

INSTITUTO DE INVESTIGACIONES  
EN MATERIALES



© 2014 Foto Sonia Esperanza Reyes Gómez

INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN MATERIALES, UNAM



MEMORIAS  
SIMPOSIO DE  
ESTUDIANTES

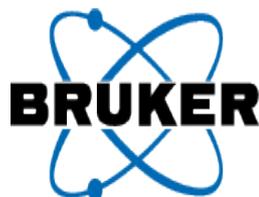
I I M

JULIO 30 A AGOSTO 1 DE 2014



© 2014 Foto Alida Ospina Orejarena

 **SIMPOSIO**  
DE **IIM**  
**ESTUDIANTES**





Universidad Nacional Autónoma de México. ISSN en trámite.



## Memorias 2do. Simposio de Estudiantes Asociados al IIM

El primer simposio de estudiantes asociados al Instituto de Investigaciones en Materiales se llevó a cabo en agosto de 2013. En esa ocasión, las y los organizadores se dieron a la tarea de organizar todas las presentaciones y de moderarlas para que terminaran en tiempo y forma. Así los asistentes pudimos disfrutarlas y aprender. La participación de todas y todos fue notoria y el intercambio de ideas intenso. Además nos divertimos con los eventos culturales que nos organizaron. En esta segunda ocasión también esperamos una amplia participación de muchos de los colegas estudiantes e investigadores.

Lo más importante de este simposio es que es un evento organizado por estudiantes para los propios estudiantes. Se trata de aprender y de convivir. Se aprende la forma en que se organiza un congreso y se aprenden los temas más detallados que nos presentan nuestros colegas. La parte de la convivencia no es menos importante porque la suma de esfuerzos es lo que nos ayudará siempre a ser mejores. Los que hoy son nuestras compañeras y nuestros compañeros de estudios, mañana pueden ser los que nos ofrezcan un trabajo o los colegas con quienes hagamos importantes colaboraciones. En el futuro todas y todos compartirán el hecho de haber sido estudiantes asociados a este instituto, y eso sin duda les podrá ayudar a abrirse camino juntos.

Ser estudiantes asociados al Instituto de Investigaciones en Materiales debe llenarlos de orgullo y alegría. Durante el simposio de estudiantes asociados esto es lo que se siente, alegría por pertenecer al instituto y entusiasmo por aprender. No queda más que agradecer a todas y todos los organizadores su esfuerzo por hacer estos eventos, que empiezan a ser una tradición en este NUESTRO INSTITUTO. Muchas muchas gracias.

*Ana Martínez  
Directora Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM.*



## Memorias 2do. Simposio de Estudiantes Asociados al IIM

Estimado Estudiante,

¡Bienvenido a tu evento! El Segundo Simposio de Estudiantes IIM. Sí, por segunda vez has hecho de este evento una realidad, un evento tuyo y para ti. Y es que, aunque sabemos que hay más activos en esta fórmula, sin duda, lo que viviremos en los siguientes días tiene como objetivo solo uno: 'Ser un evento realizado de estudiantes para estudiantes'.

Hace un año presenciamos la primera edición de este simposio y el evento se consolidó como un foro para dar a conocer el trabajo de los estudiantes de forma por demás exitosa. Al concluir el Primer Simposio, no quedó más que un buen sabor de boca y una meta muy clara: Darle continuidad al proyecto. La estafeta del comité organizador pasó a mano de uno nuevo, el cual, ha procurado siempre mantener los estándares de calidad que nos preceden para con eso poder brindar una nueva edición que esperamos mantenga y, mejor aún, supere las expectativas.

Sin duda, todo nuevo proyecto es retador y este Simposio de Estudiantes IIM no fue la excepción. Como en todo reto, hubo cuestionamientos, estrés, incertidumbre, pero por sobre todo, crecimiento en todos los sentidos, personal y profesional. Es con este crecimiento que el Comité Organizador ha dejado a un lado las excusas, para dar lugar a la organización de un evento de intercambio académico entre todos los integrantes del Instituto, en un ambiente cordial y familiar. Porque, sin duda, somos una familia, que incluye a los que inician su camino, los estudiantes, y a los que ya tienen un gran camino recorrido, éstos que nos guiarán con sus experiencias profesionales y con sus fracasos que los han llevado a tener una vida llena de triunfos.

Estos últimos meses han sido muy importantes para el Comité Organizador porque hemos tenido la posibilidad de estar en un amplio contacto con estudiantes e investigadores en igual medida, lo cual nos ha permitido analizar a fondo lo que involucra una vida académica y de investigación vista desde diferentes enfoques por lo que hemos intentado plasmar esta dinámica en lo que conformará la nueva edición del Simposio. El cual contará con la participación de 38 presentaciones orales y 50 en tipo póster por parte de los estudiantes, con tres charlas invitadas y dos mesas redondas, enriquecidas por personas de otras instituciones. Sin dejar a un lado los espacios de convivencia que se brindarán a lo largo del día y las actividades artísticas con las que concluirá cada uno de éstos.

Con lo antes mencionado y más sorpresas, únicamente tu participación activa podrá completar este nutrido evento. Sin más, sólo nos queda darte una vez más la bienvenida y nuestro agradecimiento por colaborar en esto que es para ti y te pedimos que aproveches cada momento de estos tres días de intercambio, desarrollo y colaboración, pues esperamos que te sean iguales o más enriquecedores de lo que ha sido para nosotros organizarlos.

*Comité Organizador  
Segundo Simposio de Estudiantes IIM*



**Memorias 2do. Simposio de Estudiantes Asociados al IIM**

**Alida Ospina Orejarena**

*Doctorado. Posgrado en Ciencia e Ingeniería de Materiales*

**Jairo Eduardo Leiva Mateus**

*Doctorado. Posgrado en Ciencia e Ingeniería de Materiales*

**Johan Steeven Restrepo Paruma**

*Doctorado. Posgrado en Ciencia e Ingeniería de Materiales.*

**María Teresa Flores Martínez**

*Doctorado. Posgrado en Ciencia e Ingeniería de Materiales*

**Mildred Socorro Cano Velázquez**

*Estancia de Investigación*

**Oscar Edgar Ochoa de Jesús**

*Maestría. Posgrado en Ciencia e Ingeniería de Materiales*

**Roxana Marisol Calderón Olvera**

*Maestría. Posgrado en Ciencia e Ingeniería de Materiales*

**Sonia Esperanza Reyes Gómez**

*Doctorado. Posgrado en Ciencia e Ingeniería de Materiales*



## Memorias 2do. Simposio de Estudiantes Asociados al IIM

### Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM

Agradecemos la valiosa ayuda y cooperación que brindó todo el personal del Instituto de Investigaciones en Materiales de la UNAM para llevar a cabo la organización de este segundo simposio de estudiantes IIM, en especial para:

**Dra. Ana María Martínez Vázquez**

*(Directora)*

**Dr. Juan Hernández Cordero**

**Alan Dierick Ortega Gutierrez**

*(Secretaría Académica)*

**Dr. José Israel Betancourt Reyes**

*(Secretaría de Vinculación y Divulgación)*

**Dra. Sandra Elizabeth Rodil Posada**

*(Secretaría de Formación de Recursos Humanos)*

**Ing. José de Jesús Camacho Sabalza**

**José Ramón Valdez Gómez**

*(Secretaría Técnica)*

**Lic. Antonio Efraín Díaz Martínez**

**Lic. José Yeiko Alcala Castellanos**

**Lic. Ana Cecilia Hernández Gutiérrez**

***Esteban García Medina***

*(Secretaría Administrativa)*



## Memorias 2do. Simposio de Estudiantes Asociados al IIM

### Patrocinadores

Agradecemos la valiosa aportación que brindaron los patrocinadores al segundo simposio de estudiantes IIM, en especial para:

**Ing. Mónica Natalia Santacruz Venegas**

*(Equipar)*

**Ing. Francisco Javier Iñarritu Pérez**

*(Viresa)*

**Lic. Bertha Gil de Sackschewski**

*(Bruker)*



## Investigadores

Un agradecimiento muy especial a todos los investigadores que brindaron su experiencia y tiempo para llevar a cabo las evaluaciones de los trabajos presentados en el segundo simposio de estudiantes IIM.

**Dr. Ignacio Alejandro Figueroa Vargas**

**Dr. Alfredo Maciel Cerda**

**Dr. Héctor Domínguez Castro**

**Dra. Martha Rosete Aguilar**

**Dra. Ana María Martínez Vázquez**

**Dr. José Ocotlán Flores Flores**

**Dr. Carlos Cosio**

**Dr. José Israel Betancourt Reyes**

**Dr. Juan Cheang Wong**

**Dr. Carlos Ignacio Mendoza Ruiz**

**Dr. Ernesto Rivera García**

**Dra. Carolina Caicedo Cano**

**Dr. Ricardo Vera Graziano**

**Dr. Rafael Mendoza Pérez**

**Dr. Manuel García Hipólito**

**Dr. Giovanni Ramírez González**

**Dr. Enrique Camps Carvajal**

**Dr. Juan Manuel González Carmona**

**Dr. Stephen Muhl Saunders**

**Dra. Angélica Estrella Ramos Peña**



**Memorias 2do. Simposio de Estudiantes Asociados al IIM**

**Dra. Betsabé Marel Monroy Peláez**

**Dra. Patricia Guadarrama Acosta**

**Dra. Monserrat Bizarro Sordo**

**Dr. Eduardo Rangel Cortés**

**Dr. Juan Rodrigo Vélez Cordero**

**Dra. Violeta Márquez Cruz**

**Dr. Ricardo Alfaro Fuentes**



Memorias 2do. Simposio de Estudiantes Asociados al IIM





## Química sostenible. Metátesis de hules y aceites naturales.

A. Martínez<sup>1</sup>, S. Gutiérrez<sup>2</sup>, M.A. Tlenkopatchev.<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Estudios Ambientales, Universidad de la Sierra Juárez, UNSIJ.

<sup>2</sup> Centro de Investigaciones Biológicas del Noroeste, CIBNOR.

<sup>3</sup> Instituto de Investigaciones en Materiales, IIM-UNAM.

e-mail: contacto arampmx@gmail.com

Nuestra investigación cumple con los preceptos de la *Química Sostenible*, una nueva filosofía química. Nuestro trabajo se encuentra publicado en el libro "*Química sostenible. Metátesis de hules y aceites naturales*" [1] y; trata de nuevas rutas para la degradación de hule natural e industrial, polialquenameros y desechos de hules; usando aceites naturales, aceites esenciales y olefinas funcionalizadas. [1-2] Las degradaciones realizadas vía metátesis en presencia de catalizadores Ru-alquilideno, disponibles comercialmente, y Ru-vinilideno, sintetizados en nuestro laboratorio; [3] permiten la obtención de una amplia gama de productos de alto valor comercial. Por ejemplo, de la degradación del hule con olefinas funcionalizadas, se obtienen telequéricos para la síntesis de polímeros de condensación. [2] De la degradación del hule con aceites vegetales y esenciales, se obtienen diversos tipos de biocombustibles.

Asimismo, al modificar vía metátesis, el polialquenamero de norborneno (NORSOREX®) con aceites vegetales; el material se convierte en un polímero biodegradable. [1]

Agradecimientos: A CONACyT por la becas 172442 (Martínez) y 202796 (Gutiérrez); al Dr. Aguilar Vega y a los técnicos Alejandrina Acosta y Salvador López.

### Referencias:

[1] M.A. Tlenkopatchev, S. Gutiérrez, A. Martínez, *Química sostenible. Metátesis de hules y aceites naturales*, Ed. Académica Española, 2013.

[2] S. Gutiérrez, M.A. Tlenkopatchev; *RLMM.*, 2009, S1, 1763.

[3] A. Martínez, S. Gutiérrez, M.A. Tlenkopatchev. Patente MX/a/2012/00685.



# **Efecto de la velocidad de enfriamiento en la microestructura de aleaciones complejas de aluminio.**

T. G. Núñez<sup>1</sup>, J.A. García<sup>1</sup>.

*<sup>1</sup>Universidad Nacional Autónoma de México. Departamento de Ingeniería Química Metalúrgica. Edificio D. Facultad de Química. Ciudad Universitaria. México D.F.*

*email: tany\_velazquez@hotmail.com*

Las aleaciones coladas base aluminio multi-elementos o complejas son un área muy importante de desarrollo, ya que el control de la forma, tamaño y distribución de las fases, así como el tamaño de grano y el espaciamiento interdendrítico resultan muy importantes en sus propiedades mecánicas en condiciones de colada sin necesidad de recibir un tratamiento térmico. Es posible el control de la forma, tamaño y fracción de fases complejas en aleaciones A356-Cu-Mg-Ni durante la solidificación controlando la composición química, la velocidad de enfriamiento y el tratamiento en fase líquida. Las fases precipitadas y el efecto del tratamiento en estado líquido, pueden ser identificadas en base a los cambios que se presentan en la curva de enfriamiento.

En este trabajo se estudió el efecto de aleantes Cu, Mg y Ni; así como la velocidad de enfriamiento, en una aleación Al-(6.5-7.5) Si, conocida como A356, en su estructura y propiedades así como la velocidad de enfriamiento. Esto a través del análisis de curvas de enfriamiento, la microestructura.

Se utilizaron pequeñas copas de silicato-CO<sub>2</sub> de cuatro diferentes diámetros, las cuales sirvieron para tomar muestras de la aleación fundida y así recopilar los datos de temperatura y tiempo para analizarlos. De igual manera, estas muestras fueron utilizadas para evaluar la microestructura en los diferentes diámetros.

Las curvas de enfriamiento obtenidas fueron analizadas y se determinaron las reacciones de transformación durante la solidificación, relacionando éstas con la microestructura observada.

Agradecimientos: Proyecto financiado por CONACyT.

Apoyo en el desarrollo experimental de Pedro Damian Barco Zamarripa.



## Memorias 2do. Simposio de Estudiantes Asociados al IIM

### Referencias:

- 1) Hogerl J., Spaic S., Tensi H., Aluminium, 74, Jahrgang. 1998.10.780p.
- 2) Elsen W., Van Wiggeren P.C., Chai G., Backerud I., 3<sup>rd</sup> Int. Conference of Al Alloys, Norwegian Inst. of Tech.1972.78p.
- 3) Roy N., Samuels A.M., Samuels S.H., Metall. and Mat. Trans. A, V.1996. 27A, 415 p.
- 4) Tawfik N.L., J. Mat. Sci. 1997. 32(11), 2997-3000p.
- 5) Mcdonald S.D., Dahle A.K., Taylor J.A., "Microstructural Evolution of an Al-Si-Mg Foundry Alloy During Solidification", Die Casting Bulletin 88-12-19p.
- 6) Apelian D. and Cheng J.J.A, "Al-Si Processing Variables: Effect on Grain Refinement and Eutectic Modification", AFS Transactions. 1986.797-808p.



## **Desarrollo de metodologías espectroscópicas aplicadas a la caracterización de minerales de interés arqueológico.**

M.D Manrique<sup>1</sup>, J.L. Ruvalcaba Sil<sup>1</sup>, P. Claes<sup>1</sup>, E. Casanova González<sup>1</sup>, V. Aguilar Melo<sup>1</sup>

<sup>2</sup>*Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Física, México D. F., México*

*e-mail: mayma@fisica.unam.mx*

Dado el valor intrínseco de los objetos culturales, la pertinencia en el uso de técnicas analíticas no destructivas, no invasivas e in situ para el estudio del patrimonio cultural requiere el desarrollo de nuevas tecnologías así como la expansión de las bases de datos mediante pruebas de laboratorio a materiales de referencia para poder realizar la identificación y caracterización de los objetos presentes en una colección durante los análisis in situ.

El presente trabajo se enfoca en proponer una metodología que permita caracterizar e identificar los minerales de interés arqueológico más usuales en el área de Mesoamérica para resolver problemas de traslado y minimizar la destrucción parcial o total de los objetos arqueológicos. Igualmente, también busca optimizar las bases de datos actuales tomando en consideración las posibles variables históricas y culturales que pudiesen intervenir en la caracterización de una pieza arqueológica.

El estudio comprende en primer lugar el análisis de minerales de referencia mediante equipos portátiles para establecer los alcances de las técnicas en comparación y con el apoyo de equipos de laboratorio. En segundo término realizar microanálisis de las piezas utilizando técnicas de aceleradores de iones para determinar las ventajas en su uso pues éstas requieren del traslado del objeto o la toma de muestras. Además de aplicar esta metodología a piezas de colecciones reales, se analizarán, identificarán y caracterizarán con ella los cambios de fase que estos minerales pueden sufrir en un intervalo de temperatura similar a fuegos prehispánicos (25-1000°C) para comparar con piezas arqueológicas expuestas a este tipo de cambios térmicos.

Palabras clave: caracterización de minerales, arqueológico, espectroscopia.



## Obtención de cintas de la aleación eutéctica Bi-Cd por el método de Melt-spinning para pruebas superplásticas

*O. E. Ochoa, G. Torres*

*Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México, D.F., México  
e-mail: edgar.och@gmail.com*

La superplasticidad es un fenómeno fascinante y un reto para la teoría de materia condensada porque el micro-mecanismo de deformación que hace que los materiales sólidos se comporten en muchos aspectos como fluidos, sin perder su estructura sólida, sigue en discusión [1]. La mayor deformación registrada es de 8000% en un bronce comercial [2]. Ha tenido una fuerte presencia en la industria del conformado, en especial la aeronáutica y la automotriz. No obstante que existe un gran número de aleaciones que registran comportamiento superplástico, en muchos casos el obtener dichas aleaciones, y sus condiciones de trabajo, son costosas, es por ello que es importante desarrollar nuevas aleaciones con las mismas características superplásticas pero que permita disminuir costos de producción. La aleación eutéctica Bi-Cd, de alta pureza (99.99%), fue fundida en un crisol de pyrex al vacío [3][4]. Posteriormente esta aleación fue solidificada rápidamente con la técnica del Melt-spinning [5]. Los parámetros físicos y geométricos del equipo de melt-spinning fueron determinados empíricamente y se logró obtener cintas de diferentes dimensiones físicas, donde el efecto de la velocidad del substrato es relevante para la obtención de las cintas. Se utilizó pruebas de difracción de Rayos-X y micro-dureza, así como microscopía electrónica, para caracterizar a la aleación en sus dos estados: fundición y solidificado rápidamente. Las cintas obtenidas se sometieron a pruebas de tensión a una rapidez de deformación de  $10^{-3} \text{ seg}^{-1}$  [6] y se obtuvo una deformación de 140%.

Palabras clave: Superplasticidad, eutéctica, melt-spinning.

Agradecimientos: Agradezco al Dr. Gabriel García Lara por su apoyo en la parte técnica de este proyecto así como a la M. C. Adriana Tejeda por su colaboración en las pruebas de difracción de Rayos- X.

Referencias:

- [1] M. Lagos, "Elastic instability of grain boundaries and the physical origin of superplasticity," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 85, no. 11, pp. 2332–5, Sep. 2000.



## Memorias 2do. Simposio de Estudiantes Asociados al IIM

- [2] N. Chandra, "Constitutive behavior of superplastic materials," vol. 37, no. December 2000, pp. 461–484, 2002.
- [3] H. Kaya, M. Gündüz, E. Çadirli, and O. Uzun, "Effect of growth rate and lamellar spacing on microhardness in the directionally solidified Pb-Cd, Sn-Zn and Bi-Cd eutectic alloys," *J. Mater. Sci.*, vol. 39, no. 21, pp. 6571–6576, Nov. 2004.
- [4] W. E. Barlow, "The binary and ternary alloys of Cadmium, Bismuth and Lead.," *Gen. Phys. Inorg.*, pp. 1390–1412, 1910.
- [5] V. I. Tkatch, A. I. Limanovskii, S. N. Denisenko, and S. G. Rassolov, "The effect of the melt-spinning processing parameters on the rate of cooling," *Mater. Sci. Eng. A*, vol. 323, no. 1–2, pp. 91–96, Jan. 2002.
- [6] H. A. Viguera, J. Llanes, and G. Torres-Villaseñor, "conformado de una nueva aleación superplástica Cd-Zn-Cu," *Rev. Mexicana Física*, vol. 45 supleme, pp. 171–173, 1999.



## Efecto de la solidificación rápida en aleaciones Co-Cr y su aplicación como aleación biocompatible

A. L. Ramirez-Ledesma<sup>1</sup>, J. A. Juarez-Islas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México

[alramirez1303@hotmail.com](mailto:alramirez1303@hotmail.com); [julioalb@unam.mx](mailto:julioalb@unam.mx)

Las aleaciones base Cobalto-Cromo se utilizan como materiales para implantes dentales, prótesis y bioprótesis por su alto grado de biocompatibilidad, propiedades mecánicas, resistencia a la corrosión y desgaste [1]. Existen básicamente dos procesos para la obtención de aleaciones base-Co: colada y forja. Dependiendo del proceso por el cual se obtenga el material, será la aplicación puesto se tendrán propiedades mecánicas distintas [2]. El interés de desarrollar y estudiar las propiedades de las aleaciones base-Co obtenidas mediante un proceso de solidificación rápida se debe a que se han estudiado poco en éste campo y, en consecuencia, se ha visto poco del efecto de este proceso de solidificación en sus características microestructurales y de transformación en estado sólido. La microestructura de las aleaciones base-Co obtenidas a partir del proceso de colada consiste en dendritas columnares o equiaxiadas de fase  $\alpha$ -Co y/o  $\epsilon$ -Co con cierta cantidad de segregación interdendrítica. Esta segregación interdendrítica reduce las propiedades mecánicas de los materiales y pueden ser zonas potenciales para que se origine una falla [3, 4]. En el presente trabajo se presenta el efecto de la velocidad de enfriamiento durante la solidificación de aleaciones base-Co con distintas composiciones de Cromo (20%, 25%, 30%, 35%, 40% y 44%). Con ayuda de la técnica de Microscopía Electrónica de Barrido (MEB) se observaron las microestructuras correspondientes a las aleaciones Cobalto-Cromo propuestas. A partir de la técnica de Difracción de Rayos-X se obtuvieron las fases presentes en las aleaciones. Lo anterior, es de vital importancia para el entendimiento del efecto de la solidificación rápida en las aleaciones Cobalto-Cromo propuestas. Y así, poder controlar tanto sus propiedades mecánicas como las características de biocompatibilidad requerida para ser utilizadas como implantes en el cuerpo humano.

Palabras clave: Aleaciones base cobalto, solidificación rápida, microestructura.

Agradecimientos: Este trabajo fue financiado por UNAM-DGAPA: PAPPIT proyecto IN213912, proyecto IT101413 y CONACYT proyecto 129780.



## Memorias 2do. Simposio de Estudiantes Asociados al IIM

### Referencias:

- [1] M. Niinomi, "Recent Metallic Materials for Biomedical Applications", Metall. Mater. Trans. A., Vol. 33A, pp. 477-486, 2002.
- [2] J. A. Disegi, R. L. Kennedy and R. Pilliard, "Cobalt-based alloys for Biomedical Applications", ASTM STP, 1365, 1999.
- [3] L. Zhuang and E. Langer, "Effects of cooling rate control during the solidification process on the microstructure and mechanical properties of cast Co-Cr-Mo alloy used for surgical implants", J. Mater. Sci., Vol. 25, pp. 381-388, 1989.
- [4] R. Kaiser, D. Browne and K. Williamson, "Investigation of the effects of cooling rate on the microstructure of investment cast biomedical grade Co alloys", Mater. Sci. Eng., Vol. 27, pp. 1-6, 2011.



## **Caracterización estructural y mecánica de hidrogeles a base de quitosano y poli(alcohol vinílico) para aplicaciones biomédicas.**

I.M. Garnica-Palafox<sup>1</sup>, F.M. Sánchez-Arévalo<sup>1</sup>, C. Velasquillo<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México*

<sup>2</sup>*Instituto Nacional de Rehabilitación, Unidad de Ingeniería de Tejidos Terapia Celular y Medicina Regenerativa, México D. F., México*

*e-mail: marisol.garnica@gmail.com*

Este trabajo describe la síntesis y caracterización de un hidrogel híbrido en forma de membrana delgada, hecho a base de quitosano y poli(alcohol vinílico), químicamente entrecruzado con epiclorhidrina (Q, PVA y ECH, respectivamente) para posibles aplicaciones en el área de ingeniería de tejidos.

