nu(x)] & \text{si } x_0 < x < \xi < 1, \\ P_\nu(x) [Q_\nu(\xi) P_\nu(x_0) - Q_\nu(x_0) P_\nu(\xi)] & \text{si } x_0 < \xi < x < 1, \end{cases} \quad (\text{E.17})$$

la cual, como se había anunciado, es simétrica (ver ecuación (E.6)).

Una vez resuelto el problema de Green asociado, ya sólo falta escribir la solución usando la fórmula (E.7). Sustituyendo las condiciones (E.9) y (E.10) en la fórmula (E.7), teniendo en cuenta la simetría de la función de Green  $g(x, \xi)$  e intercambiando las variables  $\xi$  y  $x$  se obtiene que, en el caso tal que  $\nu \neq 0$  y  $\nu \neq -1$ , la solución del problema (E.1)-(E.3) está dada formalmente por

$$u(x) = - \int_{x_0}^1 f(\xi) g(x, \xi) d\xi \quad (x_0 \leq x \leq 1), \quad (\text{E.18})$$

donde la función de Green  $g(x, \xi)$  está dada por (E.17). La solución puede escribirse de forma compacta. En efecto, definamos las funciones

$$a_\nu(x) \equiv \int_{x_0}^x f(\xi) [Q_\nu(\xi) P_\nu(x_0) - Q_\nu(x_0) P_\nu(\xi)] d\xi - Q_\nu(x_0) \int_x^1 f(\xi) P_\nu(\xi) d\xi \quad (x_0 \leq x \leq 1), \quad (\text{E.19})$$

$$b_\nu(x) \equiv P_\nu(x_0) \int_x^1 f(\xi) P_\nu(\xi) d\xi \quad (x_0 \leq x \leq 1). \quad (\text{E.20})$$

Introduciendo (E.17) en (E.18) se obtiene

$$u(x) = - \frac{1}{P_\nu(x_0)} [a_\nu(x) P_\nu(x) + b_\nu(x) Q_\nu(x)] \quad (x_0 \leq x \leq 1). \quad (\text{E.21})$$

Se puede comprobar que si  $\nu \notin \{0, 1\}$ , la función (E.21) (donde las funciones  $a_\nu(x)$  y  $b_\nu(x)$  están definidas en (E.19) y (E.20)) satisface la EDO (E.1) y las condiciones de contorno (E.2) y (E.3).

Debe notarse que la solución obtenida es válida siempre que el punto  $x_0$  no sea un cero de la función  $P_\nu(x)$ . En el caso de que  $x_0$  fuera un cero de  $P_\nu(x)$ , la solución del problema (E.1)-(E.3) implicaría necesariamente  $f(x) = 0$ , pero esta posibilidad ha sido descartada, por hipótesis.

## E.2. Aplicación al caso de un menisco cónico

En el caso de un cono líquido conductor de semiángulo  $\alpha$ , tenemos  $m = 5/4$  y la función  $p(x)$  debe satisfacer un problema como el dado por las ecuaciones (E.1)-(E.3) con  $\nu = 1/2$ . Aplicando las ecuaciones (E.19)-(E.21), con  $\nu = 1/2$  y  $x_0 = x_\alpha$ , obtenemos la fórmula siguiente:

$$p(x) = - \frac{1}{P_{1/2}(x_\alpha)} [a_{1/2}(x) P_{1/2}(x) + b_{1/2}(x) Q_{1/2}(x)] \quad (x_\alpha \leq x \leq 1), \quad (\text{E.22})$$

donde las funciones  $a_{1/2}(x)$  y  $b_{1/2}(x)$  están dadas por

$$a_{1/2}(x) = \int_{x_\alpha}^x N(\xi) [Q_{1/2}(\xi) P_{1/2}(x_\alpha) - Q_{1/2}(x_\alpha) P_{1/2}(\xi)] d\xi - \\ Q_{1/2}(x_\alpha) \int_x^1 N(\xi) P_{1/2}(\xi) d\xi \quad (x_\alpha \leq x \leq 1), \quad (\text{E.23})$$

$$b_{1/2}(x) = P_{1/2}(x_\alpha) \int_x^1 N(\xi) P_{1/2}(\xi) d\xi \quad (x_\alpha \leq x \leq 1). \quad (\text{E.24})$$