La respuesta mecánica de los hidrogeles se evaluó mediante pruebas de tensión uniaxial, mientras que las propiedades estructurales como el peso molecular entre puntos de entrecruzamiento ( $M_{cr1}$ ), el tamaño de poro o malla ( $D_N$ ) y la fracción volumétrica ( $v_s$ ) fueron determinadas a partir del módulo de Young y el porcentaje de hinchamiento, en combinación con la teoría de la red polimérica afín desarrollada por Kuhn. El efecto citotóxico de los hidrogeles debido a la posible presencia de trazas de ECH sin reaccionar, se evaluó mediante pruebas de MTT. La viabilidad de las células sembradas sobre los hidrogeles de Q/PVA/ECH se estudió usando calceína-AM/homodímero de etídio y mediante microscopía electrónica de barrido ambiental (MEBA) se determinó la adhesión celular.

Los hidrogeles mostraron un módulo de Young de  $11 \pm 2$  MPa, un índice de hinchamiento del 167%, la ausencia de efectos citotóxicos durante los primeros 10 días de cultivo *in vitro*, viabilidad del 99% de las células sembradas, adhesión celular a la superficie del material y la formación de matriz extracelular.

De esta manera, los hidrogeles híbridos de Q/PVA/ECH presentan buenas propiedades biológicas, mecánicas y estructurales para su uso potencial como andamios celulares en ingeniería de tejidos.



## Memorias 2do. Simposio de Estudiantes Asociados al IIM

Palabras clave: andamio celular, quitosano, propiedades mecánicas, propiedades estructurales.

Agradecimientos: Trabajo financiado por PAPIIT (IB100512 e IB100512-RR180512) y CONACYT (Sectoriales 114359).



## **Fabricación de andamios tubulares de PGS-PCL para la regeneración de venas y aorta**

A. A. Monroy<sup>1</sup>, R. Vera-Graziano<sup>1</sup>, R. Montiel-Campos<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D.F., México*

<sup>2</sup> *Universidad Autónoma Metropolitana-I Departamento de Física de Polímeros. México D.F., México*

*e-mail: andromedamonroy@gmail.com*

En la actualidad número de personas que mueren o sufren de algún tipo de enfermedades cardiovasculares (ECM) va en aumento superando a las enfermedades infecciosas y parasitarias. Una de estas enfermedades es el aneurisma presentado generalmente en la aorta, el número de pacientes que necesita algún trasplante o prótesis va en aumento con la edad. Esta información es importante para introducir lo que es un andamio. En la Ingeniería de los tejidos implica el cultivo de células, el crecimiento de grupos de células en medios de cultivo a dentro de un andamio en tres dimensiones para que se formen nuevos tejidos. Utilizando las células del paciente este método tiene ventajas que el trasplante no tiene. Los andamios se van degradando conforme va creciendo el nuevo tejido a remplazar. Los andamios son sintetizados a partir de una mezcla de un polímero de rápida degradación como el poliglicerol sebacato (PGS) y un polímero de lenta degradación como la policaprolactona (PCL). Los andamios PGS-PCL son electrohilados usando una razón 2:1 de PGS:PCL, la mezcla utilizada de disolventes es menos toxica que la reportada por otros autores Shilpa Sant y colaboradores. La técnica del electrohilado consta de una solución polimérica donde se aplica un campo eléctrico proveniente del electrodo de polaridad negativa para formar fibras delgadas que son atraídas a un electrodo móvil de polaridad positiva (colector). El colector usado es total mente diferente al reportado en la literatura. Obteniéndose andamios con un módulo elástico a 13.4 MPa, superior al de una aorta.



## Memorias 2do. Simposio de Estudiantes Asociados al IIM

Palabras claves: poliglicerolsebacato, policaprolactona, ingeniería de tejidos y andamios.

Agradecimientos:

Este trabajo fue financiado por CONACyT y PAPIIT

A todos los técnicos académicos del IIM-UNAM que ayudaron en la elaboración de este trabajo Muy en especial a QFB. Damaris Cabrero, M. en C Salvador López Morales, Ing. Químico Gerardo Cedillo Valverde, Químico Miguel Canseco y Dr. Omar Novelo Peralta.

A la Universidad Autónoma Metropolitana unidad Iztapalapa por su colaboración y muy en especial al Dr. Humberto V , Dr. Roberto Olayo y M. en C. Herón Gutiérrez.

A mis compañeros de laboratorio por su ayuda y valiosos comentarios, muy en especial al Dr. Ricardo Vera.

Referencias:

1. Shilpa Sant<sup>1</sup>, Chang Mo Hwang<sup>1</sup>, Sang-Hoon Lee, and Ali Khademhosseini. Hybrid PGS-PCL Microfibrous Scaffolds with Improved Mechanical and Biological Properties
2. Wang YD, Ameer GA, Sheppard BJ, et al. A tough biodegradable elastomer. Nat Biotechnol. 2002; 20(6):602–606. [PubMed: 12042865]
3. Propiedades Mecánicas y resistencia de Aorta Ascendente Patológicas. A Tobaruela, F. J. Rojo, G. U. Guinea, A. Forteza.



Memorias 2do. Simposio de Estudiantes Asociados al IIM

# **Elaboración de andamios en 2D y 3D de Poli-(ácido Láctico), con Bioglass 45S5 por la técnica de electrohilado para la proliferación de células hematopoyéticas.**

D. J. Barrón<sup>1</sup>, J. Enciso<sup>2</sup>, F. Rivera<sup>1</sup>, R. Pelayo<sup>2</sup>, A. Maciel<sup>1</sup>, R. Vera<sup>1</sup>

*<sup>1</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México*

*<sup>2</sup>Laboratorio de Linfopoyesis, Unidad de Investigaciones Médicas en Enfermedades Oncológicas, Centro Médico Nacional Siglo XXI, IMSS, México D.F., México. Contacto: rosanapelayo@gmail.com, jenny\_gr8@msn.com.*

El electrohilado es una técnica relativamente nueva, consiste en aplicar una diferencia de potencial a un sistema (inyector-colector) que "hila" un biopolímero disuelto en un disolvente polar, y que ha ayudado en materia de investigación a proponer posibles soluciones para diferentes problemáticas en el área de los biomateriales. En el campo de aplicaciones biomédicas, ha sido un factor importante al aportar nuevos biomateriales con características biocompatibles, bioabsorbible y biodegradables, que proporcionan la base para la ingeniería de tejidos.

La elaboración de andamios para la regeneración de tejidos de biopolímeros sintéticos reforzados con biocerámicas y biovidrios obtenidos por la técnica de electrohilado, es uno de los sistemas que mejores resultados han proporcionado en la regeneración del tejido óseo y cartílago, lo que ha revolucionado la ingeniería de tejidos. En este trabajo se han propuesto andamios elaborados a partir de Poli-(ácido láctico), PLA. Se ha probado la adsorción de nano y micro partículas de Bioglass 45S5 obtenidas a través de un proceso de fusión y molienda con la finalidad de incrementar la bioactividad superficial de las nanofibras. Se han determinado sus propiedades físico-químicas y de superficie, las cuales determinan la proliferación de células hematopoyéticas en pruebas in vitro. Este trabajo es relevante ya que hasta el momento las pruebas in vitro sobre andamios 2D han resultado prometedoras por lo cual con base a un estudio de porosidad y propiedades mecánicas se propondrá un andamio de este sistema en 3D para pruebas en un bioreactor de flujo continuo.

Palabras clave: Electrohilado, PLA, andamio, ingeniería de tejidos.

Agradecimientos: Al Doctor Filiberto Rivera por su apoyo con la tutoría del proyecto, al Doctor Vera por financiar a través de PAPIIT y a la Doctora Pelayo por mostrar interés en el tema y apoyarnos con las muestras y pruebas celulares.



## Memorias 2do. Simposio de Estudiantes Asociados al IIM

### Referencias:

- [1] Li WJ, Mauck RL, Tuan RS, "Electrospun Nanofibrous Scaffolds: Production, Characterization, and Applications for Tissue Engineering and Drug Delivery," J. Biomed. Nanotechnol., 1(3):259-275, 2005.
- [2] Zhong S, Teo WE, Zhu X, Beuerman RW, Ramakrishna S, Yung LY, "An aligned nanofibrous collagen scaffold by electrospinning and its effects on in vitro fibroblast culture," J. Biomed. Mater. Res., 79A: 456-463, 2006.
- [3] Gonçalo J.M. C, Bruno S. F, Cláudia L da S, Raquel G, Grac¸a A-P, Joaquim M.S. C, "Hematopoietic stem cells from the bone to the bioreactor," j.tibtech vol.21, 05 (2005).



## **Membranas electrohilados de PLLA/quitosano injertado con láctido y gelatina por vía enzimática para mimetizar la matriz extracelular de la piel.**

R. R-Aragón<sup>1</sup>, R. Vera-Graziano<sup>1</sup>, A. Martínez-Richa<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México*

<sup>2</sup>*Universidad de Guanajuato, División de Ciencias Naturales y Exactas, Guanajuato, México*

*e-mail: contacto rudolf.bun@gmail.com*

En la regeneración de piel, los biomateriales utilizados son principalmente polímeros, pueden ser naturales y/o sintéticos algunos con propiedades mecánicas similares a la piel. Para la elaboración de este trabajo se usaron tres biopolímeros; quitosano, polí(L-ácido láctico) o Poli(L-láctido) (PLLA) y gelatina. El objetivo de este trabajo es sintetizar quitosano injertado con láctido y gelatina por vía enzimática y realizar micro y nanofibras por la técnica de electrohilado para mimetizar la matriz extracelular. La síntesis del injerto de quitosano con láctido y la funcionalización con gelatina se llevaron a cabo en tolueno como disolvente y enzima lipasa pancreática porcina como biocatalizador, a 80 °C durante 24 horas. Con los injertos de quitosano, láctido (QL) y gelatina (QGL) se busca combinar las propiedades de adhesión celular y de cicatrización presentes en el quitosano con las propiedades mecánicas que presenta el PLLA. Los injertos se funcionalizaron con gelatina y se caracterizaron por medio de técnicas ATR-FTIR, <sup>13</sup>C RMN CP-MAS, DSC y TGA. Finalmente mediante electrohilado se fabricaron fibras de PLLA y de quitosano funcionalizado. Ésta técnica permite formar fibras a escala nano y micrométrica con características tales las fibras entramadas les confieren una estructura similar a la matriz extracelular. La morfología y porosidad de las fibras se determinó con ayuda de microscopía electrónica de barrido (SEM). Obteniendo como resultados la síntesis de los copolímero QL y QGL y fibras PLLA, PLLA/Gelatina con diámetros promedio de 800 nm.

Palabras clave: Poli(ácido láctico), Gelatina, Quitosano, injerto, electrohilado.

Agradecimientos: A CONACYT por la beca otorgada, a los proyectos PAPIIT IN108913 y CONACYT CENERHIDROCARBUROS. Se agradece al Posgrado de la UNAM. A los autores, al grupo de investigación y compañeros del laboratorio y a los doctores; Dr. Raúl Montiel, Dr. Alfredo Maciel, Dr. Filiberto Rivera. A los técnicos; Q.F.B. Damaris Cabrero (TGA), Gerardo Cedillo (<sup>13</sup>C RMN CP-MAS), Omar Novelo (SEM).



## Memorias 2do. Simposio de Estudiantes Asociados al IIM

### Referencias:

- [1] N. E. Suyatma, A. Copinet, E. Legin-Copinet, F. Fricoteaux, V. Coma, Different PLA Techniques on Chitosan, *J. Polym Environ.* 64 (2011) 166–171.
- [2] G. E. Luckachan, C. K. S. Pillai, Chitosan/oligo L-lactide graft copolymers: Effect of hydrophobic side chains on the physic-chemical properties and bioidegradability, *Carbohydr. Polym.* 64 (2006) 254-266.
- [3] T. Demina, D. Zaytseva-Zotova, M. Yablokov, A. Gilman, T. Akopova, E. Markvicheva, A. Zelenetskii. DC discharge plasma modification of chitosan/gelatin/PLLA films: Surface properties, chemical structure and cell affinity. *Surf. Coat. Technol.* 207 (2012) 508-516.



## Deformación de partículas fluidas en flujos fuertes

A.S. Sanjuan<sup>1</sup>, M.A. H Reyes <sup>2</sup>, A.A. Minzoni<sup>3</sup>, E.A.Geffroy<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>*Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México*

<sup>2</sup>*Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Ingeniería, México D. F., México*

<sup>3</sup>*Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Matemáticas Aplicadas y en Sistemas, México D. F., México*  
e-mail: [alfrsj07@gmail.com](mailto:alfrsj07@gmail.com)

En mecánica de fluidos existe una gran cantidad de problemas relacionados con el manejo y la dinámica de flujos de más de una fase, tanto en aplicaciones tecnológicas, industriales o en sistemas naturales.

En este trabajo se desarrolló un estudio numérico mediante el método de elementos de frontera (BEM) de un flujo multifásico, que consta de una partícula dispersa en un fluido. A la fase continua se le aplica un campo de flujo y se observa cómo se deforma la fase discreta (una gota). Para modelar la interfaz que divide la partícula del fluido externo, se utilizó una discretización mediante triángulos esféricos.

Para la validación del código se emplearon datos experimentales y datos de otras simulaciones (bidimensionales). Una vez validado el código fue posible generar una gama de experimentos novedosos en los que la deformación de la partícula dispersa (gota) sufre una deformación suficientemente grande en los que los códigos bidimensionales ya no ofrecen una buena aproximación debido a los efectos tridimensionales en la gota. Los resultados obtenidos muestran como a pesar de deformar la gota en un campo bidimensional, la deformación de la gota es totalmente tridimensional.

Palabras clave:Flujos fuertes, BEM, fluido multifásico.



## **Obtención de camino libre medio en pericardio de bovino mediante retrodispersión aumentada de luz coherente**

Natanael Cuando-Espitia, Juan Hernández-Cordero

*Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, México D. F., México*  
*e-mail: natanael@iim.unam.mx*

El tejido biológico presenta generalmente un alto esparcimiento óptico en la región del espectro visible. Este esparcimiento limita la profundidad de penetración de la luz en aplicaciones como la tomografía por coherencia óptica (OCT). Debido a lo complejo del tejido biológico, resulta difícil obtener coeficientes de esparcimiento con pruebas ópticas estándar.

La retrodispersión aumentada de luz (“Enhanced Backscattering,” EBS) es un efecto en el que un haz de luz coherente es esparcido por una muestra difusa en la dirección de retrodispersión [1]. Comparada con la retrodispersión convencional, los ángulos de recepción de la EBS permiten duplicar los valores en intensidad óptica registrados experimentalmente. Al medir la intensidad retrodispersada en ángulos pequeños (miliradianes) es posible obtener información sobre el camino que los fotones recorren entre eventos de esparcimiento antes de salir del medio esparcador. A pesar de su amplio estudio, existen muy pocos reportes de la aplicación de EBS en muestras biológicas [2].

En el laboratorio de Sensores de Fibra Óptica y Fibra Óptica Láser del IIM, hemos iniciado un estudio del esparcimiento de luz láser en pericardio de bovino por medio del efecto de EBS. En general, hemos observado que el camino libre medio para las muestras estudiadas se encuentra entre 5 y 10 micras. Además, hemos encontrado que las mediciones de camino libre medio mediante esta técnica varían dependiendo de la alineación de las fibras que componen el pericardio.

Palabras clave: Retrodispersión aumentada, tejido biológico, camino libre medio.

### Referencias:

- [1] E. Akkermans, P.E. Wolf, R. Maynard, G. Maret, “Theoretical study of the coherent backscattering of light by disordered media,” J. Phys. France, V 49, N 1, 1988, pp.77-98.
- [2] Liana V. Kuznetsova, Dmitry A. Zimnyakov, “Coherent backscattering diagnostics of tissue-like media and tissues,” Fifth International Conference on Photonics and Imaging in Biology and Medicine, 2007.



## Microcalentadores de fibra óptica y nanopartículas de oro para la generación de microburbujas

Emma Brambila Tamayo<sup>1</sup>, Reinher Pimentel-Domínguez<sup>2,3</sup> y Juan Hernández-Cordero<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Ciencias, México D. F., México*

<sup>2</sup>*Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México*

<sup>3</sup>*Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Medicina, México D. F., México*

*e-mail: vetuasaber@ciencias.unam.mx*

Actualmente, las microburbujas tienen un gran número de aplicaciones en diversos campos científicos, particularmente en biología y medicina. Debido a esto, existe un amplio sector dedicado a su estudio, intentando desarrollar y mejorar diversas técnicas para su generación y control. Una técnica que ha resultado atractiva para la generación de microburbujas es la nucleación, ya que ofrece ventajas sobre otras técnicas tales como la cavitación. Recientemente, se ha propuesto el uso de puntas de fibras ópticas recubiertas con nanopartículas de carbono para la formación de microburbujas. La técnica consiste en calentar un fluido de forma altamente localizada por medio de luz láser que viaja a través de la fibra óptica. La luz es absorbida por una película de nanopartículas, depositadas previamente en la punta de la fibra, calentando el medio a su alrededor. En el presente trabajo se demuestra el uso de nanopartículas de oro para la generación de microburbujas. El uso de estas nanopartículas es de gran interés debido a su alta biocompatibilidad, en comparación con las nanoestructuras de carbono. El uso de oro puede permitir la integración de este microcalentador en sistemas biológicos. Asimismo, se explora la creación de arreglos de microburbujas para aplicaciones en optofluídica

Palabras clave: microburbujas, fibras ópticas, efecto fototérmico, nanopartículas de oro



Memorias 2do. Simposio de Estudiantes Asociados al IIM

## Inestabilidades paramétricas y térmicas en fluidos

Jonathan Boanerge Pérez Navarrete<sup>1</sup>, Marco Antonio Reyes Huesca<sup>2</sup>,  
Antonmaria Minzoni Alessio<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México*

<sup>2</sup>*Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Ingeniería, México D. F., México*

<sup>3</sup>*Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Matemáticas Aplicadas, México D. F., México*

*e-mail: iimalumno@gmail.com*

El presente trabajo parte de la solución del Modelo H (Ecuaciones de Cahn-Hilliard y Navier-Stokes acopladas), mediante el esquema numérico de la transformada de Fourier discreta, para indagar mediante un estudio numérico las inestabilidades paramétricas y térmicas en fluidos binarios con densidad semejante incompresible con densidad y movilidad variable, confinados por paredes y con periodicidad horizontal, desarrollado por Ceniceros y Colaboradores [1], utilizando una discretización semi-implícita la que fuera derivada de la discretización de problemas difusivos. En este acercamiento se emplea el modelo de campos de fase el cual considera que la interfase entre los fluidos se reemplaza por una interfase de espesor reducido pero distinto de cero donde las fuerzas interfaciales, y por lo mismo con gradientes elevados pero que el método resuelve exitosamente, se hallan distribuidas uniformemente, cuyo campo de fases se describe en términos de un parámetro de orden, el cual por lo mismo permite la descripción de fenómenos distintos como lo es la separación de una mezcla binaria de fluidos, cuyos resultados preliminares se presentan.

Palabras Clave: Fluidos, Campos de fase, Modelo H.

### Referencias:

[1] V.E. Badalassi, H.D. Ceniceros, S. Banerjee. Computation of multiphase systems with phase field models. J. Comp. Phys. 190 (2003) 371–397



## Fabricación de bomba opto-neumática a escala micrométrica

M.G. Pérez-Zúñiga, J. Hernández-Cordero, J. R. Vélez-Cordero

*Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en  
Materiales, México D. F., México  
e-mail: ingperezzu\_misael@hotmail.com*

En este trabajo se propone emplear el fenómeno de expansión térmica sobre cierto volumen de aire confinado en un capilar, como base para desarrollar una bomba micrométrica. Los resultados obtenidos servirán para poner a prueba la capacidad de mover líquidos por medios ópticos a través de microcanales. El experimento consiste en utilizar luz láser ( $\lambda = 975 \text{ nm}$ ) guiada por fibra óptica monomodal (SMF-28), con una potencia óptica entre 184 mW y 221 mW, que interactúa con recubrimientos a base de un polímero fotosensible<sup>1</sup>. El recubrimiento permitirá potenciar el efecto térmico para originar, en primer lugar, el mecanismo de expansión-compresión del aire, y en segundo lugar, el desplazamiento del líquido de interés.

La presentación final del dispositivo consistirá de un elemento que funcionará como válvula unidireccional para permitir el suministro de líquido una vez que se ha expulsado cierto volumen del mismo fuera de la bomba. El mecanismo de cierre y apertura estará conformado por una membrana hecha de un polímero elástico. Será necesario fabricar los conductos a través de los cuales se transportará el líquido. Pruebas experimentales con aceite mineral demuestran la alta movilidad de este líquido a través de micro capilares<sup>1</sup>, aunque también es posible mover agua.

La propuesta de fabricación del dispositivo atiende a una necesidad básica en este tipo de sistemas: desplazar de manera eficiente pequeños volúmenes de líquido en microcanales. El desarrollo de una bomba a escala micrométrica en un futuro permitirá no sólo suministrar líquido dentro de pequeñas vías, sino también desarrollar sistemas similares mucho más reducidos.

Palabras clave: Microfluídica, medios ópticos, microfabricación.

Agradecimientos: Este trabajo fue financiado por CONACyT a través del proyecto 154464.

### Referencias:

[1] Vélez-Cordero, J. R.; Velázquez-Benítez, A. M.; Hernández-Cordero, J. Thermocapillary flow in glass tubes coated with photoresponsive layers. *Langmuir* **2014**, 30 (18), 5326–5336.



## **Diseño y construcción de un tanque para el almacenamiento de Hidrógeno para aplicaciones móviles.**

A. M. Castañeda<sup>1</sup>, J. C. Carranza<sup>1</sup>, K. Suárez<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Instituto Tecnológico de Morelia, Morelia, Michoacán.  
e-mail: cstlpz@hotmail.com*

<sup>2</sup>*UNAM-Instituto de Investigación en Materiales, Morelia Michoacán.*

En la búsqueda por combustibles renovables, eficientes y limpios, el Hidrógeno es considerado como la mejor opción. El hidrógeno ofrece la posibilidad de generar un ciclo limpio de aprovechamiento de energías renovables vía la electrólisis del agua y las pilas de combustible.

Almacenar el Hidrógeno es uno de los objetivos para desarrollar una de este elemento. La mayoría de las investigaciones dirigidas al almacenamiento de hidrógeno se enfocan en almacenarlo de manera compacta y ligera para vehículos de este componente. Para lograr dicho objetivo se estudian la optimización de distintos métodos, que incluyen: altas presiones, temperaturas criogénicas, pero principalmente en compuestos químicos que presenten capacidad de almacenamiento y liberación de hidrógeno, ya sea mediante enlaces químicos o por fisisorción.

Se propone el diseño y construcción de un tanque de almacenamiento de hidrógeno que opere a 500°C y hasta 100 bares de presión. El diseño se basará en un intercambiador de calor. Este tanque usara la aleación metálica TiFe como medio de almacenamiento de Hidrógeno. El tanque de almacenamiento será incorporado a un prototipo de automóvil a pilas de combustible a hidrógeno.

Palabras clave: Almacenamiento de Hidrógeno, tanque, intercambiador de calor, Hidrógeno como combustible.

Agradecimientos: Este trabajo está siendo realizado gracias a la UNAM-Instituto de Investigación en Materiales sede Morelia, y al apoyo de la Dra. K. Suárez Alcántara como asesor externo, así como el Ing. Miguel Valdovinos Lombera asesor interno del Instituto Tecnológico de Morelia.

### Referencias:

- [1] María Esther Guérvos Sánchez, "Principales Técnicas de almacenamiento de Hidrógeno," pp. 20-23, marzo 2003.
- [2] Clara Fernández Bolaños, "Energética del Hidrógeno. Contexto, Estado Actual y Perspectivas del Futuro", pp. 10-13, 2010.



## **Aleación TiFe-M-5% peso (M=V, Ni) como material de almacenamiento de hidrógeno.**

J. C. Carranza<sup>1</sup>, A. M. Castañeda<sup>1</sup>, K. Suárez<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Instituto Tecnológico de Morelia, Morelia Michoacán.

e-mail: carlos\_jneta@hotmail.com

<sup>2</sup>UNAM-Instituto de Investigación en Materiales, Morelia Michoacán.

e-mail: karina\_suarez@iim.unam.mx

El hidrógeno se ha considerado como un combustible conveniente, limpio y económico debido a las diversas formas en que puede obtenerse, éste puede producirse a partir de una amplia variedad de fuentes de energía tales como: el gas natural, el carbón, la biomasa, el agua, etc., así como de las aguas negras, de los residuos sólidos, llantas y desechos de petróleo. También es considerado el combustible del futuro ya que es el elemento más abundante en la naturaleza y el que posee el más alto contenido de energía por unidad de masa. <sup>[1]</sup> La energía química por masa de hidrógeno (142 MJ/kg) es por lo menos tres veces mayor que la de otros combustibles químicos (por ejemplo, el valor equivalente para hidrocarburos líquidos es 47 MJ/kg). <sup>[2]</sup> Una vez producido, el hidrógeno es un combustible sintético limpio: cuando se quema con el oxígeno, el único gas de escape es vapor de agua.

El hidrógeno reacciona con distintos metales o compuestos intermetálicos formando hidruros. Bajo adecuadas condiciones de temperatura y presión esta reacción es reversible. En teoría una cierta masa metálica puede ser cargada y descargada un número prácticamente ilimitado de veces, pudiendo utilizarse como un tanque para el almacenamiento sólido de hidrógeno.

El almacenamiento basado en hidruros metálicos presenta una eficacia energética potencialmente elevada, puesto que el hidrógeno se retiene a baja temperatura y el 100% del hidrógeno que se ha adsorbido se puede recuperar y tiene la ventaja de que puede ser realizado a bajas presiones.

Palabras clave: Almacenamiento de hidrógeno, hidruros metálicos, hidrógeno como combustible.

Agradecimientos: Este trabajo está siendo realizado gracias a la UNAM-Instituto de Investigación en Materiales sede Morelia, y al apoyo de la Dra. K. Suárez Alcántara.

### Referencias:

[1] Botas J.A., Calles.J.A., Dufour J., La economía del hidrógeno -una visión global sobre la revolución energética del siglo XXI. Grupo de Ingeniería Química y Ambiental. Escuela Superior de Ciencias Experimentales y Tecnología (ESCET), Universidad Rey Juan Carlos, 2006.

[2] Winter, C. J. & Nitsch, J. Hydrogen as an Energy Carrier: Technologies, Systems, Economy (Springer, 1988).



## Estudio sobre el proceso de captura de CO<sub>2</sub> en cobaltato de sodio (NaCoO<sub>2</sub>)

Elizabeth Vera, Heriberto Pfeiffer

*Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México  
e-mail: pfeiffer@iim.unam.mx*

Se presenta un estudio cualitativo del proceso de captura de dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) en cobaltato de sodio (Na<sub>x</sub>CoO<sub>2</sub>, x~0.69). El Na<sub>x</sub>CoO<sub>2</sub> fue sintetizado por el método de química del estado sólido y analizado térmicamente con estudios dinámicos e isotérmicos a altas temperaturas en flujo continuo de CO<sub>2</sub>. Se encontró que el Na<sub>x</sub>CoO<sub>2</sub> presenta un 24% de eficiencia de captura de CO<sub>2</sub>. El Na<sub>x</sub>CoO<sub>2</sub> y algunos productos de los análisis térmicos fueron analizados estructural y morfológicamente mediante difracción de rayos-X, adsorción-desorción de nitrógeno y microscopía electrónica de barrido. Para la muestra sin tratamiento térmico se observaron morfologías planares aglomeradas, mientras que para los productos de análisis térmicos se observó la generación de nuevas fases en la superficie del material. Las nuevas fases se determinaron por difracción de rayos X, resultando ser carbonato de sodio y óxidos de cobalto, ambos indicadores de la reactividad del Na<sub>x</sub>CoO<sub>2</sub> con el CO<sub>2</sub>. Estudios de absorción atómica fueron realizados para determinar las concentraciones de sodio (Na) y cobalto (Co) en el Na<sub>x</sub>CoO<sub>2</sub>. Por estudios de adsorción de nitrógeno (N<sub>2</sub>) se encontró un área superficial de 0.6 m<sup>2</sup>/g. Con estos dos últimos estudios, se corrobora que la quimisorción del CO<sub>2</sub> en el Na<sub>x</sub>CoO<sub>2</sub> se debe asociar principalmente a procesos difusivos.

Palabras clave: Cobaltato de sodio, Análisis Térmico, Adsorción de CO<sub>2</sub>

Agradecimientos: Este trabajo fue financiado por SENER-CONACyT y PAPIIT.

### Referencias:

- [1] Monthly Mean Concentrations at the Mauna Loa Observatory (PPM), National Oceanic & Atmospheric Administration, Earth System Research Laboratory, Trends In Carbon Dioxide.
- [2] Markewitz P., Kuckshinrichs W., Leitner W., Linssen J., Zapp P., Bongartz R., Schreiber A., Müller T.E. Energy Environ. Sci. 2012, 5, 7281-7305.
- [3] Ávalos-Rendón T., Casa-Madrid J., Pfeiffer H., Journal of Physical Chemistry A 2009, 113, 6919-6923.
- [4] Pfeiffer H. Advances in CO<sub>2</sub> Conversion and Utilization; ACS Symposium Series; Hu, Y. H., Ed.; American Chemical Society: Washington, DC, 2010; Vol. 1056, pp 233-253.



## **Determinación de la actividad fotocatalítica de óxido de bismuto y oxiclورو de bismuto en polvo y en película delgada.**

L. Gómez<sup>1</sup>, M. Bizarro<sup>1</sup>, P. Jagdale<sup>2</sup>

*<sup>1</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México*

*<sup>2</sup>Politécnico di Torino, Torino, Italia*

*email: laurasthefania@hotmail.com*

En este trabajo se establece actividad fotocatalítica del  $\text{Bi}_2\text{O}_3$  y en  $\text{BiOCl}$ , tanto en película delgada, como en polvo. La actividad fotocatalítica se midió a partir de la degradación de colorantes orgánicos (anaranjado de metilo (AM) y azul ácido 113 (AA113)) modificando las condiciones para determinar los parámetros para una mayor degradación. Los resultados obtenidos de las degradaciones de colorante con películas delgadas y con polvos son comparables, las degradaciones resultantes en ambas coinciden en los órdenes de magnitud. Otro resultado observado es que el  $\text{Bi}_2\text{O}_3$  presenta mayor actividad fotocatalítica que el  $\text{BiOCl}$  en película delgada y en polvo. Por último la molécula del colorante azul ácido 113 se degrada con mayor facilidad que la molécula de azul ácido 113.

Palabras clave: Fotocatálisis, óxido de bismuto, oxiclورو de bismuto.

### Referencias:

- [1]. Y. Wang, Z. Shi, C. Fan, X. Hao, G. Ding, Y. Wang, "Synthesis of  $\text{BiOCl}$  photocatalyst by a low-cost, simple hydrolytic technique and its excellent photocatalytic activity", *Int. J. Minerals, Metallurgy and Materials*, 19, (2012) 467.
- [2]. T.P. Gujar, V.R. Shinde, C.D. Lokhande\*, "Spray pyrolysed bismuth oxide thin films and their characterization", *Materials Research Bulletin* 41 (2006) 1558–1564
- [3]. W. Hao, Y. Gao, X. Jing, W. Zou, Y. Chen, T. Wang "Visible Light Photocatalytic Properties of Metastable g- $\text{Bi}_2\text{O}_3$  with Different Morphologies" *J. Mater. Sci. Technol.*, 30(2), (2014), 192-196.



## Captura química de CO<sub>2</sub> en zirconato de sodio dopado con potasio (K-Na<sub>2</sub>ZrO<sub>3</sub>)

Pedro Sánchez-Camacho, Heriberto Pfeiffer.

*Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en  
Materiales, México D. F., México  
e-mail contacto: pedsacam@gmail.com*

El uso de combustibles es parte esencial en la vida humana para satisfacer nuestras necesidades energéticas y el gran crecimiento de la población en la Tierra ha provocado que la demanda de estos combustibles sea cada vez mayor. Sin embargo, su combustión produce también algunos gases contaminantes, como es el caso del CO<sub>2</sub>, con lo cual la concentración atmosférica de este gas se ha incrementado considerablemente y le es atribuible como principal causa del cambio climático, debido a sus propiedades como gas de efecto invernadero.

En el año de 1998 Nakagawa y Ohashi presentaron un nuevo método de captura de CO<sub>2</sub> mediante la reacción entre metazirconato de litio (Li<sub>2</sub>ZrO<sub>3</sub>) y el CO<sub>2</sub>. A partir de entonces, se han reportado trabajos con otros cerámicos tales como ortosilicato de litio, metazirconato de sodio (Na<sub>2</sub>ZrO<sub>3</sub>), cuprato de litio (Li<sub>2</sub>CuO<sub>2</sub>), titanato de sodio (Na<sub>2</sub>TiO<sub>3</sub>), entre otros. Para el caso particular del metazirconato de sodio (Na<sub>2</sub>ZrO<sub>3</sub>), se han reportado diversos artículos que lo presentan como un buen material captor de CO<sub>2</sub>, capaz de capturar desde la temperatura del medio ambiente hasta temperaturas superiores a las utilizadas en la mayor parte de los procesos de combustión. Este material captura químicamente a través de 2 procesos: quimisorción en la capa superficial, y quimisorción controlada por procesos difusivos.

Con base en estos estudios, en este trabajo se propone estudiar el efecto sobre el proceso de quimisorción que implica el agregar pequeñas cantidades de 3 y 5% de carbonato de potasio (K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>) a Na<sub>2</sub>ZrO<sub>3</sub> bajo mezcla mecánica. Las muestras se caracterizaron por difracción de rayos X, adsorción de N<sub>2</sub> y microscopía electrónica de barrido. Posteriormente, estos materiales se sometieron a flujos de CO<sub>2</sub> bajo condiciones dinámicas e isotérmicas para evaluar su captura. Los resultados muestran que todas las composiciones capturan CO<sub>2</sub> satisfactoriamente con valores de eficiencia considerables. La presencia de K favorece el proceso de quimisorción a temperaturas menores o iguales a 400°C, debido a la formación de fases eutécticas puntuales sobre la superficie del material, mientras que a temperaturas mayores a los 400°C el potasio dificulta la captura al favorecer la sinterización de la capa externa formada, producto de la reacción entre el Na<sub>2</sub>ZrO<sub>3</sub> y CO<sub>2</sub>.

Palabras clave: captura de CO<sub>2</sub>, zirconato de sodio, cerámicos alcalinos, dióxido de carbono.

Agradecimientos: Para la realización de este trabajo se contó con apoyo del proyecto SENER-CONACYT (150358).



## De tintas naturales a pigmentos híbridos

E. Pérez-Ramírez, E.J. Lima-Muñoz

*Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en  
Materiales, México D. F., México  
e-mail: contacto rv\_k292@hotmail.com*

Las tintas naturales exhiben una gran gama de colores atractivos, pero de una limitada aplicación debido a su rápida degradación. En el caso de los productos naturales de México hay una gran tradición de extractos tintóreos, empleados sobretodo en los textiles, sin embargo las tintas procedentes del extracto de añil (*Indigofera suffruticosa*) y cochinilla grana (*Dactylopius coccus*) son los únicos casos donde las tinta naturales se han transformado en pigmentos híbridos de gran duración. Las betalainas son un grupo de compuestos naturales sumamente atractivos debido a sus colores, sin embargo sus aplicaciones como compuestos colorantes son muy limitadas debido a su pobre estabilidad. En el año 2009 se reportó por primera vez la formación de un pigmento estable partiendo de betalainas de origen natural. En dicho trabajo se empleó  $\gamma$ -alúmina como soporte y agente estabilizador de las betacianinas contenidas en un extracto de buganvilia (*Bougainvillea glabra*), formando con ello un pigmento híbrido nuevo [1]. Sin embargo, falta información sobre las características fisicoquímicas de ésta y otras matrices, que podrían lograr una óptima estabilización de las tintas naturales, permitiéndonos la formación de una nueva familia de pigmentos híbridos. Nuestro proyecto propone la elaboración y evaluación de una familia nueva de pigmentos híbridos, que emplea matrices inorgánicas como soportes de tintas naturales.

Palabras clave: pigmentos híbridos, buganvilia, betalaínas y filosilicatos.

Agradecimientos: Este trabajo fue financiado por la beca de CONACyT para alumnos de doctorado. Agradecemos también el valioso apoyo de los maestros, I.Q. Gerardo Cedillo Valverde, M. en C. Adriana Tejeda Cruz, Dr. Omar Novelo Peralta y M. en C. Marco Vera (UAM).

### Referencias:

[1] Lima E.; Bosch P.; Loera S.; Ibarra I.; Laguna H. y Lara V.; Applied Clay Science; 42; 478–482; 2009.



## Espejos omnidireccionales basados en silicio poroso

A. Palavicini, C. Wang

*Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México*  
e-mail: alexein18@ciencias.unam.mx

Los espejos omnidireccionales son dispositivos ópticos que reflejan cerca del 99% de la radiación incidente en un intervalo amplio de frecuencias para todos los ángulos de incidencia. Comúnmente éstos están formados por múltiples capas de material dieléctrico y cada una cumple la condición de un cuarto de longitud de onda para el centro de la banda de reflexión. Los reflectores de Bragg distribuidos son un ejemplo de cristales fotónicos, los cuales son estructuras que poseen bandas prohibidas y permitidas de fotones en similitud con las estructuras electrónicas. El silicio poroso (PSi) tiene la virtud de poseer un índice de refracción dependiente de la porosidad, cuyo valor puede determinarse en forma continua bajo diseño. El PSi se obtiene al anodizar electroquímicamente una oblea de silicio cristalino (c-Si) y la densidad de corriente de anodización fija la porosidad, por lo que se obtienen multicapas de PSi alternando dicha corriente. En este estudio, se diseñan espejos omnidireccionales partiendo de la teoría electromagnética y la técnica de matriz de transferencia [1], agrupando multicapas de tal forma que cada grupo posee una banda de reflectancia distinta para obtener una banda amplia de reflectancia. Por otro lado, se sintetizan dichos espejos que funcionan en el rango de frecuencias infrarrojo y se mide su espectro de transmisión mediante FTIR, el cual proporciona también información acerca de los átomos sobre la superficie de los poros. Por último, se encuentra una buena concordancia entre la transmitancia calculada y la medida.

Palabras clave: Silicio poroso, reflector omnidireccional, multicapas infrarrojas.

Agradecimientos: Este trabajo fue parcialmente financiado por CONACyT-131596 y PAPIIT-IN113714.

Referencias:

[1] A. Palavicini y C. Wang, Infrared transmission in porous silicon multilayers, *Optics and Photonics Journal*. 3 (2013) 20–25.



Memorias 2do. Simposio de Estudiantes Asociados al IIM

## **Estudio de la relación estructura- propiedades mecánicas en espumas metálica de Al**

J. H. Cadena<sup>1</sup>, I. Alfonso<sup>1</sup>, I. A. Figueroa<sup>1</sup>, G. A. Lara<sup>1</sup>, O. Novelo<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito Exterior s/n, Cd. Universitaria, Del. Coyoacán, México, D.F. CP 04510, México.*

*e-mail: Jhcf2010@gmail.com*

Las buenas propiedades mecánicas y ligero peso colocan a las espumas metálicas como materiales de gran interés [1], por otro lado, la amplia gama de técnicas de obtención de espumas porosas así como las numerosas aplicaciones los hacen candidatos a estudio [2]. El presente trabajo muestra la producción de espumas metálicas de Al, mediante ruta SDP, usando un dispositivo de atmósfera controlada, estudiando pureza, tipo y tamaño de partículas metálicas, así como el tamaño de material de sacrificio, la presión de compactación de la pastilla en verde, temperatura y tiempo de sinterización. Finalmente, se obtuvieron los parámetros óptimos de producción así como una relación marcada en el tipo, forma y cantidad de poros en la espuma con respecto a las propiedades mecánicas.

Palabras claves: Espumas metálicas, Propiedades mecánicas, Aluminio.

Agradecimientos: Trabajo financiado por el proyecto SENER-CONACyT 151496, soporte técnico A. Tejeda, C. Flores, D. Cabrero, J. Arellano, C. Delgado, E. Sánchez, C. González, J. Morales, J. M. Garcia y G. Aramburo

### Referencias:

- [1] Davies G. J. and Zhen S., J. of Mater Sc. 18 (1983)1899
- [2] Banhart J., Progress in Mater. Sc. 46 (2001) 559-632.



## Resolución y refinamiento estructural del succinato de cobre anhidro $\text{Cu}(\text{C}_4\text{H}_4\text{O}_4)$ , a partir de su patrón de difracción de rayos X en polvos.

J. Rodríguez-Hernández, P Vera Cruz, L.F. del Castillo Dávila, J. Balmaseda

<sup>1</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México  
e-mail: joelis.rh@gmail.com

Una familia de materiales que se ha desarrollado intensamente en los últimos años son los sólidos nanoporosos con enrejados metal-orgánicos. Ellos han encontrado múltiples aplicaciones tecnológicas como adsorbentes, tamices moleculares, catalizadores y sensores. Estos materiales, son preparados en forma de polvos mediante el ensamblaje de bloques moleculares a través de átomos o aglomerados de átomos metálicos. Como resultado, se obtiene una gran diversidad de enrejados regulares abiertos con solventes ocluidos en sus poros [1-3]. La necesidad de determinar la estructura de los enrejados metal-orgánicos ha motivado el desarrollo de nuevos métodos de análisis estructural que permitan modelar y describir la estructura del sólido y con ello sus propiedades físicas y su actividad química [4].

La estructura cristalina del compuesto  $\text{Cu}(\text{C}_4\text{H}_4\text{O}_4)$  fue determinada a partir de su patrón de difracción de rayos X en polvos usando simulated annealing y refinada por el método de Rietveld. Este compuesto se obtiene a partir de la deshidratación del  $\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})(\text{C}_4\text{H}_4\text{O}_4)\cdot\text{H}_2\text{O}$ . Al deshidratar la estructura, el átomo de cobre pierde sus moléculas de agua coordinadas, debido a ello, su esfera de coordinación permanece incompleta. Para aumentar su número de coordinación, los átomos de cobre coordinados a cuatro carboxilatos ecuatoriales de cadenas distintas de succinato se desplazan entre sí, permitiendo que los átomos de cobre presenten una coordinación piramidal cuadrada. El cálculo de la función de distribución radial para el succinato de cobre hidratado y anhidro, mostró la transformación ocurrida en la deshidratación, además de revelar distancias interatómicas que están acorde con el modelo estructural obtenido. Estos resultados fueron complementados con técnicas de espectroscopia en el infrarrojo, análisis térmico y picnometría.

Palabras clave: Resolución y Refinamiento Estructural, FDR, Difracción de rayos X

Agradecimientos: Este trabajo fue financiado por el proyecto CONACyT 154626.

### Referencias:

- [1] J. Lu, H.-T. Liu, D.-Q. Wang, M.-J. Niu and S.-N. Wang, J. Chem. Crystallogr., 2011, 41, 641–648.
- [2] K. C. Kam, K. L. M. Young and A. K. Cheetham, Cryst. Growth Des., 2007, 7, 1522-1532. [3] Y. Wang, G.-X. Liu, Y.-C. Chen, K.-B. Wang and S.-G. Meng, Inorg. Chim. Acta, 2010, 363, 2668-2672.
- [4] P. Anthony, C. Delaney, S. Varughese, L. Wang and S. M. Draper, CrystEngComm, 2011, 13, 6706



## **Estimación de la permeabilidad a partir de determinaciones fractales para rocas extraídas de yacimientos petroleros**

García Lemus Luis Andres<sup>1</sup>, Alfonso López Ismeli<sup>2</sup>, Téllez Arias Mercedes Gabriela<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Facultad de Ingeniería Química, Morelia, Michoacán.*

<sup>2</sup>*Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales Unidad Morelia, Morelia, Michoacán.  
e-mail: contacto ialfonso@iim.unam.mx*

En esta investigación se realizó una búsqueda bibliográfica sobre el tema de la porosidad y su relación con la permeabilidad para diferentes tipos de rocas, principalmente las que están presentes en algunos de los yacimientos petroleros más importantes de México. Se profundizó en el concepto de fractalidad y su uso para determinar la porosidad en rocas, así como la de diversos parámetros partiendo de esta función de distribución de poros. A partir de estos estudios se estimó la permeabilidad utilizando análisis microestructural a partir de Microscopía Electrónica de Barrido de diferentes núcleos de rocas, extraídos de varios yacimientos petroleros mexicanos. Utilizando las imágenes obtenidas se determinaron características fractales para la estimación de la permeabilidad. Los resultados obtenidos fueron comparados con estudios realizados en laboratorios externos. La comparación de valores estimados y resultados experimentales coincidió en la mayoría de los casos, presentando permeabilidades menores que 1 md, por lo que son muy bajas. Los valores experimentales de permeabilidad en todos los casos fueron mayores que los estimados, lo cual se debe a que este estudio solo recoge la permeabilidad consecuencia de poros micrométricos.

Palabras clave: porosidad, permeabilidad, fractalidad.

Agradecimientos: se agradece el apoyo del proyecto CONACYT-SENER-hidrocarburos y tecnología aplicada en exploración y producción petrolera s.a. de C.V. (TEMPLE)

### Referencias:

- [1] Bradley, H.: "Petroleum engineering handbook-chapter 26-properties of reservoir rocks", 1987 4th Edition.
- [2] M. Schild, S. Siegesmund, A. Vollbrecht. Characterization of granite matrix porosity and pore-space geometry by in-situ and laboratory methods. Geophysics J. Int. (2001) 146, 111-125.



## Estudio del tamaño de grano del compuesto (Bi<sub>0.7</sub>Pb<sub>0.3</sub>)Sr<sub>2</sub>Ca<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>10</sub> fabricado por sol-gel modificado

F. Flores<sup>1,2</sup>, E. Chavira<sup>1</sup>, A. Tejeda<sup>1</sup>, C. Flores<sup>1</sup>, O. Novelo<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en  
Materiales, México D. F., México

<sup>2</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Ciencias, México D. F.,  
México

e-mail: ffgfcb@gmail.com, chavira@unam.mx

Se observó la formación de los compuestos intermedios y el crecimiento de grano del superconductor (Bi<sub>0.7</sub>Pb<sub>0.3</sub>)Sr<sub>2</sub>Ca<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>10</sub> al variar la temperatura y el tiempo de reacción.

El compuesto se sintetizó por la técnica de sol-gel polimerizando con acrilamida.

Se elaboró una disolución de oxisales en agua para obtener el sol de cada reactivo, todos los soles se mezclaron y se obtuvo el gel. Se modificó la velocidad de gelación de la mezcla obtenida, agregando acrilamida, en 3 segundos.

El gel se secó a medio ambiente obteniéndose un gel deshidratado, al cual se le realizó un análisis termogravimétrico (TGA). A partir del termograma, se colocó el gel deshidratado en una mufla a las temperaturas indicadas y se varió el tiempo de reacción (formación del xerogel). Cada cambio térmico se monitoreó por difracción de rayos-X (DRX). La interrupción de los tratamientos térmicos se dio cuando se obtuvo una monofase.

Se estudió el tamaño de grano del gel deshidratado utilizando microscopia de fuerza atómica (AFM) y de barrido (SEM). Posteriormente se caracterizaron los reactivos de partida por DRX.

Al calentar el xerogel a 560 °C se formaron cinco compuestos: óxido de bismuto cobre, óxido de cobre estroncio, óxido de calcio plomo y óxido de bismuto plomo estroncio calcio cobre, este último tiene estructura tetragonal y corresponde a una fase superconductor. Como la cinética para alcanzar el equilibrio termodinámico es lenta, el compuesto todavía está en reacción a 860 °C. El material se lavó con alcohol etílico para evaporar toda la materia orgánica.