Debemos notar que, en principio, la fórmula anterior es obtenida asumiendo la condición de finitud de la función  $p(x)$  en el semieje  $x = 1$  y la condición de equipotencialidad en la superficie del cono  $x = x_\alpha$ . Debemos imponer ahora que se cumpla la condición de equilibrio mecánico en  $x = x_\alpha$ , la cual implica

$$p'(x_\alpha) = + \left( \frac{2 \cot \alpha}{1 - x_\alpha^2} \right)^{1/2}. \quad (\text{E.25})$$

de donde se obtendrá necesariamente la condición  $\alpha < \alpha_T$  (ver debajo).

En efecto, derivando en (E.22) para obtener la función  $p'(x)$  y evaluando en el punto  $x = x_\alpha$ , se obtiene

$$p'(x_\alpha) = \frac{- \int_{x_\alpha}^1 N(\xi) P_{1/2}(\xi) d\xi}{\sin^2 \alpha P_{1/2}(x_\alpha)}. \quad (\text{E.26})$$

Vamos a razonar, por reducción al absurdo, que  $x_\alpha < x_T$ , donde  $x_T \equiv \cos(\pi - \alpha_T) = -\cos \alpha_T$  es el valor del ángulo de Taylor en la variable  $x$  (ver ecuación (2.9)), lo cual es completamente equivalente a demostrar la condición  $\alpha < \alpha_T$ . Es claro que  $x_\alpha = x_T$  llevaría a la solución trivial,  $N(x) = 0$ . Supongamos, entonces, que  $x_\alpha > x_T$ . Recordando que  $x_T$  es el único cero de la función  $P_{1/2}(x)$  y que  $P_{1/2}(x)$  es una función estrictamente creciente, se tendría que  $P_{1/2}(x) > 0$  en el intervalo  $x_\alpha \leq x \leq 1$ . Además,  $N(x)$  es una función positiva. Entonces, por medio de la ecuación (E.26) se llegaría a que  $p'(x_\alpha) < 0$ , lo cual es absurdo (ver ecuación (E.25)).

En resumen, hemos demostrado matemáticamente que en el caso no trivial ( $n \neq 0$ ), se deben tener siempre meniscos cónicos con semiángulos menores que el ángulo de Taylor  $\alpha_T$ . El resultado ha sido deducido en condiciones muy generales, requiriendo sólo la continuidad de  $\phi$  en el semieje  $\theta = 0$  (además, por supuesto, de las condiciones de equipotencialidad y de equilibrio mecánico en la interfase líquida) y que la función  $N(x)$  sea integrable (pero, por lo demás, arbitraria).



# Bibliografía

- [1] A. Barredo and I.G. Loscertales. Micro- and nanoparticles via capillary flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 39(1):89–106, 2007.
- [2] J. Van Bladel. *Singular Electromagnetic Fields and Sources*. IEEE Press series on electromagnetic wave theory, New York NY, 1991.
- [3] G.Sh Boltachev and N.M. Zubarev. Singularity in the current density distribution at the boundary of emitting region on a flat cathode surface. *Technical Physics Letters*, 34(12):1041–1043, 2008.
- [4] C. D. Child. Discharge from hot cao. *Physical Review*, 32(492), 1911.
- [5] M. Cloupeau and B. Prunet-Foch. Electrohydrodynamic spraying functioning modes: a critical review. *Journal of Aerosol Science*, 25(6):1021–1036, 1994.
- [6] W. Deng, J.F. Klemic, X. Li, M.S. Reed, and A. Gomez. Liquid fuel microcombustor using microfabricated multiplexed electrospray sources. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31(2):2239–2246, 2007.
- [7] J. Douglas and R. Burden. *Métodos Numéricos*. Thomson, Madrid, tercera edición, 2004.
- [8] W. Driesel, Ch. Dietzsch, E. Hesse, L. Bischoff, and J. Teichert. In situ observation of the tip shape of co-ge liquid alloy ion sources in a highvoltage transmission electron microscope. *Journal of Vacuum Science and Technology B*, 14:1621–1629, 1996.
- [9] W. Driesel, Ch. Dietzsch, and R. Mühle. In situ observation of the tip shape of auge liquid alloy ion sources using a high voltage transmission electron microscope. *Journal of Vacuum Science and Technology B*, 14:3367–3380, 1996.
- [10] D. G. Dudley. *Mathematical Foundations for Electromagnetic Theory*. Wiley-IEEE Press, New York NY, 1994.
- [11] J. Fenn, M. Mann, C. Meng, S. Wong, and C. Whitehouse. Electrospray ionization for mass spectrometry of large biomolecules. *Science*, 246(4926):64–71, 1989.
- [12] J. Fernández de la Mora. The effect of charge emission from electrified liquid cones. *Journal of Fluid Mechanics*, 243:561–574, 1992.
- [13] J. Fernández de la Mora. The fluid dynamics of taylor cones. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 39:217–243, 2007.