Palabras clave: Superconductor, sol-gel, acrilamida, xerogel, DRX.



## Síntesis, caracterización y comparación de los sistemas BaCaCuLiO, BaCaCuLiEuO y BaCaCuEuO

F. Espinosa<sup>1,2</sup>, E. Chavira<sup>2</sup>, A. Tejeda<sup>2</sup>, O. Novelo<sup>2</sup>, G. González<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Ciencias,  
México D. F., México

<sup>2</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en  
Materiales, México D. F., México

<sup>3</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Química,  
México D. F., México

En nuestro grupo de trabajo, se reportó superconductividad baja en los sistemas BaCaCuLiMO (M=tierra rara) en el intervalo de 10 a 20 K [1]. El objetivo fue sintetizar los sistemas: BaCaCuLiO, BaCaCuEuO y BaCaCuLiEuO, mediante reacción de estado sólido y caracterizarlos por Difracción de Rayos X, DRX, con método de polvos, Microscopía electrónica de Barrido, MEB, y Dispersión electrónica de Rayos X, EDX (siglas en inglés); para comparar los resultados de estructura cristalina y morfología; para en un trabajo posterior determinar si la presencia del ión Litio favorece la superconductividad. Los resultados obtenidos mediante DRX indican que no se obtuvo el compuesto deseado, sin embargo se detectaron algunos compuestos isoestructurales, como el compuesto de BaCuEu<sub>2</sub>O<sub>5</sub>; que presenta un corrimiento en algunas de sus reflexiones en BaCaCuLiEuO y en BaCaCuEuO. Esto indica una modificación en la red cristalina, debida posiblemente a la intercalación del ión Litio y/o sustitución al azar de cationes y aniones dentro de la estructura, lo cual podría ayudar a la superconductividad, por la presencia de estos iones en la estructura cristalina. Se realizarán más estudios para elucidar las sustituciones propuestas. Por EDX observamos que la composición química de las muestras no es homogénea y presenta varias fases, identificadas por DRX. En cuanto a la morfología se aprecian diferencias entre las muestras, ya que en BaCaCuEuO es granular, mientras que en las que contienen ión Litio se observa semifusión en algunas zonas.

Palabras clave: Síntesis por reacción en estado sólido, cupratos, DRX, MEB, EDX.

### Referencias:

[1] C. Aguilar, E. E. Marinero, E. Chavira, L. Bucio, H. Pfeiffer, MAGNETIC, STRUCTURAL AND RESISTIVITY CHARACTERIZATION OF NEW R<sub>3</sub>Gd<sub>3</sub>Ba<sub>2</sub>Ca<sub>2</sub>Cu<sub>7</sub>O<sub>10</sub>:Li COMPOUNDS (R= rare earth). APS March Mtg. 2012. Boston Mass. USA Febrero 27 a 2 marzo, 2012.



## Efecto de la captura de CO<sub>2</sub> en presencia de vapor de agua en Li<sub>5</sub>AlO<sub>4</sub> por la adición de carbonato de sodio y potasio

María Teresa Flores Martínez y Heriberto Pfeiffer Perea

*Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México*  
e-mail: [tr.flores@gmail.com](mailto:tr.flores@gmail.com)

El CO<sub>2</sub> es el principal gas de efecto invernadero en la atmósfera de origen antropogénico, cuyo impacto ambiental de su gran concentración, son el calentamiento global y el cambio climático.

Recientemente se ha desarrollado gran interés por los cerámicos de litio y otros elementos alcalinos debido a su alta capacidad de captura de CO<sub>2</sub> a temperaturas elevadas. Entre ellos, el Li<sub>5</sub>AlO<sub>4</sub> puede ser una de las mejores opciones como material de captura, debido a su capacidad teórica máxima de captura, siendo capaz de capturar CO<sub>2</sub> en un amplio intervalo de temperaturas. Adicionalmente, se ha reportado que la presencia de vapor de agua en el sistema, mejora la capacidad de captura de CO<sub>2</sub> en algunos materiales y, pese a que el Li<sub>5</sub>AlO<sub>4</sub> a temperaturas menores a 100 °C, en una atmósfera seca no es capaz de capturar CO<sub>2</sub>, se ha informado que cuando se encuentra en una atmósfera húmeda, la quimisorción de CO<sub>2</sub> en el material se ve favorecida en el intervalo de temperaturas de 30 °C a 80 °C.

En el presente trabajo fueron sintetizados y caracterizados polimorfos de Li<sub>5</sub>AlO<sub>4</sub>, posteriormente fueron mezclados con Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> o K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>. Se realizaron diferentes experimentos termogravimétricos (dinámicos e isotérmicos) en presencia de vapor de agua, utilizando CO<sub>2</sub> como gas de arrastre, para analizar el efecto del agua en el proceso de quimisorción del CO<sub>2</sub>. En cuyos resultados pudo observarse que en el intervalo de temperaturas de 30 °C a 70 °C se presenta una buena capacidad de captura, aunque ligeramente menor a la del Li<sub>5</sub>AlO<sub>4</sub> puro.

Palabras clave: Captura de CO<sub>2</sub>, análisis térmico, absorción húmeda.

Agradecimientos: Este trabajo fue financiado por PAPIIT y SENER-CONACyT.

### Referencias:

- [1] Rodríguez-Mosqueda, R.; Pfeiffer, H. High CO<sub>2</sub> Capture in Sodium Metasilicate (Na<sub>2</sub>SiO<sub>3</sub>) at Low Temperatures (30–60 °C) through the CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O Chemisorption Process, *J. Phys. Chem. C* **2013**, *117*, 13452–13461.
- [2] - , Pfeiffer, H. High CO<sub>2</sub> Chemisorption in α-Li<sub>5</sub>AlO<sub>4</sub> at Low Temperatures (30–80 °C): Effect of the Water Vapor Addition. *Energy Fuels* **2012**, *26*, 3110–3114.



## Estudio del sistema $M_2Cu_3(TR)AO_x$ $M=Ba, Ca, TR=Gd, Er, A= Li, x= 7, 9$

N. Cervantes<sup>1,2</sup>, E. Chavira<sup>1</sup>, A. Tejada<sup>1</sup>, D. Cabrero<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México

<sup>2</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Química, México D. F., México

e-mail: [nisiaacd@gmail.com](mailto:nisiaacd@gmail.com), [chavira@unam.mx](mailto:chavira@unam.mx), [tejeda@iim.unam.mx](mailto:tejeda@iim.unam.mx),  
[dcabrero@iim.unam.mx](mailto:dcabrero@iim.unam.mx)

Se presentará la continuación del estudio del sistema Ba-Ca-Cu-(Gd, Er)-Li-O<sup>[1]</sup>. El objetivo es obtener la nueva fase que se está formando, en mayor proporción, sin tener pérdida del ion litio. De los datos obtenidos de la mezcla de reactivos en proporciones estequiométricas por análisis termogravimétrico (TGA) realizados en aire, se seleccionaron las temperaturas de reacción. El seguimiento de las reacciones fueron a través de difracción de rayos X (DRX) por el método de polvos, de las composiciones sintetizadas bajo el método por reacción en estado sólido:  $Ba_2Ca_2Cu_3ErLiO_{9-x}$ ,  $Ba_2Ca_2Cu_3LiO_{7.5-x}$ ,  $Ba_2Cu_3GdO_{7-x}$ ,  $(Ba_2Ca_2)Cu_3(Gd_{0.5}Er_{0.5})LiO_{9-x}$ , con el se determinó el tipo de estructura cristalina del material y las fases presentes en cada temperatura en estudio.

Hasta el momento por DRX, se determinó la presencia de:  $BaCO_3$  (PDF 5-0378),  $CuO$  (PDF 48-1548),  $CaO$  (PDF 82-1690);  $BaCu_{1.0623}O_{2.58}(CO_2)_{0.1364}$  (PDF 89-8131);  $ErBa_2Cu_3O_{6.95}$  (PDF 82-0148),  $Er_2BaCuO_5$  (PDF 39-4120),  $GdBa_2Cu_3O_7$  (PDF 41-0173). Observamos en el  $BaCO_3$  con corrimientos en las reflexiones a la izquierda de algunas familias de planos (111) y (021). El  $CaCO_3$  reactivo se transformó a óxido. En el compuesto de  $BaCu_{1.0623}O_{2.58}(CO_2)_{0.1364}$  se observó el corrimiento en las reflexiones a la derecha en la familia de planos (530), (600) y (611). En la fase  $ErBa_2Cu_3O_{6.95}$  se observa un corrimiento a la izquierda en la familia de planos (110) y (103), en el óxido  $Er_2BaCuO_5$  existe desplazamiento a la derecha en la familia de planos (131), (211), (002), (140), finalmente en el compuesto  $GdBa_2Cu_3O_7$  se notó un corrimiento a la izquierda en la familia de planos (003), (110), (111), (200).

Palabras clave: Cupratos, Síntesis estado sólido, TGA, DRX,

### Referencias:

[1] Síntesis del sistema  $M_2Cu_3(TR)AO_x$ ,  $M=Ba,Ca$ ,  $TR=Gd, Er$ ,  $A= Li$ ,  $x= 7, 9$   
Memorias del Primer Simposio de Estudiantes del IIM. 2013



# Titanato de estroncio dopado con iterbio y praseodimio trivalentes para el mejor aprovechamiento fotovoltaico de la energía solar

G. López-Pacheco<sup>1</sup>, R. López Juárez<sup>1</sup>, M. E. Villafuerte-Castrejón<sup>1</sup>, F. González<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito Exterior S/N, A.P. 70-360, México D.F., Mexico*

<sup>2</sup> *Departamento de Ingeniería de Procesos e Hidráulica, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, A.P. 55-534, 09340 México D.F., México.*

*e-mail: exnastral@hotmail.com*

Los lantánidos trivalentes pueden manipular fotones en forma efectiva. Una posible aplicación es la conversión de luz de cierta longitud de onda en otra que resulte de interés. En las celdas solares fotovoltaicas sería posible explotar esta propiedad evitando así, las pérdidas de energía debidas a la discordancia espectral entre la banda prohibida del semiconductor y el espectro solar<sup>1</sup>. Para ello, se requieren materiales que absorban los fotones de la parte más energética de dicho espectro y que los dividan en dos de menor energía, para así alcanzar el óptimo aprovechamiento de la energía solar en este tipo de dispositivos. Para investigar materiales con las características descritas, se prepararon soluciones sólidas de SrTiO<sub>3</sub> (STO) con Pr e Yb trivalentes en diferentes concentraciones mediante el método de Pechini. De los espectros de absorción se determinó un valor de la banda prohibida del STO de aproximadamente 3.3 eV lo cual lo hace un candidato para absorber fotones de la región más energética del espectro solar. Este hecho fue corroborado a partir de los espectros de luminiscencia de las soluciones sólidas sintetizadas. A partir de estos resultados se puede decir que el STO podría, eventualmente, aprovechar un región extendida del espectro solar que redundaría en un aumento de la eficiencia de celdas fotovoltaicas.

Palabras clave: Conversión ascendente, SrTiO<sub>3</sub>, celdas solares.

## Referencias:

[1] Trupke, T., Green, M.A., & Würfel, P., 2002, *J. Appl. Phys.*, **92**, 1668.



## Difusión de agua en el monolito de la diosa Tlaltecuhltli

J. R. Álvarez, J. Balmaseda

*Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito Exterior, Ciudad Universitaria, 04510 México DF, México  
e-mail: leizar\_death@outlook.com*

El 2 de Octubre de 2006 se descubrió el monolito mexicana más grande hasta ahora conocido. La escultura, que representa a una advocación antropomorfa femenina de la deidad bisexual de la tierra Tlaltecuhltli, está ligada a procesos de transformación fisicoquímica que intervienen en su deterioro, siendo el agua uno de los principales factores en la alteración de su configuración material. Por lo tanto, se estudia la difusión de agua en un fragmento del monolito, como precedente en la posterior evaluación del impacto que tienen las actuaciones de prevención y salvaguardia en su exhibición dentro del museo del Templo Mayor. Primero, se determinó que la composición de la muestra seleccionada corresponde mayoritariamente a andesina, además de cristobalita y carbonato de calcio en menor medida. A continuación, se resolvió la segunda ley de Fick para un fragmento en forma de paralelepípedo regular sujeto a las condiciones de contorno experimentales. Se registró la cinética de sorción de vapor de agua para el mínimo, el máximo y el promedio, de humedad relativa y temperatura, a la que fue expuesto durante su exhibición. Con esto, se estimaron los coeficientes de difusión, a partir del ajuste de la curva de sorción a la solución propuesta de la ecuación de difusión, y se determinó su variación en función de la humedad relativa y la temperatura con una ecuación tipo Arrhenius.

Palabras clave: Monolito de Tlaltecuhltli, Difusión, Sorción.

Agradecimientos: Este trabajo fue parcialmente financiado por los proyectos CONACyT 174247, CONACyT 154626 y PAPIIT IN11813.



## **Síntesis y propiedades estructurales del sistema $Ce_{1-x}Sm_xO_{2-\delta}$ depositado por rocío pirolítico ultrasónico, para celdas de combustible de óxidos sólidos.**

*R. Martínez-Bautista, J. de D. Castro-Robles, C. Flores-Morales y J. A. Chávez-Carvayar.*

*Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM. Ciudad Universitaria, 04510, México, D.F.*

*Email: rmb\_82\_40@hotmail.com*

En este trabajo se presenta la síntesis y caracterización estructural de películas delgadas de ceria dopadas con samario,  $Ce_{1-x}Sm_xO_{2-\delta}$ ,  $x = 0, 0.10, 0.15, 0.20, 0.25$  y  $0.30$  mol. La obtención de las películas delgadas se llevó a cabo por la técnica de rocío pirolítico ultrasónico sobre sustratos de vidrio. Para la caracterización estructural y morfológica de los compuestos obtenidos se utilizaron las técnicas de difracción de rayos X (DRX), microscopía electrónica de barrido (MEB) y microscopía de fuerza atómica (MFA). Resultados obtenidos por DRX indicaron la presencia de fases únicas con estructura de la fluorita, con celdas unitarias en el intervalo de 5.39 a 5.46 nm. Con las micrografías obtenidas por MEB se observó una superficie homogénea de las películas delgadas de con tamaños de partícula de 62 hasta 100 nm. Con esta técnica, mediante cortes transversales de las muestras, se midieron los grosores de las películas que van de 100 a 1200 nm. A partir de MFA se obtuvo una rugosidad superficial en el intervalo de 8 a 100 nm.

Palabras claves: SOFC, películas delgadas, rocío pirolítico ultrasónico.

Agradecimientos: Este trabajo fue financiado por DGAPA, a través del proyecto PAPIIT IN 119010.

### Referencias:

- [1] Pramod S. Patil, Review: Versatility of chemical spray pyrolysis technique, *Materials Chemistry and Physics* 59 (1999) 185-198.
- [2] R. Mark Ormerod, Solid oxide fuel cells, *Chem. Soc. Rev.*, 2003, **32**, 17–28.
- [3] Dainius Perednis & Ludwig J. Gauckler, Thin film deposition using spray pyrolysis, *Journal of Electroceramics*, 14, 103–111, 2005.



## Caracterización cristalográfica de nuevas soluciones sólidas de $\text{KNbO}_3$ co-dopado con $\text{Fe}^{3+}$ , $\text{Cr}^{3+}$ , $\text{Mn}^{3+}$ , $\text{La}^{3+}$ y $\text{Eu}^{3+}$

Jesús A. Peña, Ma. Elena Villafuerte Castrejón  
Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones  
en Materiales, México D. F., México  
e-mail: [jesusalejandropea@gmail.com](mailto:jesusalejandropea@gmail.com)

La búsqueda de nuevos compuestos piezoeléctricos, como el niobato de potasio, es de gran interés actualmente <sup>(I-IV)</sup>. El efecto de dopar el  $\text{KNbO}_3$  con tierras raras y metales de transición provocan alteraciones estructurales y químicas, esas alteraciones hacen que este material modifique sus propiedades ópticas, magnéticas y eléctricas.

En el presente trabajo el compuesto  $\text{KNbO}_3$  es co-dopado con  $\text{Fe}^{3+}$ ,  $\text{Mn}^{3+}$ ,  $\text{Cr}^{3+}$  en el sitio B de la estructura perovskita, mientras es co-dopado con  $\text{La}^{3+}$  y  $\text{Eu}^{3+}$  en el sitio A, el compuesto es sintetizado por un nuevo proceso de síntesis llamado “método de horneado” (número de patente MX/a/2011/012552), este método ha sido provado con buenos resultados para la síntesis de  $\text{KNbO}_3$ ,  $\text{KTaO}_3$ ,  $\text{NaNbO}_3$  y  $\text{NaTaO}_3$ . Usando como reactivos óxidos metálicos e hidróxidos ( $\text{KOH}$  o  $\text{NaOH}$ ), lo que lo hace un método sencillo y barato.

Las soluciones sólidas sintetizadas son caracterizadas por Difracción de Rayos X, Microscopía Electrónica de Barrido al igual que la determinación de sus densidades por el método de Arquímedes. Las variaciones en los parámetros de red son medidas por Refinamiento Rietveld.

### Referencias

- [1] René T. Wegh, Andries Meijerink, Ralf-Johan Lamminmäki, Jorma Hölsa, *Journal of Luminescence*, **2000**, pp. 1002 – 1004.
- [2] Te-Hua Fang, Yu-Jen Hsiao, Yee-Shin Chang, Yen-Hwei Chang, *Materials Chemistry and Physics*, vol. 100, **2006**, pp. 418 – 422.
- [3] Reenamoni Saikia Chaliha, K. Annpurna, Anal Tarafder, V. S. Tiwari, P. K. Gupta, Basudeb Karmakar, *Optical Materials*, vol. 32, **2010**, pp. 1202 – 1209.
- [4] Cheng-Hung Wen, Sheng-Yuan Chu, Yan-Yu Shin, Ching-Ting Lee, Yung-Der Juang, *Journal of Alloys and Compounds*, vol. 459, **2008**, pp. 107 – 112.
- [5] Jesús Alejandro Peña Jiménez. Thesis. Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, México D.F, 2010.



## **Investigación de sistemas multiferróicos nanoestructurados consolidados por SPS para conversión, generación y almacenamiento de energías alternativas**

U. Acevedo<sup>1</sup>, R. López<sup>1,2</sup>, S. Ammar<sup>3</sup> y R. Valenzuela<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México*

<sup>2</sup>*Universidad de la Habana, Instituto de Cibernética Matemática y Física, La Habana, Cuba*

<sup>3</sup>*Université Paris7 Diderot, ITODYS, UMR-CNRS 7086, Paris, France*  
*e-mail de contacto: ulises.acevedo@comunidad.unam.com.mx*

En los materiales multiferróicos coexisten ordenamientos ferróicos como el ferromagnetismo y la ferroelectricidad, su investigación ha cobrado gran importancia en los últimos años gracias a la viabilidad que presentan para intercambiar energía magnética y eléctrica, así como para convertir esfuerzos mecánicos y gradientes de temperatura a señales binarias [1]. Su aplicación se enfoca principalmente al procesamiento de información digital, sin embargo, cada día surgen nuevas ideas que extienden el campo de aplicación para éstos materiales; la generación y almacenamiento de energías renovables es buen ejemplo de ello. Hay estudios que proponen unidades de generación y almacenamiento de energía basados en efectos magneto-electrostrictivos a nivel nano por acoplamiento de fases de distinta naturaleza [2-4]. En ésta charla se plantea un proyecto de investigación para estudiar el acoplamiento de fases multiferróicas en sistemas nanoestructurados consolidados por *Spark Plasma Sintering* (SPS) partiendo de precursores de química suave (poliol). En resultados previos se encontró que la técnica SPS permite conservar arreglos nanoestructurados en sistemas masivos si se parte de partículas nanométricas [5,6] y el método de poliol permite sintetizar nanopartículas (NPs) con un control óptimo en sus propiedades [7]. Mediante espectroscopía de impedancias bajo la acción de campo magnético y diferentes microscopías, se encontraron evidencias de un buen acoplamiento entre fases de NP's ferrimagnéticas y ferroeléctricas, mezcladas y consolidadas por SPS [8]. Se plantea investigar el acoplamiento magnetoeléctrico en multicapas de NPs ferrimagnéticas y ferroeléctricas consolidadas por SPS, para su aplicación en sistemas de generación, transducción y almacenamiento de energía proveniente de fuentes renovables.

Palabras clave: Multiferróicos, SPS, nanoestructuras, energías renovables.

Agradecimientos: Este trabajo fue financiado por los proyectos ANR (Francia) – CONACyT (México) #139292 y PAPIIT-IN #141012. RL agradece al C.L.A.F.



## Memorias 2do. Simposio de Estudiantes Asociados al IIM

(Centro Latinoamericano de Física) por la beca otorgada. Agradecimientos a las contribuciones de Carlos Flores y Josefina Arellano en las microscopías FIB y TEM.

### Referencias:

- [1] G.A. Smolenskii y I.E. Chupis. *Sov. Phys. Usp.* (1982) 25, 475.
- [2] Kasra Momeni. *Nano Energy* (2014) 4, 132–139.
- [3] W. Tang et al. *Nano Energy* (2013) 2, 1164–1171.
- [4] Myeong-Lok S et al. *Nano Energy* (2013) 2, 1142–1148.
- [5] G. Vázquez, J. Rivas, R. Valenzuela, et al, *J. Appl. Phys.* (2014) 115, 17E117.
- [6] U. Acevedo, R. Valenzuela, R. Ortega, et al. *J. Appl. Phys.* (2013) 113, 17B1519.
- [7] Z. Beji et al. *Phys. Stat. Solidi A* (2006) 203, 504-512.
- [8] R. López, U. Acevedo, R. Valenzuela, S. Ammar, et al, *IEEE Trans. Magn.* (2014) DOI: 10.1109/TMAG.2014.2323942, en imprenta.



## Síntesis, caracterización estructural, magnética y resonancia de espín de la ferrita de litio

S. Pérez<sup>1</sup>, R. Valenzuela<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Universidad de Guanajuato, División de Ciencias Naturales y Exactas, Guanajuato, Gto., México

<sup>2</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México email: monjaras@unam.mx

Las excelentes propiedades magnéticas y eléctricas de las nanoferritas las hacen adecuadas para aplicaciones a altas frecuencias. En particular, la ferrita de Litio,  $\text{Li}_{0.5}\text{Fe}_{2.5}\text{O}_4$ , es un material ferrimagnético que debido a su elevada temperatura de Curie, ciclo de histéresis rectangular y gran resistividad eléctrica, ha sido objeto de interés en los últimos años. En éste trabajo se describe la síntesis de la ferrita de Litio usando el método de hidrólisis en poliol. Se caracterizaron sus propiedades estructurales y magnéticas. Mediante el patrón de difracción de rayos X se confirmó una fase espinela y se obtuvo el tamaño de partícula usando la ecuación de Scherrer. Usando Microscopía de Transmisión fue posible verificar el tamaño de grano. La magnetización en la muestra como función del campo magnético aplicado fue medida usando un magnetómetro de muestra vibrante (VSM), determinando los parámetros tales como la magnetización de saturación ( $M_s$ ) y la coercitividad ( $H_c$ ). Del experimento de resonancia de espín electrónico (ESR) se determinaron el campo de resonancia y ancho de línea.

Palabras clave: ferrita de litio, hidrólisis en medio poliol, propiedades magnéticas.

Agradecimientos: Éste trabajo fue desarrollo gracias al apoyo del IIM y la Universidad de Guanajuato.

### Bibliografía:

- [1] R. Valenzuela *Magnetic Ceramics*; Cambridge University Press: Cambridge, 2005.
- [2] L. Harivardhan Reddy, J.L. Arias, J. Nicolas, P. Couvreur, "Design and Characterization, Toxicity and Biocompatibility, Pharmaceutical and Biomedical Applications," *Chem. Rev.* **2012**, 112, 5818.
- [3] H.M. Joshi, "Multifunctional metal ferrite nanoparticles for MR imaging applications," *J. Nanopart. Res.* **2013**, 15, 1235
- [4] D. Sellmyer and R. Skomski *Advanced Magnetic Nanostructures*; Springer-Verlag: New York, 2006.



## Síntesis, caracterización y propiedades magnéticas de ferrita de níquel (NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>)

I.López-Bonilla<sup>1</sup>, R. Valenzuela<sup>1</sup>, G. Vázquez-Victorio

<sup>1</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México  
e-mail: contacto iqirais@yahoo.com

El cambio de dimensiones de un material bulk a nanopartículas corresponde a un cambio de propiedades. Por ello las nanopartículas magnéticas (MNPs) tienen una importancia fundamental, así como un gran interés, que van desde campos diversos como las aplicaciones en medicina a los recubrimientos de alta densidad de grabación magnéticos, y tratamientos de suelo. La creciente demanda de los nanomateriales ha impulsado una investigación considerable en su preparación. En este contexto, un gran número de nuevas rutas sintéticas se han descrito. Dentro de estas nuevas técnicas se encuentra hidrólisis forzada, poliol. En el presente trabajo se sintetizaron por dicho método nanopartículas de ferrita de níquel (NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>) partiendo de los correspondientes acetatos. Dichas nanopartículas se analizaron con difracción de rayos X (DRX), obteniendo una espina particular de este compuesto, recordando que la ferrita de níquel tiene una estructura de espina inversa. Con estos resultados se pudo calcular con la ecuación de Scherrer-Warren que tienen un tamaño aproximado de 18 nm. Este tamaño se confirmó con Microscopía electrónica de transmisión (TEM). Para determinar las propiedades magnéticas se realizó un ciclo de histéresis con la técnica Magnetometría de Muestra Vibrante (VSM), con este ciclo pudimos determinar que dichas nanopartículas son ferrimagnéticas a temperatura ambiente y temperatura de nitrógeno líquido. También se realizó un análisis de resonancia de spin. Esta técnica nos arrojó como resultado que no se presenta ningún cambio en el comportamiento magnético en un rango de temperatura de 105 K a 473 K.

Palabras clave: Nanopartículas, magnéticas, ferrita, níquel

### Referencias:

- [1] Valenzuela, R.; Magnetic Ceramics; Cambridge University Press; Great Britain: 2005
- [2] Reza Abbaschian, Lara Abbaschian, Robert E. Reed-Hill; Physical Metallurgy Principles, Fourth Edition
- [3] Renee Berger; Temperature dependence of super paramagnetic resonance of Iron oxide nanoparticles, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 234 (2001) 535–544



## Síntesis, caracterización y propiedades magnéticas de nanopartículas núcleo-envolvente (core-shell)

N. J. Flores, G. Vázquez-Victorio, R. Valenzuela

*Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en  
Materiales, México D. F., México  
e-mail: flornatur@gmail.com*

En años recientes se ha encontrado un término para la anisotropía en nanoestructuras, que consisten de un núcleo ferri- o ferromagnético embebido en un antiferromagnético, llamado intercambio de acoplamiento (exchange bias<sup>1</sup>). El intercambio de acoplamiento es uno de los fenómenos asociados con el intercambio anisotrópico creado en la interfase de los materiales FM-AFM<sup>2</sup> y tiene aplicaciones potenciales en el ámbito tecnológico; grabación magnética de ultra alta densidad, magneto-resistencia gigante (GMR) y dispositivos de válvulas de espín.<sup>3</sup> El objetivo principal de este trabajo es sintetizar nanopartículas tipo núcleo-envolvente, comúnmente llamadas core-shell, que presenten el fenómeno de intercambio de acoplamiento y asociarlo a los resultados que se obtendrán por espectroscopia de resonancia del espín del electrón (ESR). La síntesis será por hidrólisis forzada en poliol partiendo de los acetatos de los metales involucrados. El núcleo estará formado por  $\text{CoFe}_2\text{O}_4$ , material ferrimagnético (FM) y el envolvente de  $\text{CoO}$ , material antiferromagnético (AFM). Cuando la interfase de los dos materiales FM-AFM se lleven a una temperatura por arriba de la temperatura de Néel ( $T_N$ ) del AFM, pero con una temperatura de Curie ( $T_c$ ) del FM menor que la temperatura del sistema, aplicando un campo magnético, ocurrirá el intercambio de acoplamiento. La caracterización de las nanopartículas núcleo-envolvente será estructural y magnética; la estructural, a través de difracción de rayos X (XRD) y microscopía electrónica de transmisión (TEM) y la magnética, por magnetometría de muestra vibrante (VSM) y espectroscopia de resonancia del espín del electrón (ESR).

Palabras clave: exchange bias, core-shell, intercambio de acoplamiento.

Agradecimientos: Este trabajo fue financiado por CONACyT.

### Referencias:

- [1] M. Artus, S. Ammar, L. Sicard, J. Piquemal, F. Herbst, M. Vaulay, F. Fiévet y V. Richard. Chem. Mater. (2008), 20, 4861-4872.
- [2] J. Nogués, K. Schuller. J. Magn. Magn. Mater 192, 203 (1999).
- [3] Y. Jiang, T. Nozaki, S. Abe, T. Ochiai, A. Hirohata, N. Tezuka, K. Inomata Nat. Mater., 3 (2004), pp. 361-364



Memorias 2do. Simposio de Estudiantes Asociados al IIM

# Síntesis y Caracterización de Materiales Nanoestructurados de Ferrita

Y. Flores<sup>1</sup>, R. Ortega-Zempoalteca<sup>1</sup>, G. Vázquez-Victorio<sup>1</sup>, T. Gaudisson<sup>2</sup>, S. Ammar<sup>2</sup>, R. Valenzuela<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México*

<sup>2</sup>*Université Paris Diderot- Paris 7, Paris, Francia*  
ammarm@univ-paris-diderot.fr

En este proyecto se presenta un estudio de las ferritas con fórmula ( $Zn_xNi_{1-x}Fe_2O_4$ ) con  $x=0.7$  y su consolidado (SPS) mostrando la correlación entre el fenómeno de resonancia y las 3 fases magnéticas básicas de los materiales nanoestructurados (ferrromagnético, superparamagnético, paramagnéticos) fundamentales para aplicaciones en radiofrecuencia y dispositivos electrónicos.

El estudio por magnetometría de muestra vibrante (VSM) permitió la obtención de los ciclos de histéresis a temperatura ambiente y de nitrógeno para determinar el comportamiento magnético entre ambas muestras [1]. El comportamiento de las estructuras magnéticas se estudió en resonancia ferromagnética (FMR) mediante la dependencia de los parámetros de resonancia y la relación entre la altura de los picos ( $A_1/A_2$ ) con la temperatura. Los resultados mostraron un cambio en los parámetros de resonancia (campo de resonancia  $H_{res}$  y ancho de línea ( $\Delta H_{pp}$ ) tanto en las nanopartículas como en los consolidados en sus diferentes fases magnéticas conforme aumentó la temperatura [2].

Palabras clave: magnetización, resonancia ferromagnética.

Agradecimientos: Este trabajo fue financiado por CONACyT, PAPIIT.

## Referencias:

- [1] R. Valenzuela. Magnetic Ceramics. Cambridge. University Press. 155-158 (1995).
- [2] R. Ortega-Zempoalteca, Y. Flores-Arias, G. Vázquez – Victorio, T. Gaudisson, S. Ammar, Z. Vargas –Osorio, U. Acevedo-Salas and R. Valenzuela. Phys. Stat. Solidi A. 1-5 (2014)



## **Preparación y caracterización de películas luminiscentes de $ZrO_2$ activadas ópticamente con Dy.**

*A. Báez-Rodríguez, M. García-Hipólito y O. Álvarez-Fregoso. Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, D. F., México  
email: [adibr@hotmail.com](mailto:adibr@hotmail.com)*

En esta investigación se han sintetizado películas luminiscentes de óxido de circonio ( $ZrO_2$ ) activadas con disprosio (Dy) depositadas por la técnica de Rocío Piroclítico Ultrasónico y usando como precursores los cloruros correspondientes. Los depósitos se realizaron variando dos parámetros importantes: la temperatura de sustrato y el porcentaje de la impureza (Dy) con el fin de determinar sus valores óptimos. Las películas fueron caracterizadas para conocer su estructura cristalina, su morfología superficial y la propiedad de interés: la luminiscencia. La estructura cristalina presentada por este material depende de la temperatura de sustrato y para las mayores temperaturas empleadas es la tetragonal meta-estable. La morfología superficial de estas películas resulta muy rugosa y formada por partículas esféricas de aproximadamente una micra de diámetro. En cuanto a la luminiscencia se observó que las películas presentan emisiones características del ión disprosio con bandas centradas en 485 nm, 585 nm y 670 nm. Estas bandas contribuyen con emisiones en el visible cuya combinación produce una emisión blanca amarillenta, que hace candidato a este material para ser utilizado en la fabricación de lámparas para iluminación, entre otras posibles aplicaciones.

Palabras clave: Películas; Rocío Piroclítico; Luminiscencia.



# Visualización de soluciones coloidales de micro y nanopartículas mediante la técnica de Shadowgraph.

M.Y.Salazar<sup>1</sup>, J. A. Hernández<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México  
email:yayafisica@gmail.com

Las técnicas Schlieren y Shadowgraph permiten visualizar cambios del índice de refracción en un medio, los cuales producen una imagen formada por patrones de zonas brillantes y oscuras (sombras). Para implementar la técnica se utiliza un haz de láser expandido, el cuál incide sobre la muestra, frente a la cual se coloca una pantalla, donde se observa la imagen.

En éste trabajo se visualizan diferentes soluciones coloidales formadas con nanopartículas para estudiar la interacción de luz con ellas. Para ello, se sumerge una fibra óptica en el coloide. La fibra se conecta a un láser, en este caso se utilizó un láser infrarrojo, la luz que sale de la fibra incide en la muestra y las partículas la esparcen o absorben dependiendo el material con que están hechas. Si las partículas absorben la longitud de onda que incide sobre ellas, entonces hay efectos térmicos los cuales producen tanto cambios en el índice de refracción y otros efectos térmicos como convección. Tales efectos pueden observarse ya sea con la técnica de Shadowgraph como con un microscópio.

Palabras clave: Shadowgraph, índice, refracción, sombras, coloides.

Agradecimientos: Este trabajo fue financiado por CONACyT.

Referencias:

- [1] Jan Mewis and Normaan J. Wagner. "Colloidal Suspension Rheology." Cambridge University press 2012.
- [2] R. El-Ganainy, D. N. Christodoulides, C. Rotschild, and M. Segev. "Soliton dynamics and self-induced transparency in nonlinear nanosuspensions". 6 August 2007 / Vol. 15, No. 16 / OPTICS EXPRESS 10211.
- [3] Roland A. Terborg, Juan P. Torres and Karen Volke-Sepulveda. "Steering and guiding light with light in a nanosuspension". November 2013 Optics letters.



## Integración de azopolímeros en fibras ópticas especiales

P. P. Ramón Carrillo<sup>1</sup>, A. M. Velázquez Benítez<sup>1</sup>, Dr. J. Hernández Cordero<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México  
e-mail: pao12c@hotmail.com*

Hoy en día las fibras ópticas son de gran importancia en los sistemas de comunicaciones y sensado, por lo que el control de las señales ópticas es de gran importancia. Esto se puede realizar mediante la modificación estructural de ciertos materiales, como lo son los cristales líquidos, materiales electro-ópticos, azopolímeros, etc. Los azopolímeros son compuestos que incluyen en su estructura cromóforos que en presencia de ciertas señales ópticas con polarización lineal reaccionan debido al mecanismo de fotoisomerización, modificando su estructura y por consecuencia sus propiedades ópticas. La respuesta fotoinducida en los azopolímeros genera efectos de birrefringencia y dicroísmo. Al incorporar azopolímeros en fibras ópticas se puede realizar en distintas partes de estas: en el revestimiento o en el núcleo. En el primer caso se requiere adelgazar la fibra o remover el viejo revestimiento para que el nuevo sea el material de interés, aumentando la interacción de la onda evanescente con el medio externo. Al depositar recubrimientos sobre secciones adelgazadas de fibra óptica estos deben ser realizados de manera uniforme y con espesores adecuados según sea su uso. En el caso de poner estos materiales en el núcleo, existen fibras especiales que poseen una estructura hueca, la cual puede ser utilizada para rellenar con los compuestos fotoactivos y longitudes largas de interacción y poder obtener una respuesta de mayor magnitud. En este trabajo se demuestran la obtención de azopolímeros, mecanismos de incorporación en distintas fibras ópticas, su caracterización y respuesta obtenida, así como su posible aplicación en sistemas de fibra óptica.

Palabras clave: Azopolimeros, cromóforos, fotoisomerización, polarización, birrefringencia.



## **Películas delgadas de compuestos cerámicos luminiscentes a base de tierras raras y metales de transición**

R. M. Calderón Olvera<sup>1</sup>, O. Álvarez-Fragoso<sup>1</sup>, M. García-Hipólito<sup>1</sup>

*<sup>1</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones  
en Materiales, México D. F., México*

Se realizará la síntesis de películas luminiscentes de materiales cerámicos activadas ópticamente por tierras raras y/o metales de transición. Estas películas se depositarán por la técnica de rocío pirolítico ultrasónico. La caracterización de las películas se llevará a cabo mediante la difracción de rayos X (XRD) para conocer la estructura cristalina del material. Por medio de la microscopía electrónica de barrido (SEM), se determinará la morfología superficial. La composición elemental se llevará a cabo por la dispersión de energía (EDS). Una vez activada las muestras con las tierras raras y/o metales de transición se analizará la presencia de la luminiscencia, mediante las propiedades de fotoluminiscencia y catodoluminiscencia.

Palabras clave: Películas, Fotoluminiscencia, Catodoluminiscencia.

### Referencias:

- [1] M. García-Hipólito, A. Corona-Ocampo, O. Álvarez-Fragoso, E. Martínez, J. Guzmán-Mendoza, and C. Falcony, Characterization of ZnAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>: Tb luminescent films deposited by ultrasonic spray pyrolysis technique, UNAM, 2003.
- [2] M.-Y. Ho, H. Gong, G.D. Wilk, B. W. Busch, M. L. Green, P.M. Voyles, D.A. Muller, M. Bude, W.H. Lin, A. See, M. E. Loomans, S. K. Lahiri, Journal of Applied Physics, Vol. 93, (2003) 1477.
- [3] A. Ortiz, C. Falcony, J. Hernández, M. García-Hipólito, J.C. Alonso, Thin Solid Films. 293 (1997) 103.



## **Análisis de fases en la síntesis de una familia de 1,4-bencenodicarboxilatos de cobalto (II)**

Elí Sánchez González<sup>1</sup>, Jorge Balmaseda Era<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México  
*e-mail: [sanchez.gonzalez.eli@gmail.com](mailto:sanchez.gonzalez.eli@gmail.com)*

El equilibrio químico en la síntesis de polímeros de coordinación ha sido un tema poco abordado por la comunidad científica. Sin embargo, profundizar en este aspecto permite orientar la síntesis hacia una composición óptima de productos. En la síntesis de la familia de los 1,4-bencenodicarboxilatos de cobalto (TACo's) nos encontramos con tres fases cuya proporción se requiere modificar. En este trabajo se propone una metodología para obtener las tres fases por separado haciendo uso de un modelo termodinámico que nos permite estimar las constantes de equilibrio de los sistemas objeto de estudio. A partir de los patrones de difracción en polvos, se identificaron las fases conocidas de los productos de reacción y su composición de fases. El análisis de fases permitió determinar la constante de formación de los compuestos. Los espectros en el infrarrojo presentan las bandas correspondientes a las vibraciones de tensión simétrica y asimétrica del carboxilato metálico corroborando la formación del polímero de coordinación. Los termogramas de los TACo's muestran tres eventos: el de desolvatación, la descomposición del ligante y la oxidación de cierta cantidad de hidróxidos de cobalto.

Este análisis, permitió obtener información complementaria de la composición de fases del producto. El aporte realizado al conocimiento del equilibrio de estas reacciones permite controlar la composición de los productos en las reacciones objeto de estudio.



## Síntesis y caracterización de nuevos polímeros y copolímeros fluorados con múltiples anillos aromáticos

Lilian I. Olvera<sup>1</sup>, María T. Guzmán-Gutiérrez<sup>2</sup>, Mikhail G. Zolotukhin<sup>1</sup>, Damaris Cabrero Palomino<sup>1</sup>,

<sup>1</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México

<sup>2</sup>Department of Chemical Engineering, Norwegian University of Science and Technology (NTNU), NO-7491 Trondheim, Norway  
e-mail: lilianog@iim.unam.mx

Se sintetizó una serie de nuevos polímeros y copolímeros lineales de alto peso molecular mediante una reacción de polihidroalquilación en un solo paso, catalizada por súper ácidos en ausencia de metales y con anillos aromáticos desactivados los cuales son: bifenilo, *p*-terfenilo y *p*-cuaterfenilo. Las reacciones de policondensación se llevaron a cabo a temperatura ambiente en presencia de un súper ácido de Bronsted (trifluorometanosulfónico) y en mezcla con diclorometano.

Los copolímeros obtenidos son totalmente solubles en la mayoría de los disolventes orgánicos comunes, se pueden obtener películas transparentes y flexibles por medio de sus disoluciones. Estudios de RMN de H<sup>1</sup> y C<sup>13</sup> revelan la estructura lineal y la sustitución *para* en el fragmento aromático de la cadena principal. Los polímeros sintetizados cuentan con alta estabilidad térmica. Micrográficas SEM muestran polímeros porosos que pueden ser utilizados como adsorbentes de gases. Se obtuvieron las isothermas de adsorción-desorción de CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub> y N<sub>2</sub>, mostrando un comportamiento reversible.

Palabras clave: polihidroalquilación, fluoropolímeros, adsorción.

Agradecimientos: Este trabajo fue financiado por CONACyT, PAPIIT IN 104211.

### Referencias:

[1] Olvera L. I.; Guzmán-Gutiérrez M.T.; Zolotukhin, M.G.; Serguei F.; Cardenas, J; Ruiz Treviño, F.A.; Villers D.; *Macromolecules* **2013**, 46, 7245–7256



## Síntesis de polímeros funcionalizados mediante catálisis superácida

O. Hernández<sup>1</sup>, M.G. Zolotukhin<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México  
e-mail: hecrol9@gmail.com*

Los compuestos  $\alpha$ -dicetonas han sido exhaustivamente estudiados por su reactividad con varios nucleófilos como aminas, alcoholes, tioles y carbaniones. La reactividad de  $\alpha$ -dicetonas es debido a la presencia de dos grupos carbonilo, la reactividad de un grupo carbonilo es incrementado por la presencia del segundo.

En éste trabajo, se presentan una serie de nuevos y novedosos polímeros funcionalizados que fueron sintetizados en un solo paso;  $\alpha$ -dicetonas (2,3-butanodiona, 2,3-hexanodiona y 3,4-hexanodiona) y compuestos análogos (ácido bromopirúvico, 2,3-butanodiona monoxima y metil-3,3,3-trifluoropiruvato) con compuestos aromáticos no activados utilizando como catalizador superácidos de Brönsted.

Las reacciones fueron llevadas a cabo a temperatura ambiente en una mezcla de ácido trifluorometanosulfónico ( $\text{CF}_3\text{SO}_3\text{H}$ ) con cloruro de metileno ( $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ), ácido trifluoroacético ( $\text{CF}_3\text{COOH}$ ) o ambos. De la reacción de 2,3-butanodiona con *p*-terfenilo y N-etilcarbazol fueron obtenidos fibras poliméricas con un buen valor de viscosidad 0.4 dL/g y 0.59 dL/g, respectivamente. La polimerización de 2,3-hexanodiona y 3,4-hexanodiona con dos compuestos aromáticos dió como resultado, oligómeros en ambos casos. La reacción de ácido bromopirúvico y 2,3-butanodiona monoxima con *p*-terfenilo dio como resultado un polímero con un buen valor de viscosidad, pero la reacción con N-etilcarbazol conduce solo a la formación de oligómeros. Por otro lado, la polimerización de metil-3,3,3-trifluoropiruvato con *p*-terfenilo y N-etilcarbazol resulto en oligómeros blancos y fibras, respectivamente.

Todos los polímeros mencionados fueron completamente caracterizados. Los estudios de resonancia magnética nuclear  $^1\text{H}$  y  $^{13}\text{C}$  mostraron que los grupos funcionales de los monómeros permanecen en la cadena principal sin ninguna modificación después de la polimerización.

Palabras clave: polímeros funcionales,  $\alpha$ -dicetonas, superácidos.



## Síntesis y caracterización de nuevos poliarilenoindoles funcionales

A. R. Cruz<sup>1</sup>, M. G. Zolotukhin<sup>1</sup>, S. L. Morales<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México  
e-mail: [cruzastral@yahoo.com.mx](mailto:cruzastral@yahoo.com.mx)

La meta de este trabajo es el estudio de la polihidroalquilación de isatina con bifenilo y terfenilo catalizada por superácidos en condiciones no estequiométricas para obtener polímeros de alto y ultra alto peso molecular.

Se hicieron varias reacciones entre isatina y compuestos aromáticos no activados en medio superácido para encontrar las mejores condiciones de reacción. Se encontró la concentración, el disolvente y la relación catalizador/ monómero ideales.

Establecidos los parámetros de reacción, se procedió a realizar los estudios macrocinéticos, es decir, se midió el crecimiento de cadenas en función del tiempo, se obtuvieron los pesos moleculares y la polidispersidad, en condiciones estequiométricas y no estequiométricas.

Se encontró que los poliarilenoindoles siguen un mecanismo de “policondensación selectiva” y mantienen bajas polidispersidades a lo largo de todo el tiempo de reacción. Los polímeros sintetizados bajo condiciones no estequiométricas rindieron polímeros de alto y ultra alto peso molecular, se determinó el peso mediante GPC y viscosidad inherente ( $\eta_{inh} > 1 \text{ dL/g}$ ) en viscosímetro de Ubbelohde. Los materiales también tuvieron buenas propiedades mecánicas.

Estos polímeros tienen posibles aplicaciones en membranas de separación de gases, en la industria electrónica, en la industria aeroespacial y como películas para capturar metales pesados.

Palabras clave: Polímeros, estequiometría, superácidos.

Agradecimientos: Este trabajo fue financiado por CONACyT

### Referencias:

[1] A. R. Cruz, M. C. G. Hernández, M. T. Guzmán-Gutiérrez, M. G. Zolotukhin, S. Fomine, S. L. Morales, H. Kricheldorf, E. S. Wilks, J. Cárdenas, M. Salmón. *Macromolecules*, (2012), 45, 6774-6780.

[2] G. Odian., *Principles of Polymerization*, fourth ed., John Wiley & Sons, New York, 2004.

[3] M.T. Guzmán-Gutiérrez, D. Nieto, S. Fomine, S.L. Morales, M.G. Zolotukhin, M.C.G. Hernández, H. Kricheldorf, E. S. Wilks., *Macromolecules*, (2011), 44, 194-202.