- [14] J. Fernández de la Mora. Accelerating electrode design to control space charge limits to power density. *private Communications*, 2011.
- [15] J. Fernández de la Mora. Design and testing of accelerating electrodes in colloidal thruster arrays: Controlling space charge limits to power density. *private Communications*, 2012.
- [16] J. Fernández de la Mora and I. G. Loscertales. The current emitted by highly conducting taylor cones. *Journal of Fluid Mechanics*, 260:155–184, 1994.
- [17] J. A. Fernández Viña. *Análisis Matemático I*. Tecnos, Madrid, cuarta edition, 1991.
- [18] J. A. Fernández Viña. *Análisis Matemático II*. Tecnos, Madrid, segunda edition, 1992.
- [19] J. M. Finn, T. M. Antonsen, and W. M. Manheimer. Space-charge-limited and temperature-limited electron flow in the vicinity of edges and conical points. *IEEE Transactions on Plasma Science*, 16(2):281–289, 1988.
- [20] B. Fornberg. Generation of finite difference formulas on arbitrarily spaced grids. *Mathematics of Computation*, 51(184):699–706, 1988.
- [21] J. Fuller, R.T. Carlin, and R.A. Osteryoung. The room temperature ionic liquid 1-ethyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate: electrochemical couples and physical properties. *Journal of the Electrochemical Society*, 144(11):3881–3886, 1997.
- [22] A. M. Gañán-Calvo, J. C. Lasheras, J. Dávila, and A. Barrero. The electrostatic spray emitted from an electrified conical meniscus. *Journal of Aerosol Science*, 25(6):1121–1142, 1994.
- [23] M. Gamero-Castaño. The structure of electrospray beams in vacuum. *Journal of Fluid Mechanics*, 604:339–368, 2008.
- [24] M. Gamero-Castaño and J. Fernandez de la Mora. Mechanisms of electrospray ionization of singly and multiply charged salt clusters. *Analytica Chimica Acta*, 406:67–91, 1999.
- [25] M. Gamero-Castaño and J. Fernandez de la Mora. Direct measurement of ion evaporation kinetics from electrified liquid surfaces. *Journal of Chemical Physics*, 113(2):815–832, 2000.
- [26] M. Gamero-Castaño and V. Hruby. Electric measurements of charged sprays emitted by cone-jets. *Journal of Fluid Mechanics*, 459:245–276, 2002.
- [27] I. Guerrero, R. Bocanegra, F. J. Higuera, and J. Fernández de la Mora. Ion evaporation from taylor cones of propylene carbonate mixed with ionic liquids. *Journal of Fluid Mechanics*, 591:437–459, 2007.
- [28] F. J. Higuera. Eulerian model of a dilute spray of charged droplets. *Journal of Aerosol Science*, 48:34–45, 2012.
- [29] F. J. Higuera, S.E. Ibáñez, A.J. Hijano, and I.G. Loscertales. Pulsating emission of droplets from an electrified meniscus. *Journal of Aerosol Science*, 66:193–208, 2013.
- [30] J. V. Iribarne and B. A. Thomson. On the evaporation of small ions from charged droplets. *Journal of Chemical Physics*, 64:2287–2294, 1976.