## Síntesis y caracterización de 4,4'-diamino-4''-trifluorometiltrifenilmetano.

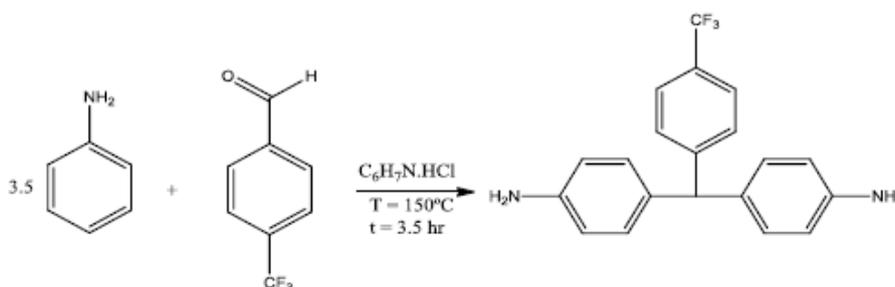
M. Rojas-Rodríguez<sup>1</sup>, C. Aguilar-Lugo<sup>2</sup> y L. Alexandrova<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Química, México D. F., México

<sup>2</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México  
e-mail:deutsch\_hein@hotmail.com

En los últimos 20 años, las PI's se han considerado uno de los mejores para membranas de separación de gases debido a su razonable permeabilidad de CO<sub>2</sub> y su alta selectividad hacia el CH<sub>4</sub>, además de otros gases, líquidos y vapores como propiedades térmicas, mecánicas y resistencia a casi todos los agentes químicos. Sin embargo, la síntesis y en especial el procesamiento de esos polímeros presentan grandes dificultades debido a la limitada solubilidad y alto punto de fusión. Se han realizado numerosos esfuerzos para aumentar la solubilidad a través de la síntesis de nuevos monómeros diamina o dianhídrido. La estrategia consiste en la incorporación de sustituyentes voluminosos, flexibles cadenas alifáticas laterales, y la variación de la estructura química de los dianhídridos de la poliimida para la formación de diversas membranas.

4-4'-Diaminotrifenilmetano (DA-TPM) y sus derivados, constituyen una familia interesante de monómeros para la síntesis de varios polímeros rígidos como poliamidas (PA's) y PI's. La síntesis de DA-TPM desarrollada por nuestro grupo de investigación es simple y altamente eficiente usando reactivos económicos y comercialmente disponibles como son la anilina y benzaldehído. En este trabajo se planea usar la ruta sintética disponible para la obtención de una DA-TPM con un grupo voluminoso trifluorometano (4,4'-Diamino-4''-trifluorometiltrifenilmetano (DA-TPMCF<sub>3</sub>)) (Esquema 1), con el fin de en un futuro usar esta diamina para la síntesis de nuevos materiales poliméricos.



Esquema 1. Síntesis de la DA-TPM-CF<sub>3</sub>.



## Memorias 2do. Simposio de Estudiantes Asociados al IIM

### Resultados

Se ha realizado la síntesis de la DA-TPM's como son: DA-TPM y la DA-TPM-CF<sub>3</sub> obteniendo rendimientos del 80%-90% realizando análisis por RMN-H<sup>1</sup>, después de esto se realizó la preparación de sal de estas diaminas que de igual manera se le realizaron análisis por RMN-H<sup>1</sup>, para proceder después a la policondensación por un paso y obtener las membranas correspondientes a lo cual se le realizaron análisis por IR-FT tanto a reactivos como productos (dianhídrido y polímero) antes de la realización de las membranas.

Además de estas pruebas se intentan realizar análisis de TGA (análisis termogravimétrico)

Palabras clave: trifenilmetano, poliimidas, separación de gases.

Agradecimientos: Este trabajo fue logrado gracias al apoyo del Instituto de Investigación en Materiales.

### Referencias:

[1] Sazanov, Yu. N, *Applied Significance of Polyimides Russian Journal of Applied Chemistry*, Vol. 74, No. 8, 2001, pp. 1253-1259. Translated from *Zhurnal Prikladnoi Khimii*,

[2] High Performance Polymers – Polyimides Based – From Chemistry to Applications <http://dx.doi.org/10.5772/2834> Edited by Marc Jean Médard Abadie.



## Caracterización de materiales para su potencial uso en el desarrollo de un empaque biodegradable

M. Morales<sup>1</sup>, A. Maciel<sup>1</sup>, M. Trujillo<sup>2</sup>, A. Vargas<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México

<sup>2</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Ingeniería, México D. F., México

e-mail: mar.moctezuma@gmail.com

Una empresa productora de empaques para alimentos, flexibles, conformados con celulosa y películas plásticas de polietileno, busca desarrollar un empaque biodegradable con el fin de posicionarlo como un empaque amigable con el ambiente. Los materiales poliméricos que podrían emplearse para sustituir la película de polietileno, que no es biodegradable, son el poli(ácido láctico), PLA, y el ecovio® que es una mezcla de ecoflex® con PLA, el ecoflex es el copolímero poli(tereftalato de butileno-co-adipato), PBAT. Se busca que la sustitución del polietileno por algún polímero compostable iguale o mejore las propiedades físicas que tiene el empaque original.

Se caracterizó el empaque original y los materiales propuestos por diferentes técnicas analíticas, como son: microscopía electrónica de barrido (MEB), espectroscopia de infrarrojo (IR), análisis térmicos (TGA, DSC), pruebas mecánicas y pruebas de permeación de vapor de agua para el caso del empaque original. La película plástica de polietileno empleada para plastificar al papel, tiene un adhesivo, que permite la adhesión con el papel. Sin embargo, al observar el empaque original por microscopía electrónica se observan dos capas definidas. Donde el espesor promedio de la celulosa es casi 5 veces mayor que el de la película plástica, por lo que se puede clasificar como empaque bicapa. Se midió la fuerza promedio para separar los dos materiales adheridos por unidad de ancho y la transmisión de vapor de agua del empaque original. El material con mejores propiedades térmicas, morfológicas y mecánicas es el PLA, por lo que es el mejor candidato para usarse como remplazo de la película plástica de polietileno.

Palabras clave: Empaque biodegradable, poli(ácido láctico), Ecovio ®.

Agradecimientos: Este trabajo fue financiado por CONACyT. Al Dr. Omar Novelo Peralta por la caracterización en microscopia electrónica de barrido. A la Q.F.B. Damaris Cabrero Palomino por la caracterización análisis térmicos. Al M. en C. Salvador López Morales. Al I.Q. Ernesto Sánchez Colín por las pruebas mecánicas.



## Memorias 2do. Simposio de Estudiantes Asociados al IIM

### Referencias:

- [1] Viljanmaa, M. et. al. *Adhesion properties of lactic acid based hot melt adhesives and their storage stability in different packaging applications.* International Journal of Adhesion and adhesives 22 (2002) 447-457.
- [2] Davis, G. Song, J.H. *Biodegradable packaging based on raw materials from crops and their impact on waste management.* Industrial Crops and Products 23 (2006) 147–161.
- [3] Petersen, Karina, et al. *Potencial of biobased material for food packaging.* Trends in Food Science & Technology 10 (1999) 52-68.
- [4] Garlotta, Donald. *A literature review of poly(lactic acid).* Journal of Polymers and the Environment, Vol. 9, No. 2, April 2001.
- [5] Siracusa, Valentina, et al. *Biodegradable polymers for food packaging: a review.* Trends in Food Science & Technology 19 (2008) 634-643.
- [6] Bastiolo, Catia. *Handbook of biodegradable polymers.* Rapra Technology Limited, London, 2005. pp 2-20,410-452.
- [7] Platt, David K. *Biodegradable polymers: Market report.* Rapra technology Limited, London, 2006. pp 11, 88-95.



## Polimerización radicalaria de monómeros vinílicos, catalizada por complejos ciclometalados de Ru (II)

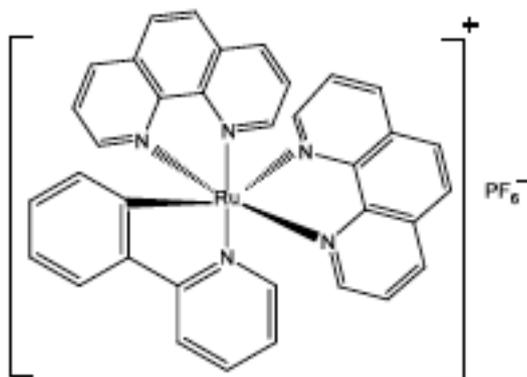
M. García Vargas<sup>1</sup>, C. Aguilar Lugo<sup>1</sup>, L. Alexandrova<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México  
e-mail: miriamgarcia\_v@hotmail.com

El método de polimerización radicalica por transferencia de átomo (atom transfer radical polymerization, ATRP) permite obtener polímeros y copolímeros de baja polidispersidad y con estructuras bien definidas para una gran variedad de monómeros vinílicos. Existen varios complejos de metales de transición que funcionan efectivamente en la polimerización radicalica controlada. El mayor éxito se ha logrado con el empleo de compuestos de cobre y rutenio<sup>1</sup>.

Nuestro grupo de investigación ha desarrollado rutas sintéticas para la preparación de nuevos complejos ciclometalados de rutenio (II), estos complejos incorporan múltiples ligantes bidentados, dando como resultado complejos con una esfera de coordinación saturada y al mismo tiempo, son térmicamente estables en estado sólido.

Dentro de las series de compuestos ciclometalados de Ru<sup>II</sup> sintetizados por nuestro grupo se han encontrado rutenaciclos de 2-fenilpiridina, y 1,10-fenantrolina [Ru(o-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>-2-py)(phen)<sub>2</sub>]PF<sub>6</sub>, los cuales han sido aplicados con éxito en la polimerización radicalica controlada/viviente de algunos monómeros vinílicos.



[Ru(o-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>-2-py)(phen)<sub>2</sub>]PF<sub>6</sub>

Estos catalizadores son eficientes en procesos ATRP, ya que promueven una polimerización rápida con pesos moleculares y distribución de pesos moleculares controlados. Dichos complejos se utilizaron en la polimerización radicalica de metacrilato de metilo y acrilato de butilo. También se sintetizaron copolímeros con ambos monómeros.



## Memorias 2do. Simposio de Estudiantes Asociados al IIM

Palabras clave: polimerización, catalizadores, monómeros vinílicos.

Agradecimientos: Este trabajo es financiado por CONACyT.

Referencias:

[1] K. Matyjaszewski, Ed., Controlled/Living Radical Polymerization: Progress in ATRP, NMP, and RAFT, American Chemical Society, Washington, DC, USA, Vol. 768, 2000



## Metátesis cruzada de chicle natural en presencia de catalizadores de rutenio

S. Reyes-Gómez<sup>1</sup>, M. A. Tlenkopatchev<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México  
e-mail: sreyes.iq@iim.unam.mx

El chicozapote (*Manilkara zapota*) es una fuente de chicle natural (CN). Crece en las regiones tropicales de América, principalmente en Guatemala, Honduras y México. Se ha determinado que este látex es una mezcla de *cis*-1,4 (20%), *trans*-1,4 (73%) and 3,4 (7%) poliisopreno, oxalato de calcio monohidratado y una fracción resinosa. El látex se calienta a agitación constante para reducir el contenido de agua (<40%) y obtener la goma base.

Es de gran interés usar el CN para producir polímeros funcionalizados (telequélidos), debido a que es un recurso renovable y se puede degradar ya que posee insaturaciones C=C. Los telequélidos son componentes clave en la síntesis de copolímeros en bloque, redes poliméricas y como agentes entrecruzantes para aumentar las propiedades térmicas y mecánicas de otros materiales.

En este trabajo se llevó a cabo la depolimerización de la goma base de CN ( $M_n = 1.2 \cdot 10^4$ ; PDI = 1.3), usando los catalizadores: (1,3-dimesitil-4,5-dihidroimidazol-2-ilideno) ( $(PCy_3)_2Cl_2Ru=CHPh$  (catalizador Grubbs 2<sup>da</sup> generación) (**G2**) y (1,3-bis-(2,4,6-trimetilfenil)-2-imidazolidinilideno)dicloro(o-isopropoxifenilmetileno)rutenio (catalizador Hoveyda-Grubbs 2<sup>da</sup> generación) (**H-G2**), en presencia de dimetil maleato (DMM), dietil maleato (DEM) y metil metacrilato (MMA) como agentes de transferencia de cadena (ATCs). Las reacciones se llevaron a cabo adicionando sólo la cantidad necesaria de disolvente para el catalizador. Se obtuvieron oligómeros telequélidos con grupos terminales éster, que se caracterizaron por: <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C RMN, IR y GPC.

Palabras clave: Chicle natural, depolimerización, metátesis, oligómeros, telequélidos.

Agradecimientos: A CONACYT por la beca de doctorado. A Alejandrina Acosta y por su asistencia en los análisis de RMN y GPC.

### Referencias:

- [1] W. Schelesinger, H. M. Leeper. *Industrial and Engineering Chemistry*. 1951, 398-403.
  - [2] E. Azpeitia, A. Bowers, P. Crabbé, O. Mancera, J. S. Matthews, J. Reynoso, J. Salazar. *Canadian Journal of Chemistry*. 30, 1961, 2321-2323.
- A. Tlenkopatchev. *Suplemento de la Revista Latinoamericana de Metalurgia y Materiales* 2009; S1 (4): 1463-1467.



# **Síntesis, caracterización y propiedades ópticas de una nueva serie de oligotiofenos conteniendo unidades de pireno unidos al esqueleto de oligothiophene via espaciadores flexibles de oligo(etilenglicol)**

Efraín Rodríguez Alba<sup>1</sup>, Ernesto Rivera García<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México  
*e-mail: efrainhelio@gmail.com*

Los oligotiofenos son una clase de semiconductores orgánicos de bajo peso molecular, muy prometedor debido a su alta conductividad. La incorporación de unidades de pireno no sólo aumenta el rendimiento de fluorescencia sino que también mejora la estabilidad térmica y la capacidad portadora de carga de éstos en películas delgadas. Los oligómeros p- conjugados se consideran como materiales prometedores debido a sus propiedades ópticas y eléctricas para la elaboración de dispositivos optoelectrónicos como FET , OLEDs , moduladores electro-ópticos y células fotovoltaicas.

La arquitectura molecular de los oligotiofenos se puede modificar cambiando la longitud del esqueleto conjugado o incorporando cromóforos fotoactivos como pireno. Esta estrategia es muy útil para modular sus propiedades ópticas y fotofísicas con el fin de desarrollar materiales luminiscentes. En este trabajo se reporta la síntesis, caracterización y propiedades ópticas de una serie de oligotiofenos conteniendo unidades de pireno unidas al esqueleto del oligotiofeno través de cadenas de tetra y di (etilenglicol) para estudiar la influencia de la geometría de las moléculas y longitudes del esqueleto de oligotiofeno; así como la formación de excímeros (propiedades ópticas).



## Propiedades estructurales y electrónicas de $MgB_2$ , $ZrB_2$ y $ZrB_{12}$ por difracción de rayos X y espectroscopias de electrones (XPS y UPS).

Verónica Vázquez Aceves<sup>1</sup>, Lázaro Huerta Arcos<sup>1</sup>, Raúl Escamilla Guerrero<sup>1</sup>  
<sup>1</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales,  
México D. F., México

En el año 2001 un grupo en Japón publicó en la revista Nature un artículo titulado "Superconductividad a 39K en el diboruro de magnesio". Este descubrimiento atrajo inmediatamente la atención de la comunidad científica, pues ya desde los 1950's los compuestos tipo  $MeB_2$  (  $Me = Sc, Ti, V, Y, Zr, Nb, Hf, y Ta$  ) habían sido estudiados, sin embargo, debido a este descubrimiento un nuevo interés surgió por estudiar estos materiales tanto a presión atmosférica como a alta presión.

En este estudio se propone: a) medir los parámetros de red de la celda unitaria de los diboruros  $MgB_2$ ,  $ZrB_2$  y del dodecaboruro  $ZrB_{12}$ , b) identificar los estados químicos de los elementos que los componen; para posteriormente establecer si existe un mecanismo de transferencia de carga entre el boro y los metales magnesio y zirconio.

Los compuestos  $MgB_2$ ,  $ZrB_2$  y  $ZrB_{12}$  se sintetizan por la técnica de horno de arco. La fase cristalina se identifica por difracción de rayos X (método de polvos), se determinan los parámetros de red con el programa Celref. Se identificarán los estados químicos y propiedades electrónicas mediante la espectroscopia de fotoelectrones por rayos X (XPS) y rayos ultravioleta (UPS). Los espectros obtenidos se analizan con el programa SDP v 4.1.

Palabras clave: Superconductividad, espectroscopia de fotoelectrones por rayos X (XPS), espectroscopia de fotoelectrones ultravioleta (UPS), cristales.

### Referencias:

- [1] R. Escamilla, o. Lovera, T. Akachi, A. Duran, R. Falconi, F. Morales, R.J. Escudero, Phys.;Condens. Matter. 16 (2004) 5979.
- [2] R. Escamilla, L. Huerta, Supercond. Sci. Technol. 19 (2006) 623.
- [3] L. Huerta, A. Duran, R. Falconi, M. Flores, R. Escamilla. Comparative study of the core level photoemission of the  $ZrB_2$  and  $ZrB_{12}$ . Physica C 470 (2010) 456–460.
- [4] Bardeen J, Cooper L N and Schrieffer J R 1957 Phys. Rev. 108 1175. Jun Nagamatsu, Norimasa Nakagawa, Takahiro Muranaka, Yuji Zenitani, Jun Aimitsu., Nature, VOL 410 (2001) 63-64.
- [5] R.Kiessling, J. Electrochem. Soc. 98(1951) 166.
- [6] L.Brewer, D.L. Sawyer, D.H. Templeton, C.H. Dauben, J.Am. Ceram. Soc. 34(1951) 173.
- [7] H.J.Juretschke, R. Steinitz, J.Phys.Chem. Solids 4 (1958) 118.
- [8] A.S. Cooper, E. Corenzwit, Ld. Longinotti, B.T. Matthias, W.H. Zachariasen, Proc.Nat. Acad. Sci. 67 (1970) 313.



## Propiedades tribológicas de nanopartículas de bismuto.

E. García<sup>2</sup>, M. Flores<sup>3</sup>, I. Marquez<sup>1</sup>, E. Camps<sup>3</sup>, S. Muhl<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>*Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México*

<sup>2</sup>*Sección de Estudios de Posgrado e Investigación, ESIME Zacatenco, IPN, México D.F.*

<sup>3</sup>*Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares, Departamento de Física, México D.F.*

*e-mail: edgb007@hotmail.com*

El uso de nanopartículas como aditivos en los aceites lubricantes han mostrado un incremento en sus propiedades tribológicas. Sin embargo, esto depende de las características de los nanomateriales, como son, tamaño, forma y concentración.

Este trabajo presenta el análisis de las propiedades tribológicas de nanopartículas de Bismuto generadas por ablación láser en un medio acuoso, las cuales fueron depositadas sobre acero inoxidable AISI 304. Generando una película e incrementando su adherencia aplicando un recubrimiento de nanocompositos de Bi-C.

El tamaño y la concentración de las nanopartículas, fue controlado por la intensidad del láser y el tiempo de ablación. El recubrimiento de nanocompositos fue realizado por Sputtering (PECVD), en la cual, se utilizaron piezas de Bi, con una plasma de Argón y C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> como gas activo. Se realizaron dos tipos de pruebas de rallado: De carga incremental, donde se aplicó una carga desde 0 a 5 N, y de rayado múltiple, en la cual, se realizan 3 rallones sobre la misma zona de contacto aplicando una carga constante de 1, 2 y 3 N. La distancia recorrida fue de 5 mm y velocidad 5 mm/min. Utilizando como contra cuerpo una esfera de 100Cr6, con diámetro de 1.587 mm. La película y huellas se caracterizaron utilizando Perfilmetría, SEM y Raman. Estudiando particularmente la huella generada, la fuerza de fricción durante el ensayo y los cambios en el recubrimiento, se observó como las nanopartículas redujeron el desgaste generado sobre la superficie, sin embargo, también se presentó un incremento en la fuerza de fricción.

Palabras clave: Nano partículas, Bismuto, Prueba de Rallado.

Agradecimientos: Este trabajo fue financiado por European Community Seven Framework Programme (FP7-NMP-2010-EU-MEXICO) y CONACYT con número de acuerdo n° 263878 y 12514 respectivamente.



## **Síntesis de nanopartículas de óxidos magnéticos mediante hidrólisis forzada en poliol: caracterización estructural y magnética**

G. Vázquez-Victorio<sup>1</sup>, S. Ammar<sup>2</sup>, S. Nowak<sup>2</sup>, R. Ortega-Zempoalteca<sup>1</sup>, B. Cruz-Franco<sup>1</sup>, R. Valenzuela<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Depto. Materiales Metálicos y Cerámicos, Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, 04510, México*

<sup>2</sup>*ITODYS, Université Paris Diderot, PRES Sorbonne Paris Cité, CNRS-UMR 7086, 75205 Paris Cedex, France.  
e-mail: gvazquezvic@gmail.com*

En la actualidad existe un gran interés, tanto científico como tecnológico, en la síntesis de nanopartículas (NPs), en nuestro caso particular en la síntesis de nanopartículas magnéticas (MNPs). Este interés se debe en gran medida a que las propiedades químicas y magnéticas de las MNPs son muy diferentes a las propiedades del material en su estado masivo ("bulk"). Los métodos de síntesis tienen como principales retos obtener materiales con una estrecha distribución de tamaño, así como la obtención de la microestructura y fases deseadas. En nuestro grupo de trabajo se ha realizado la síntesis de una serie de NPs de óxidos magnéticos mediante la hidrólisis forzada en poliol, las cuales se han caracterizado estructuralmente mediante difracción de rayos X (DRX) y microscopias TEM y HR-TEM. Los patrones de DRX presentan la particularidad de que no muestran la presencia de fases secundarias. La caracterización magnética se llevó a cabo mediante las técnicas de magnetometría de muestra vibrante (VSM), magnetometría SQUID y resonancia de espín electrónico (ESR). Este trabajo tiene como objetivo presentar resultados generales de los estudios realizados a los materiales sintetizados dentro del grupo de trabajo. La caracterización magnética se llevó a cabo a diferentes temperaturas ya que una consecuencia de reducir las dimensiones de los materiales ordenados magnéticamente es que en las nanopartículas se observa el fenómeno llamado superparamagnetismo por encima de una temperatura característica conocida como temperatura de bloqueo.

Palabras clave: Nanopartículas magnéticas, poliol, superparamagnetismo.

### Referencias:

- [1] Z. Beji, L. Smiri, T. Ben Chabane, S. Ammar, N. Jouini, F. Fiévet and J.-M. Grenèche. *Phys. Stat. Solidi. A* 203, 504 (2006).
- [2] B. Cruz-Franco, *et al.*, Magnetic properties of nanostructured spinel ferrites, *IEEE Transactions on Magnetics* 50 (4) (2014) 1-6



## Termoelectricidad en nanoalambres aperiódicos

J.E. González<sup>1</sup>, V. Sanchez<sup>2</sup>, C.Wang<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México

<sup>2</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Ciencias, México D. F., México

e-mail: jegonzalezmireles@gmail.com

La termoelectricidad estudia la interacción entre fenómenos térmicos y eléctricos, por lo que el transporte electrónico y el fonónico son fundamentales en dicho estudio. Los dos efectos termoeléctricos más importantes son el efecto Seebeck y el Peltier. El primero es la generación de electricidad a partir de una diferencia de temperatura, mientras que el segundo permite el transporte de calor de un lado frío a uno caliente a través de la aplicación de una corriente eléctrica. Mediante el efecto Seebeck se puede generar electricidad a partir, por ejemplo, del calor residual en el escape de los automóviles, así como de fuentes geotérmicas. Paralelamente, el efecto Peltier es la base de nuevas generaciones de refrigeradores sin vibraciones ni ruidos. Hoy en día, la eficiencia de dichos efectos es todavía bastante baja para remplazar la tecnología existente. Sin embargo, hay indicios que muestran una mayor eficiencia en materiales nanoestructurados [1].

En este trabajo hemos desarrollado modelos cuánticos que correlacionan la estructura microscópica con la Figura de Mérito termoeléctrica ( $ZT=S^2\sigma T/\kappa$ ), donde  $S$  es el coeficiente Seebeck,  $\sigma$  es la conductividad eléctrica y  $\kappa$  es la conductividad térmica tanto por electrones como por fonones. Los cálculos numéricos de  $ZT$  en nanoalambres aperiódicos se realizan usando el método de renormalización más convolución dentro del formalismo de Kubo-Greenwood [2] y el modelo de Born [3].

Palabras clave: Figura de Merito, Renormalización, Kubo-Greenwood.

### Referencias:

[1] H. Fang, T. Feng, H. Yang, X.Ruan y Y. Wu, Nano Lett. **13**, 2058 (2013).

[2] V. Sanchez. y C.Wang, Phys. Rev. B **70**, 144207 (2004).

[3] C. Wang, F. Salazar y V. Sanchez, Nano Lett. **8**, 4205 (2008).



# Simulación químico-cuántica de propiedades electrónicas de nanoalambres de ZnO con Au a nivel DFT

J. M. Méndez Reyes<sup>1</sup>, A. E. Ramos Peña<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México  
e-mail: mendezreyesjosemiguel8@gmail.com.mx

El estudio de nanomateriales a partir de cálculos mecánico-cuánticos representa un gran avance en el porvenir de la ciencia de materiales y la nanotecnología. En este trabajo se explican las propiedades electrónicas de nanoalambres de ZnO, material altamente empleado en dispositivos optoelectrónicos, catálisis fotovoltaica, celdas solares [1], materiales piezoeléctricos [2], entre otros. Dentro de la estructura de los mismos se localizan átomos de oro en posiciones distintas, esto con la finalidad de explicar propiedades como la fotoluminiscencia y la brecha de energía prohibida de los nanoalambres que son sintetizados mediante el uso de centros de nucleación como el oro [3], con la posibilidad de que éste permanezca dentro de la estructura, como un defecto o en los intersticios [4].

El trabajo realizado consta de tres etapas fundamentales: Efecto del confinamiento cuántico en nanoalambres, dada su reducida dimensión; el estudio de la presencia de un hilo de oro en el interior de la estructura y, finalmente la presencia de átomos de oro en los intersticios o bien sustituyendo átomos en la red. Para cada sistema se realizó una optimización de la geometría empleando la teoría de los funcionales de la densidad DFT/GGA [5] utilizando el funcional de intercambio y correlación parametrizado por Perdew-Burke-Erzenrhof [6], siendo uno de los más usados para sistemas periódicos [7]. Para las estructuras así optimizadas se hizo un análisis de energías de formación, densidad de estados, potencial electrostático, diagrama de bandas y densidades electrónicas realizando cálculos con tres bases diferentes (MIN, MIN/ECP y DND/ECP).

Palabras clave: Nanoalambres, DFT, ZnO, oro, defecto.

Agradecimientos: Este trabajo fue financiado por DGAPA-PAPIIT.

## Referencias:

- [1] Feng. Y., Ji. X., Duan. J., et al. *Journal of Solid State Chem.* 190 303-308 **2012**
- [2] Zhang. Y., Ram. M. K., et al. *J. Nanomaterials* 1-22 **2012**
- [3] Wong. K. M., et al, *J. Appl. Phys.* 144 034901 **2013**
- [4] Güell. F., et al. *Nanotechnology* 20 315701-315708 **2009**
- [5] Hohenberg. P., Kohn .W. *Phys. Rev.*, 136 3B 864-871 **1964**
- [6] Perdew. J., Bruke. K., Ernzerhof. M. *Phys. Rev. Lett.* 77 18 3865-3868 **1996**
- [7] Deng. X. Y., Liu. G. H., et al. *Int. J. Quantum Chem.* 114 468-472 **2014**



## **Fibras ópticas y nanotubos de carbono para neurooncología. Propuesta de microcalentadores fototérmicos**

Reinher Pimentel-Domínguez<sup>1,2\*</sup> y Juan Hernández-Cordero<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México*

<sup>2</sup>*Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Medicina, México D. F., México*

*e-mail: vetuasaber@ciencias.unam.mx*

El cáncer es una de las principales enfermedades que afecta a la humanidad. En la mayoría de los países desarrollados el cáncer es la segunda causa de muerte. Debido a la complejidad de la enfermedad existen muchos tipos diferentes, más de una centena. Algunos llegan a ser muy agresivos y deterioran la vida del paciente de manera grave y rápida, como por ejemplo los tumores cerebrales. Existen pocas terapias para el tratamiento de cáncer cerebral, entre ellas la quimioterapia y la radioterapia, pero no siempre logran ser exitosas. En el peor de los casos se recurre a la cirugía, pero es posible no extirpar el tumor en su totalidad. Recientemente, se han propuesto terapias alternas que buscan ser más eficientes y menos agresivas. Una propuesta atractiva es la terapia hipertérmica, la cual consiste en calentar el tumor hasta producir daño celular irreversible provocando la muerte de las células malignas. Dependiendo del tamaño y la localización del tumor se requieren fuentes compactas que liberen el calor de forma precisa. En el presente trabajo se propone un microcalentador de fibra óptica. El dispositivo se basa en el efecto fototérmico generado por nanotubos de carbono depositados en la punta de una fibra óptica. La luz que viaja a través de la fibra óptica es absorbida por las nanopartículas generando una fuente de calor micrométrica. De este modo, es posible obtener un dispositivo compacto, ligero y robusto que permite calentar zonas del orden de 100-200  $\mu\text{m}$ .

Palabras clave: fibras ópticas, efecto fototérmico, nanotubos de carbono, cáncer.



## **Reinterpretación del instrumental para electrohilar nanofibras utilizando principios del Diseño de Restricciones Exactas**

U.Espinoza<sup>1</sup>, A. Ramírez<sup>2</sup>, R. Vera<sup>1</sup>, A. Maciel<sup>1</sup>, A. Ospina<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México*

<sup>2</sup>*Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Ingeniería, México D. F., México*

*e-mail: ulisesespinoza@comunidad.unam.mx*

La ingeniería de tejidos se concibe como un campo multidisciplinario en el cual se combinan conocimientos de medicina, biología, física, química e ingeniería; su objetivo es desarrollar tecnología que permita restaurar, mantener o mejorar funciones a nivel celular. Para la ingeniería de tejidos es indispensable el uso de andamios celulares, los cuales debido a sus funcionalidades son el medio para que las células se reorganicen y formen nuevos tejidos. Un tipo particular de andamio celular es el formado a base de nano fibras poliméricas obtenidas mediante la técnica de electrohilado. El electrohilado tiene sus orígenes en una patente publicada por John Francis Cooley en el año de 1890, y su diseño ha venido utilizándose hasta la actualidad sin mejoras sustanciales que mejoren el rendimiento del sistema.

En este trabajo se presenta una reinterpretación del instrumental utilizado en la técnica de electrohilado. La reinterpretación consiste en el rediseño de las conexiones mecánicas del aparato original, las cuales se sustituyen por conexiones cinemáticas de rigidez óptima, con las cuales se busca incrementar la precisión inherente del sistema. El aparato de electrohilado de alta precisión permitirá estudiar la relación entre la precisión en el posicionamiento de los elementos del aparato, con la precisión morfológica de los andamios celulares electrohilados obtenidos.



## Memorias 2do. Simposio de Estudiantes Asociados al IIM

Palabras clave: Andamio celular, electrohilado, diseño cinemático

Agradecimientos: Este trabajo fue financiado por CONACyT, PAPIIT.

### Referencias:

- [1] Maxwell, J. C. (2003). General Considerations Concerning Scientific Apparatus. En *The Scientific Papers Of James Clerk Maxwell* (Vol. 2, pág. 816). Courier Dover Publications.
- [2] Cooley, J. F. (1900). *GB Patente n° 6385*.
- [3] Doshi, J., & Reneker, D. H. (1995). Electrospinning process and applications of electrospun fibers. *Journal of Electrostatics*, 151-160.



## **Estudio teórico de la estructura electrónica de hidrocarburos aromáticos policíclicos como modelos finitos para estudiar nanoribbons de grafeno rectangulares y grafeno.**

A.E. Torres, S. Fomine

*Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México  
e-mail: [aelizabeth.th@gmail.com](mailto:aelizabeth.th@gmail.com)*

Se realizó un estudio teórico de la estructura electrónica de algunos hidrocarburos policíclicos aromáticos (PAH's), que contienen desde 10 (C<sub>10</sub>H<sub>8</sub>) hasta 196 átomos de carbono (C<sub>196</sub>H<sub>38</sub>) como un modelo para estudiar estructuras tipo "nanoribbons" de grafeno (GNR's) de manera sistemática. Para las diferentes estructuras se realizaron cálculos de optimización de geometría a nivel D3-B3LYP/ccpVDZ, análisis de estabilidad SCF(singulete de capa cerrada) y cálculos del diagnóstico D1 (MP2 y en algunos casos CC2). Asimismo, se realizaron cálculos de punto simple CASSCF(10,10)/6-31G(d) para todas las estructuras optimizadas en los diferentes estados electrónicos estudiados; singulete de capa cerrada, triplete, singulete de capa abierta, quintuplete y heptuplete.

Entre los resultados más importantes obtenidos en esta primera etapa, se encontró que las funciones que describen el estado basal de los PAH's de gran tamaño, incluyendo a los nanoribbons de grafeno, exhiben un carácter multiconfiguracional significativo cuando las dimensiones del sistema exceden los 40-50 átomos. Los valores del diagnóstico D1(MP2) como indicadores del carácter multiconfiguracional del estado basal correlacionan con la inestabilidad del triplete detectada para las singuletes de capa cerrada. Cabe señalar que el carácter multiconfiguracional no necesariamente indicó un estado poliradical. El estado basal de los PAH's de menor tamaño se caracterizó como singulete con prácticamente una sola configuración como referencia, los sistemas de tamaño mediano mostraron un estado basal (singulete o triplete) multiconfiguracional y un moderado carácter poliradical. El estado basal más probable de los sistemas más grandes es poliradical.

Palabras clave: multiconfiguracional, poliradical, CASSCF, BS-DFT, grafeno.

Agradecimientos: Se agradece el apoyo financiero otorgado por PAPIIT (IN-100712/24) y CONACyT( 245467), así como las facilidades en la utilización de recursos de supercómputo (DGTIC-UNAM).

### Referencias:

[1] Torres Ana E.; Guadarrama Patricia.; Fomine Serguei Multiconfigurational character of the ground states of polycyclic aromatic hydrocarbons. A systematic study. J Mol. Model. 2014, 20, 2208.



# Estudio teórico de las propiedades electrónicas de nanoalambres semiconductores de SiC pasivados con grupos $-NH_2$ y $-NO_2$ .

E. Nolasco, A. E. Ramos<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México  
e-mail: eramos@iim.unam.mx

Las aplicaciones de los dispositivos semiconductores basados en silicio abarcan una enorme gama de posibilidades, se ha reportado su uso como detectores de gases o como dispositivos fotovoltaico, instrumentos capaces de convertir la energía luminosa en electricidad. Entre ellos, las celdas solares son unos de los más atractivos por el impacto social y ambiental que tiene la búsqueda de fuentes de energía alternativas que nos permitan evitar el uso de combustibles fósiles.

El carburo de silicio (SiC) es un compuesto semiconductor. Su estructura consiste en una red cristalina donde existen capas intercaladas de silicio y de carbono. Se llevó a cabo el modelado de nanoalambres de SiC para estudiar la dependencia de las propiedades electrónicas de cambios en la superficie ocasionados por los átomos que se enlazan a la misma. Para ello, se modeló nanoalambres de SiC y se colocó moléculas de  $-NH_2$  y de  $-NO_2$  como grupos donadores y aceptores de electrones, respectivamente.

El estudio se realizó mediante el programa de cálculos de estructura electrónica CASTEP. El método está basado en la teoría de los funcionales de la densidad (DFT, por sus siglas en inglés). La DFT es un modelo de la mecánica cuántica alternativo a la solución de la ecuación de Schrödinger para investigar la estructura electrónica de sistemas de muchos cuerpos. La teoría está basada en el uso de la densidad electrónica para calcular la energía del sistema y no trabaja directamente con la función de onda.

Palabras clave: Nanoalambres, semiconductores, carburo de silicio.

Agradecimientos: Este trabajo fue financiado por PAPIIT.

## Referencias:

- [1] Goel S. *J. Mat. Res.* Vol. **27**, No. 23, 2012.
- [2] Muranaka T, Kikuchi Y, Yoshizawa T, Shirakawa N, Akimitsu J. *Sci. Technol. Adv. Mater.* **9**. 044204, 2008.
- [3] Sekine T, Kobayashi T. *Phys. Rev. B.* vol. **55**, no. 13, pp. 8034-8037. 1997.
- [4] Woo H, Czerw R, Webster S, Carroll D, Ballato J, Strevens A, O'Brien D, Blau W. *Appl. Phys. Lett.* Vol. **77**, no. 9, pp. 1393-1395, 2000.



## Disociación de H<sub>2</sub> en cúmulos de cobalto

F. Buendia<sup>1</sup>, MR. Beltrán<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México  
e-mail: ferbuza1801@gmail.com

Estudio teórico realizado en cúmulos de cobalto ConH<sub>m</sub> (n=1-5 y m=1,5), empleando la Teoría de Funcionales de la Densidad, con el uso de un funcional híbrido (B3LYP). Se obtuvieron las estructuras geométricas del estado base para el cúmulo neutro, así como para el anión de los distintos cúmulos en base a una búsqueda extensa en la superficie de potencial. Los resultados obtenidos muestran el comportamiento en el momento magnético del cobalto, así como otras propiedades respecto al tamaño del cúmulo[1]. También en este trabajo se muestra como cambian las propiedades al saturar los distintos cúmulos de cobalto con átomos de hidrogeno, con lo que se encontraron resultados interesantes tales como el aumento en la estabilidad, así como en algunos casos el aumento en el momento magnético. Todos estos resultados son comparados y se observa su concordancia con estudios teóricos y experimentales anteriores[2].

Palabras clave: Cobalto, Hidrogeno, DFT

Agradecimientos: Este trabajo fue financiado por CONACyT, PAPIIT.

### Referencias:

- [1]P. Jena, S. N. Khana, B. K. Rao, Physics and Chemistry of Finite Systems: From Clusters to Crystals Editorial Kluwer Academia Publishers, Holanda (1992)  
[2]R. S. Berry, Eur. Phys. J. D Vol. 43, 5 (2007)



## Estudio de fotoluminiscencia en nanocristales de silicio embebidos en SiNx

Fernando Yautentzi, Guillermo Santana, B. Marel Monroy Peláez

*Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México*  
e-mail: [fernandociencias@comunidad.unam.mx](mailto:fernandociencias@comunidad.unam.mx)

Intensos estudios se realizan en dispositivos emisores de luz basados en silicio debido al alto potencial en las aplicaciones optoelectrónicas compatibles con la tecnología actual. En este trabajo investigamos la fotoluminiscencia de nanocristales (nc) de silicio embebidos en una matriz amorfa de nitruro de silicio no estequiométrico, el crecimiento de los nc se realizó por medio de depósito químico en fase de vapor asistido por plasma o PECVD (por sus siglas en inglés) usando como gases precursores  $\text{SiH}_2\text{Cl}_2$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{H}_2$  y Ar y condiciones de temperatura en  $200\text{ }^\circ\text{C}$ , potencia de 30 W, y presiones de 250 y 500 mTorr. Las variaciones en los parámetros de flujo de los gases, la presión y el tiempo de depósito afectan las propiedades luminiscentes de las películas, así como su estabilidad química. Los estudios en composición y morfología de las mismas se realizaron por medio de FTIR, RBS y TEM. Las propiedades ópticas se estudiaron por transmitancia UV-visible, elipsometría de nulidad y fotoluminiscencia. Los resultados en fotoluminiscencia muestran luminiscencia de luz blanca en cuarto oscuro, pero el pico de emisión se corre en función de los parámetros de crecimiento de las películas. También se analiza el cambio en el índice de refracción y el borde de absorción en función de la composición química de las películas y del tamaño promedio de los nc.

Palabras clave: Nanocumulos de silicio, fotoluminiscencia, PECVD

### Agradecimientos:

Se agradece a la Dra. Alejandra López del IFUNAM, a Sandra Sánchez y Elis Mon por su apoyo en la caracterización por RBS, al Dr. Jaime Santoyo por su apoyo con la caracterización por HRTEM. Este trabajo fue parcialmente financiado por los proyectos: PAPIIT IB101612 e IN100914, CONACyT 153948 y 179632, y SENER-CONACyT 151076.

### Referencias:

- [1] B.M. Monroy, G. Santana, et. al, Journal of Luminescence 121 (2006) 349–352
- [2] Hajime Shirai\*, Yukihiko Fujimura, Sughoan Jung, Thin Solid Films 407 (2002) 12–17
- [3] W.L. Scopel, M.C.A. Fantini, Brazilian Journal of Physics, vol. 32, no. 2A, June, 2002



Memorias 2do. Simposio de Estudiantes Asociados al IIM

## **Estudio Tribológico de Aceites Minerales Adicionados con Nanopartículas de Bismuto**

I. Marquez<sup>1</sup>, M. Flores<sup>2</sup>, E. Camps<sup>2</sup>, S. Muhl<sup>1</sup>.

<sup>1</sup> *Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México*

<sup>2</sup> *Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares. Km. 36.5 de la Carretera México-Toluca s/n, La Marquesa municipio de Ocoyoacac, México*

*e-mail contacto: idalia\_dmg@yahoo.com.mx*

Basados en el hecho de que la estructura cristalina del Bismuto y sus propiedades mecánicas son semejantes al grafito, preparamos aceites minerales adicionados con nanopartículas de Bismuto como aditivos para tratar de mejorar las propiedades de los lubricantes. Debido a lo anterior, nuestro estudio incluye pruebas tribológicas con distintas concentraciones de nanopartículas de Bismuto producidas por ablación láser.

El estudio incluye pruebas de Ball Cratering utilizando una bola de 30 mm de diámetro de acero 100Cr6, 3 ml de cada muestra de aceite, carga constante de 2N y 2,000 vueltas (~1880m).

Las huellas se analizaron utilizando perfilometría, y un sensor de profundidad para medir respecto al tiempo la profundidad del cráter durante el proceso de desgaste.

El análisis fue hecho con y sin nanopartículas y con distintas concentraciones de tales.

Utilizando el sensor de profundidad, se obtuvieron resultados distintos para cada una de las muestras de aceite utilizadas.

Palabras clave: Tribología, Ball Cratering, Aceites, Nanopartículas, Bismuto.



## **Síntesis y propiedades nanoestructurales de $La_{0.6} Sr_{0.4} Co_{0.2} Fe_{0.8} O_{3-\delta}$ depositado por rocío pirolítico, para celdas de combustible de óxidos sólidos de temperatura intermedia (IT-SOFCs).**

Juan de Dios Castro Robles, José Á. Chávez carvallar, Rubén Martínez Bautista.  
*email: [Jd\\_roca@yahoo.com.mx](mailto:Jd_roca@yahoo.com.mx)*

Las celdas de combustible de óxidos sólidos son dispositivos altamente eficientes y amigables con el medio ambiente. De manera simplificada, dichas celdas están constituidas por un ánodo, un cátodo y un electrolito sólido y por lo general operan en un intervalo de temperaturas de 800-1000 C. Se desea disminuir la temperatura de operación de dichas celdas, por lo tanto, los óxidos denominados cobaltitas ( $LaCoO_3$ ) dopados con Sr y Fe mantienen una estructura cristalina de tipo perovskita y son materiales potencialmente aplicables para ser utilizados como cátodos en (IT-SOFCs). Por otro lado, películas delgadas, depositadas por rocío pirolítico ultrasónico, están siendo utilizadas para obtener electrodos porosos y homogéneos.

En este trabajo, el compuesto  $La_{0.6} Sr_{0.4} Co_{0.2} Fe_{0.8} O_{3-\delta}$  fue preparado por el método de rocío pirolítico ultrasónico. El producto obtenido fue caracterizado estructuralmente por difracción de rayos X (DRX), la caracterización morfológica se realizó por medio de microscopía electrónica de barrido (MEB) y microscopía de fuerza atómica (AFM).

Los resultados indicaron que el compuesto  $La_{0.6} Sr_{0.4} Co_{0.2} Fe_{0.8} O_{3-\delta}$  es nanoestructurado, con una estructura cúbica tipo perovskita en el cual el tamaño de las nanopartículas está en un intervalo de 60 – 150 nm.



## **Síntesis, caracterización y propiedades de nanopartículas magnéticas de la ferrita de manganeso ( $MnFe_2O_4$ )**

M. Vega-Núñez, G. Vázquez-Victorio, R. Valenzuela

*Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México*  
*e-mail: contacto [monikg89@hotmail.com](mailto:monikg89@hotmail.com)*

La ferrita de manganeso en forma de nanopartículas tiene aplicaciones potenciales en el almacenamiento magnético, tecnología ferrofluido y campos de la biomedicina de la administración de fármacos, tratamientos de hipertermia e imágenes de resonancia magnética. Sus propiedades son dependientes de sus características microestructurales, es decir, el tamaño de partícula y la forma. Para lograr materiales de las propiedades físicas y químicas deseadas, la preparación de nanocristales de ferrita de manganeso a través de diferentes vías se ha convertido en una parte esencial de la investigación. Se han reportado varios métodos de fabricación para preparar nanocristales de ferrita de manganeso, incluyendo el método sol - gel, co-precipitación, poliol, y el método hidrotermal. En este trabajo las nanopartículas se prepararon por medio del método de poliol en el que se utilizó una mezcla de acetato de manganeso (II) y acetato de hierro (II) con Dietilenglicol (DEG) como disolvente. La caracterización se efectuó por medio de difracción de rayos X (DRX), el tamaño medio de partícula se determinó por medio de estudios de microscopía electrónica de transmisión (TEM) y las propiedades magnéticas y el ciclo de histéresis se estudiaron por medio del magnetómetro por vibración de muestra (VSM); Las propiedades magnéticas dinámicas se determinaron por medio de resonancia paramagnética electrónica (EPR)

Palabras clave: nanopartículas, caracterización, poliol, síntesis.

### Referencias:

- [1] R.C.O. Handley, Modern Magnetic Materials: Principles and Applications, New York, John Wiley & Sons, 2000.
- [2] S.R. Ahmed, S.B. Ogale, G.C. Papaefthymiou, R. Ramesh, P. Kofinas, Magnetic properties of  $CoFe_2O_4$  nanoparticles synthesized through a block copolymer nanoreactor route, *Appl. Phys. Lett.* 80(2002)1616–1618.
- [3] I. Brigger, C. Dubernet, P. Couvreur, Nanoparticles in cancer therapy and diagnosis, *Adv. Drug Delivery Rev.* 54(2002)631–651.



## Influencia del tantalio en la conductividad iónica de películas de Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

Celia L. Gómez<sup>1</sup>, Sandra E. Rodil Posada<sup>1</sup>, Phaedra Silva-Bermudez<sup>1</sup>, H. Estrada<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, México*

<sup>2</sup>*Centro Nacional de Metrología, Querétaro, México  
e-mail: zethli83@hotmail.com*

Se evaluó la influencia del tantalio (Ta) en la conductividad iónica de películas delgadas de óxido de bismuto en fase delta ( $\delta$ -Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) depositadas por magnetrón sputtering utilizando atmósfera de Ar: O<sub>2</sub> (80:20), una potencia de 100 W y temperatura de sustrato de 125 °C. Las propiedades de transporte se estudiaron empleando espectroscopia de impedancias (EIS) en función de la temperatura desde RT hasta 250 °C, en un intervalo de frecuencias de 1 Hz a 1 MHz, la amplitud de la señal utilizada fue de 1 V. Se utilizó una configuración de electrodos rectangulares de platino. De acuerdo a los estudios previos realizados sobre la conductividad en las películas de  $\delta$ -Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, se observó que la conductividad se vio afectada con la incorporación de los iones de tantalio, lo cual podría atribuirse a que los iones de Ta ocuparon la red del óxido de bismuto, presentando una disminución en la conductividad superficial.

Palabras clave: Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, tantalio, conductividad iónica, EIS.

Agradecimientos: Este trabajo fue financiado por European Community Seven Framework Programme (FP7-NMP-2010-EU-MEXICO; n° 263878) y CONACyT (n° 125141).



## Síntesis y caracterización de películas delgadas luminiscentes y altamente transparentes de óxido de hafnio dopado con europio.

Adrian Espinoza-Sigala<sup>1</sup>, Francisco Ramos-Brito<sup>1</sup>, Gelacio Atondo-Rubio<sup>1</sup>, Cristo Yee<sup>1</sup>, Oscar Velarde<sup>1</sup>, Eduardo Canales-Velasco<sup>2</sup>, Manuel Garcia-Hipolito<sup>2</sup>, Ciro Falcony<sup>3</sup>, Héctor Murrieta<sup>4</sup>

<sup>1</sup> Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, Universidad Autónoma de Sinaloa, Ciudad Universitaria S/ N, Culiacán, Sinaloa, México.