- [31] J. D. Jackson. *Electrodinámica Clásica*. Editorial Alhambra, Madrid, segunda edition, 1980.
- [32] C.H.-S. José and M. Arias-Zugasti. Analysis of the space charge singularity near the taylor cone apex via simplified eulerian model for electrospray beams in vacuum. *Journal of Aerosol Science*, 118:82–99, 2018.
- [33] H.G. Kaper, M.K. Kwong, and A. Zettl. Characterizations of the friedrichs extensions of singular sturm-liouville expressions. *SIAM Journal on mathematical analysis*, 17(4):772–777, 1986.
- [34] I. Langmuir. The effect of space charge and residual gases on thermionic currents in high vacuum. *Physical Review*, 2(450), 1913.
- [35] I. Langmuir and K.B. Blodgett. Currents limited by space charge between coaxial cylinders. *Physical Review*, 22(347), 1923.
- [36] I. Langmuir and K.B. Blodgett. Currents limited by space charge between concentric spheres. *Physical Review*, 24(49), 1924.
- [37] I. G. Loscertales and J. Fernández de la Mora. Experiments on the kinetics of field evaporation of small ions from droplets. *Journal of Chemical Physics*, 103(12):5041–5060, 1995.
- [38] P. Lozano and M. Martínez-Sánchez. Ionic liquid ion sources: characterization of externally wetted emitters. *Journal of Colloid and Interface Science*, 282(2):415–421, 2005.
- [39] P. L. Meyer. *Probabilidad y aplicaciones estadísticas*. Fondo Educativo Interamericano, Mexico, revisada edition, 1992.
- [40] F. W. J. Olver, D. W. Lozier, R. F. Boisvert, and C. W. Clark. *NIST Handbook of Mathematical Functions*. Cambridge, New York NY, 2010.
- [41] C. Pantano, A. M. Gañán-Calvo, and A. Barrero. Zeroth-order, electrohydrostatic solution for electrospraying in cone-jet mode. *Journal of Aerosol Science*, 25(6):1065–1077, 1994.
- [42] C. Perez-Martinez, S. Guilet, J. Gierak, and P. Lozano. Ionic liquid ion sources as a unique and versatile option in fbi applications. *Microelectronic Engineering*, 88:2088–2091, 2011.
- [43] C. Perez-Martinez and P. Lozano. Visualization of beams from ionic liquid ion sources for focused ion beam applications. *Journal of Vacuum Science and Technology B*, 30(6), 2012.
- [44] I. Romero-Sanz and J. Fernández de la Mora. Energy distribution and spatial structure of electrosprays of ionic liquids *in vacuo*. *Journal of Applied Physics*, 95(4):2123–2129, 2004.
- [45] G. D. Smith. *Numerical Solution of Partial Differential Equations*. Oxford Applied Mathematics and Computing Science Series, New York NY, third edition, 1985.
- [46] J. A. Stratton. *Electromagnetic Theory*. McGraw-Hill, New York NY, 1941.
- [47] R.G. Sweet. High frequency recording with electrostatically deflected ink jets. *Review of Scientific Instruments*, 36(2), 1965.

- [48] K. Tang and A. Gomez. On the structure of an electrostatic spray of monodisperse droplets. *Physics of Fluids*, 6:2317–2332, 1994.
- [49] G. Taylor. Disintegration of water drops in an electric field. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 280(1382):383–397, 1964.
- [50] M. Ue, M. Takeda, A. Toriumi, A. Kominato, R. Hagiwara, and Y. Ito. Application of low-viscosity ionic liquid to the electrolyte of double-layer capacitors. *Journal of the Electrochemical Society*, 150(4):A499–A502, 2003.
- [51] J. Zeleny. The electrical discharge from liquid points and a hydrostatic method of measuring the electric intensity at their surface. *Physical Review*, 3(69-91), 1914.
- [52] J. Zeleny. On the conditions of instability of liquid drops, with applications to the electrical discharge from liquid points. *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 18:71–93, 1915.
- [53] J. Zeleny. Instability of electrified liquid surfaces. *Physical Review*, 10(1):1–6, 1917.
- [54] J.P. Zheng. The limitations of energy density of battery/double-layer capacitor asymmetric cells. *Journal of the Electrochemical Society*, 150(4):A484–A492, 2003.
- [55] Y.B. Zhu, P. Zhang, A. Valfells, L.K. Ang, and Y. Y. Lau. Novel scaling laws for the langmuir-blodgett solutions in cylindrical and spherical diodes. *Physical Review Letters*, 110(26):265007(5), 2013.