<sup>2</sup> Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria, Coyoacán, México DF, México.

<sup>3</sup> Departamento de Física, CINVESTAV- IPN, México DF, México

<sup>4</sup> Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria, Coyoacán, México DF, México.  
email: [framosbrito@uas.edu.mx](mailto:framosbrito@uas.edu.mx)

Las películas foto y cátodoluminiscentes de óxido de hafnio dopadas con europio fueron sintetizadas por la técnica de Rocío Pirofítico Ultrasónico. El promedio de espesor de las muestras medidas por elipsometría fue de alrededor de 300 nm. Los resultados de difracción de rayos-X mostraron la estabilización de la fase monoclinica de la hafnia con una temperatura de reacción (Tr) por debajo de 450 °C. Se observó la evolución de la estructura cristalina de las fases monoclinica a tetragonal como función de la Tr y la concentración de europio. Los estudios fotoluminiscentes (PL) prueban la incorporación de  $\text{Eu}^{3+}$  en la red cristalina del  $\text{HfO}_2$  y el espectro PL está en concordancia con los estudios de difracción de rayos-X. El espectro cátodoluminiscente no mostró la presencia de la emisión intrínseca de la hafnia la cual es asociada a defectos en su estructura cristalina. Los valores Red/Orange (R/ O), obtenidos de la razón entre las intensidades de los picos asociados a las transiciones electrónicas dipolar (~612 nm) y magnética (~590 nm) de los iones  $\text{Eu}^{3+}$ , indican la buena calidad óptica de las películas y su potencial aplicación como fósforo rojo en LEDs de luz blanca. Las películas presentaron una transmitancia promedio de 80%. Los estudios foto y cátodoluminiscentes se hicieron variando los parámetros de Tr y concentración de Eu.

Palabras clave: óxido de hafnio,  $\text{Eu}^{3+}$ , PL-CL.

### Referencias:

- [1] Avila-García, A. et al. (2008). Characterization of gas sensing  $\text{HfO}_2$  coatings synthesized by spray pyrolysis technique. *Sensors and Actuators B: Chemical* (133), 302–307.
- [2] Carbajal-Valdez, et al. (2013). Catodoluminiscencia en películas de óxido de hafnio activadas con europio y terbio, depositadas por la técnica de RPU. *Revista Mexicana de Física* (59), 343–351.
- [3] García, S. J. (2005). *An introduction to optical spectroscopy of inorganic solids*. John Wiley & Sons, Ltd.



# Obtención de películas de ZnO con nanoestructura de barras por rocío pirolítico

N. S. Portillo Vélez<sup>1</sup>, M. Bizarro Sordo<sup>1</sup>, J. C. Alonso Huitrón<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México  
e-mail: nsoyuk@gmail.com*

El óxido de zinc (ZnO) es un importante semiconductor de banda ancha, con un amplio rango de aplicaciones en optoelectrónica. También sobresale debido a la gran variedad de morfologías que puede llegar a exhibir, cada una con propiedades únicas, lo cual puede ser dirigido en la creación y aplicación de nuevos dispositivos. La técnica de rocío pirolítico es un procedimiento sencillo y rentable para la obtención de películas delgadas. En este trabajo se optimizaron los parámetros de depósito para obtener películas de ZnO con nanoestructura de barras. Se estudiaron parámetros como: la concentración de la solución precursora, la temperatura de depósito, y la tasa de depósito. Los sustratos utilizados fueron de vidrio corning, una temperatura de 450°C y un flujo de gas portador de 1028 ml/min. Se analizó el efecto de las condiciones de depósito, en características obtenidas en la película como la morfología, cristalinidad, espesor y rugosidad. Los patrones de Difracción de rayos X, así como las imágenes de Microscopía Electrónica de Barrido muestran que las barras obtenidas son de ZnO tipo wurtzita con diámetros y longitudes por debajo de 1  $\mu\text{m}$ , creciendo preferencialmente en la dirección [002]. Finalmente la caracterización óptica fue utilizada para revelar el máximo de transmitancia y el ancho de banda prohibida. Las películas de ZnO con morfología de barras presentan mayor superficie de contacto que una película lisa, haciéndolas de gran interés en dos prometedoras aplicaciones que tiene en común fenómenos superficiales de transferencia electrónica: como fotocatalizador y como sensor de H<sub>2</sub>.

Palabras clave: Óxido de zinc, películas delgadas, rocío pirolítico.

## Referencias:

[1] Wang, Z.L., Zinc oxide nanostructures: Growth, properties and applications. *Journal of Physics Condensed Matter*, 16 (2004) R829-R858.



## Estabilidad de la fase delta en películas delgadas de Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>:Ta

Celia L. Gomez<sup>1</sup>, Osmary Depablos-Rivera<sup>1</sup>, Juan C. Medina<sup>1</sup>, Phaedra Silva-Bermudez<sup>1</sup>, Stephen Muhl<sup>1</sup>, Andreas Zeinert<sup>2</sup>, Sandra E. Rodil<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México

<sup>2</sup>Université de Picardie Jules Verne, Laboratoire de Physique de la Matière Condensée, Amiens, Francia  
e-mail: [contacto\\_zethli83@hotmail.com](mailto:contacto_zethli83@hotmail.com)

En este trabajo reportamos la estabilización de la fase delta en películas delgadas de Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub> desde temperatura ambiente hasta 500°C por la adición de iones de tantalio. El delta-Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub> es el material con mayor conductividad iónica conocida, en volumen es estable en un intervalo reducido de temperatura de 730-825°C, mientras que alfa-Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub> es la fase estable a temperatura ambiente. Sin embargo, cuando es producido como película delgada mediante métodos de agregación atómica, la fase delta puede ser mantenida en condiciones atmosféricas y se transforma a la fase alfa solo después de un tratamiento de recocido, pasando por una transformación intermedia a la fase beta alrededor de 250-350°C. La adición de tantalio durante el depósito de películas de Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub> por magnetron sputtering permitió la conservación de la fase delta cuando es tratada térmicamente en aire hasta 500°C.

Palabras clave: óxido de bismuto, sputtering, película delgada, estabilidad térmica.

Agradecimientos: CONACYT por la beca otorgada y al proyecto BisNano financiado por la Comunidad Europea (FP7-NMP-2010-EU-MEXICO) y CONACYT bajo los acuerdos 263878 y 125141, respectivamente.

Referencias:

[1] Celia L. Gomez, Osmary Depablos-Rivera, Juan C. Medina, Phaedra Silva-Bermudez, Stephen Muhl, Andreas Zeinert, Sandra E. Rodil. Stabilization of the delta-phase in Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub> thin films. Solid State Ionics 255 (2014) 147-152.



# Estabilización de las Propiedades fotocatalíticas del ZnO en Película Delgada Mediante Nanopartículas de Ag.

N.Flores-Hernández<sup>1</sup>, M. Bizarro <sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, México D. F., México*

El tratamiento de efluentes textiles se ha convertido en un tema importante para la ecología y la salud humana, debido a que los colorantes que se utilizan en la industria textil son difíciles de degradarse mediante los tratamientos convencionales para el agua residual. Recientemente se han estudiado las propiedades fotocatalíticas de semiconductores para la degradación de este tipo de compuestos recalcitrantes que contaminan el agua. Además se busca que estos materiales puedan aprovechar la energía solar en el proceso, para hacerlo más amigable con el ambiente y sustentable.

En este trabajo se estudiaron las propiedades fotocatalíticas de películas de óxido de zinc (ZnO) obtenidas por el método de rocío pirolítico. Sobre ellas fueron depositadas nanopartículas de plata (Ag) mediante sputtering. Se evaluó el efecto de las nanopartículas de plata en el aumento de la actividad fotocatalítica del ZnO con diferentes tipos de iluminación: luz UV, luz blanca y luz solar, midiendo el espectro de absorción del colorante Anaranjado de Metilo. [1] Se determinó que la cantidad de plata que optimiza la degradación fotocatalítica del colorante es un depósito de 3.5 nm de espesor de Ag. Se observó una excelente respuesta con luz solar y luz blanca, pero no presenta actividad si se excita únicamente con luz en el intervalo visible del espectro. [2]

Palabras clave: óxido de zinc, nanopartículas, fotocatalisis, películas delgadas.

## Referencias:

[1] Marco Antonio Solis Vivas, Estabilización de las propiedades fotocatalíticas del ZnO en película delgada mediante nanopartículas de Au y Pt, Tesis, Universidad Nacional Autónoma de México, México D.F. 2012.

[2] M. Bizarro, E. Martínez-Padilla, Visible light responsive photocatalytic ZnO:Al films decorated with Ag nanoparticles, Thin Solid Films, 553 (2014) 179-183.



# Estudio de las propiedades ópticas de aleaciones de silicio nanoestructurado

Jenifer Salazar Hernández, Guillermo Santana, B. Marel Monroy Peláez

*Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en  
Materiales, México D. F., México  
e-mail: fqgny.1991@gmail.com*

El silicio nanoestructurado se ha estudiado desde hace ya algunas décadas por las diferentes aplicaciones que presenta éste en campos como la óptica y la fotónica. Una de las formas en las que se producen dichas nanoestructuras es por medio del crecimiento in-situ dentro de diferentes materiales que actúan como matrices. Anteriormente uno de los materiales más utilizados era el óxido de silicio (SiOx), sin embargo, el nitruro de silicio (SiNx) se convirtió en un material más óptimo por sus propiedades.

El presente trabajo tuvo como finalidad estudiar el comportamiento óptico y químico del material formado por nanocúmulos de silicio inmersos en una matriz de SiNx en forma de película delgada depositadas mediante la técnica de depósito químico en fase vapor asistido por plasma (PECVD) y se realizó un estudio comparativo con las películas de SiOx para observar las diferencias que radican entre éstos materiales.

Palabras clave: Silicio nanoestructurado, nitruro de silicio, PECVD, óxido de silicio.

Agradecimientos: Esta tesis fue realizada con el apoyo de los proyectos de CONACYT 179632 y 153948, principalmente a este último se le agrade la beca otorgada para la realización de este trabajo. Así mismo, se agradece a DGAPA-UNAM PAPIIT por los proyectos IN100914 e IB101612 y a SENER-CONACyT por el proyecto 151076, los cuales financiaron este trabajo. De igual manera, se agradece a los proyectos DGAPA-PAPIIT IN-100213 y CONACYT 99224 utilizados para llevar a cabo el análisis de RBS mediante el equipo Pelletron.

## Referencias:

- [1] X. Xu, L. Zhang, L. Huang, Q. He, T. Fan, Z. Yang, Y. Jiang, and Z. Li, "A comparison of structures and properties of SiNx and SiOx prepared by PECVD," *J. Non. Cryst. Solids*, vol. 358, no. 1, pp. 99–106, Jan. 2012.
- [2] A. Zelenina, S. A. Dyakov, D. Hiller, S. Gutsch, V. Trouillet, M. Bruns, S. Mirabella, P. Löffler, L. López-Conesa, J. López-Vidrier, S. Estradé, F. Peiró, B. Garrido, J. Blasing, A. Krost, D. M. Zhigunov, and M. Zacharias, "Structural and optical properties of size controlled Si nanocrystals in Si3N4 matrix: The nature of photoluminescence peak shift," *J. Appl. Phys.*, vol. 114, no. 18, p. 184311, 2013.
- [3] F. Iacona, G. Franzò, and C. Spinella, "Correlation between luminescence and structural properties of Si nanocrystals," *J. Appl. Phys.*, vol. 87, no. 3, p. 1295, 2000.



# Propiedades ópticas y eléctricas de películas delgadas de ZnO:Al obtenidas por rocío pirolítico ultrasónico

J. González, J.C. Alonso Huitrón, J.M. García León

*Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México  
e-mail: [jesus.gonzalez.gz@gmail.com](mailto:jesus.gonzalez.gz@gmail.com)*

En este trabajo se reportan las propiedades ópticas y eléctricas de películas delgadas de óxido de zinc impurificado con aluminio (ZnO:Al) obtenidas por el método de rocío pirolítico ultrasónico. Las películas fueron depositadas a partir de acetato de zinc dihidratado y acetyl acetato de aluminio disueltos en metanol y agua, y usando nitrógeno (N<sub>2</sub>) como gas de arrastre. Se obtuvieron los espectros de transmisión UV-vis de las películas depositadas bajo diferentes flujos de N<sub>2</sub>, y se midió su resistividad por el método de cuatro puntas. También se midieron sus espesores mediante perfilometría. Se observa un aumento en la transmitancia y una disminución en la resistividad por cuadro de las películas al aumentar el flujo de nitrógeno. A partir de este estudio se determinan las condiciones de depósito más adecuadas para utilizar estas películas como contactos conductores transparentes. Las propiedades como contacto conductor transparente (resistividad eléctrica=2.5 x10<sup>-3</sup> Ω cm, transmisión óptica~80%) de las películas depositadas en las condiciones óptimas encontradas en este estudio, son comparables a las obtenidas por el mismo método en otros laboratorios, y por otros métodos de depósito, tales como erosión catódica y ablación láser.<sup>1-5</sup>

Palabras clave: Óxido de zinc, películas delgadas, rocío pirolítico.

## Referencias:

- [1] Rozati, S. M. & Akesteh, S. Characterization of ZnO:Al thin films obtained by spray pyrolysis technique. *Mater. Charact.* **58**, 319–322 (2007).
- [2] Mondragon, H. *et al.* ZnO : Al thin films obtained by chemical spray : effect of the Al concentration. **193**, 52–59 (2002).
- [3] Castañeda, L. *et al.* Influence of aluminum concentration and substrate temperature on the physical characteristics of chemically sprayed ZnO: Al thin solid films deposited from zinc pentanedionate and aluminum pentanedionate. *Mater. Sci. Semicond. Process.* **13**, 80–85 (2010).



## Memorias 2do. Simposio de Estudiantes Asociados al IIM

- [4] Kim, Y. *et al.* Optical and electronic properties of post-annealed ZnO:Al thin films. *Appl. Phys. Lett.* **96**, 171902 (2010).
- [5] Gu, X. Q. *et al.* Optical and electrical properties of ZnO:Al thin films synthesized by low-pressure pulsed laser deposition. *Mater. Sci. Semicond. Process.* **14**, 48–51 (2011).



## **Influencia de la concentración de aluminio como dopante en las propiedades opto – electrónicas de películas delgadas de óxido de zinc.**

Alejandro Arana Trenado, Guillermo Santana, B. Marel Monroy Peláez

*Universidad Nacional autónoma de México, Instituto de Investigaciones en  
Materiales, México D. F., México  
email: ironjulius666@hotmail.com*

Las películas delgadas de ZnO impurificado son componentes importantes en la mayoría de las celdas solares de películas delgadas. Éstas requieren unos cuantos micrómetros de espesor, bajo consumo de material, técnicas simples de producción y alta productividad por depósito en grandes áreas. Con esto se busca obtener la mayor eficiencia posible y el menor costo. Las películas de ZnO impurificado sirven como frentes de contacto transparentes y conductivos, proveen propiedades ópticas como dispersión de la luz y subsecuentemente atrapando o mejorando la reflexión de la luz de nuevo en el contacto. Las películas de ZnO impurificado prometen más altas eficiencias de conversión de energía, mientras que el desarrollo de procesos tecnológicos provee una óptima calidad de película. La técnica a emplear para el depósito de éstas películas es rocío pirolítico (Spray – Pyrolysis). Esta técnica resulta económica y viable para obtener este material con la calidad necesaria para aplicaciones como TCO. Ya se ha comprobado la reproducibilidad y homogeneidad de las películas delgadas de ZnO depositadas por rocío pirolítico a una concentración constante de aluminio. El objetivo en este trabajo es optimizar la cantidad de aluminio que es posible incorporar en la estructura cristalina del ZnO, de forma tal que el aluminio favorezca la baja resistividad sin modificar la estructura cristalina del óxido y mantener así la transparencia del material. Se presentan resultados de análisis químico para verificar la cantidad de Al incorporado en las películas y difracción de rayos X para verificar la estructura cristalina del ZnO.

Palabras clave: ZnO, aluminio, rocío pirolítico, TCO.

### Agradecimientos:

Se agradece la asistencia técnica de Omar Novelo y Adriana Tejeda. Este proyecto fue financiado parcialmente por los proyectos PAPIIT IB101612 e IN100914, CONACyT 153948 y 179632, y SENER-CONACyT 151076.



## Memorias 2do. Simposio de Estudiantes Asociados al IIM

### Referencias:

[1] Transparent Conductive Zinc Oxide. Ellmer, Klaus. Ed. Springer. Berlin Heidelberg – New York. 2008.

[2] Chemical Solution Deposition Of Inorganic Films. Chopra, K. L. New Delhi, India.

[3] Zinc Oxide. Klingshirn, Claus F. Ed. Springer. Heidelberg Dordrecht London New York, 2010.



## Propiedades Tribológicas de Películas de NbN-Cu

R. Mirabal<sup>1</sup>, S.E. Rodil<sup>1</sup>, P. Silva-Bermudez<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México

email: [srodil@iim.unam.mx](mailto:srodil@iim.unam.mx), [mirabalroberto@yahoo.com](mailto:mirabalroberto@yahoo.com)

Este trabajo reporta el depósito de películas de NbN con inclusiones de Bi, las cuales se depositaron utilizando un sistema de dos magnetrones acoplados. Ambos blancos fueron de 2" de diámetro y se encendieron simultáneamente, pero usando potencias diferentes; 400 W DC para el Nb y 6, 10 y 20 W con RF para el Bi. Los recubrimientos fueron depositados sobre Si y acero M2 a una temperatura de 200 °C utilizando una mezcla de Ar/ N<sub>2</sub>, la presión de trabajo fue de 3 mTorr. La composición del recubrimiento se obtuvo mediante EDS; la morfología, estructura y dureza de los recubrimientos NbN-Bi también fueron estudiadas. El Coeficiente de Fricción (CoF) del NbN-Bi se midió mediante pruebas de Pin on Disk usando una carga de 5 N y una distancia de deslizamiento de 500 m. La dureza de los recubrimientos de NbN-Bi disminuyó con el incremento de la cantidad del Bi, y el CoF disminuyó de 0.7 (recubrimiento de NbN sin Bi) a 0.3, debido a la estructura laminar del Bi. Como el Bi tiene un punto de fusión bajo, las películas de NbN-Bi no pueden ser utilizadas para recubrir herramientas de corte. Se propone la inclusión de Cu en NbN, porque el Cu también es un metal suave pero con un alto punto de fusión. Se pretende reproducir los resultados obtenidos con la adición de Bi pero ahora con Cu, y de esta manera obtener un recubrimiento con bajo CoF y alto punto de fusión.

Palabras clave: Sputtering, NbN, Coeficiente de Fricción.

Agradecimientos: Esta investigación recibió financiamiento de la European Community Seven Framework Program (FP7-NMP-2010-EU-MEXICO) y el CONACYT bajo los acuerdos N° 263878 y 125141, respectivamente.

### Referencias:

[1] Holmberg, K. and A. Matthews, Coatings tribology: properties, mechanisms, techniques and applications in surface engineering. 2nd ed. Tribology and interface engineering series. 2009, Amsterdam ; Boston ; London: Elsevier Science. xv, 560 p., 3 p. of plates.

[2] Stone, D.S., et al., Adaptive NbN/Ag coatings for high temperature tribological applications. Surface & Coatings Technology, 2012. 206 (19-20): p. 4316-4321.



## Diodos Moleculares

Carlos Filiberto Montiel Tinajero<sup>1</sup>, Sergei Fomine<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México  
*e-mail: [fmontiel@iim.unam.mx](mailto:fmontiel@iim.unam.mx)*

Estudiamos el efecto de rectificación de corriente eléctrica en complejos orgánicos de transferencia de carga usando las herramientas de la química cuántica computacional. También documentamos la existencia del efecto y en dado caso investigamos su origen.

Relacionamos la estructura electrónica de los complejos con su eficiencia como diodos moleculares y logramos el diseño de un rectificador molecular con una eficiencia máxima.

Utilizamos la teoría de funcionales de la densidad para el estudio de las propiedades rectificadoras de complejos de transferencia de carga. Se utilizó el funcional PBE con corrección de dispersión, el cual ha mostrado dar excelentes resultados para la determinación de interacciones intermoleculares y es adecuado para estudiar las propiedades electrónicas de complejos orgánicos de transferencia de carga, además, describe acertadamente la estructura electrónica de metales de transición (electrodos), lo cual es importante para el cálculo de las curvas voltaje-corriente (I-V).

Para el cálculo de la RR es necesario conocer la curva I-V del diodo molecular. Para ello utilizamos un esquema basado en cálculos a primeros principios.



## **Autoensamblado de partículas coloidales con forma triangular**

Denisse Reyes<sup>1</sup>, Carlos Mendoza<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México  
*e-mail: dreyesa443@gmail.com*

Mediante simulaciones de Monte Carlo, realizamos el estudio de sistemas de partículas coloidales con forma triangular, dichas partículas no tienen grosor y la interacción entre ellas es de tipo esfera dura, pero ajustada a la geometría de las mismas. Primero llevamos a cabo un estudio sólo de dos triángulos inmersos en una suspensión coloidal para ver la influencia de las fuerzas de depleción en el acoplamiento de las partículas triangulares, es decir, que los triángulos se juntaran por completo sin partículas coloidales entre ellos y además se alinearan vértice con vértice, posteriormente estudiamos la influencia del número de triángulos en el ensamblado de los mismos.



## Los venenos y su capacidad oxidante: Un estudio teórico

E. Andrade<sup>1</sup>, A. Martínez<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en  
Materiales, México D. F., México  
e-mail: emma\_belem@hotmail.com

Las sustancias químicas reaccionan entre ellas. Una de las formas de interacción es mediante la transferencia de electrones. A este proceso se le conoce como reacción de oxidación-reducción o REDOX. Los venenos son sustancias que al entrar en contacto con un ser vivo le causan daños graves o en algunos casos hasta la muerte. Se cree que uno de los mecanismos de acción de los venenos es a través de procesos REDOX. En este trabajo se presenta un estudio basado en la química computacional de algunos venenos no proteínicos como el cianuro, la estricnina, el fluoroacetato de sodio, la tetrodotoxina y el sarín. Para analizar la capacidad REDOX se calcula la energía de ionización y la afinidad electrónica. Con estos datos se construye un mapa donador aceptor (MDA) de electrones, que es una herramienta muy útil para clasificar a las sustancias con respecto a su capacidad de donar o aceptar electrones. Este mapa se ha utilizado con éxito en el estudio de muchas sustancias antioxidantes.

Palabras claves: venenos, capacidad oxidante, química computacional.

### Referencias:

- [1] A. Martínez, M. A. Rodríguez-Gironés, A. Barbosa, M. Costas. Donator Acceptor Map for Carotenoids, Melatonin and Vitamins, *J. Phys. Chem. A.* 112 (2008) 9037-9042.
- [2] A. Martínez. Donator-Acceptor Map and Work Function for Linear Polyene-Conjugated Molecules. A Density Functional Approximation Study, *J. Phys. Chem. B.* 113 (2009) 3212-3217.
- [3] A. Martínez. Donator Acceptor Map of Psittacofulvins and Anthocyanins: Are They Good Antioxidant Substances? *J. Phys. Chem. B.* 113 (2009) 4915-4921.



# **Simulación de las propiedades electrónicas en estado basal y en estado excitado de dendrímeros hiperramificados con grupos donadores y aceptores de electrones**

J. Gutiérrez Flores<sup>1</sup>, A.E. Ramos Peña<sup>1</sup>, P. Guadarrama Acosta<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México*

En este proyecto se modelaron los espectros electrónicos de dendrímeros (moléculas hiperramificadas) con grupos aceptores y donadores de electrones. El estudio se realizó dentro de la teoría de los Funcionales de la Densidad con el modelo M052X/cc-pvdz. Para realizar el análisis se hizo uso de las energías de absorción y emisión en estado excitado, así como de los orbitales moleculares, de los momentos dipolares (estado basal y excitado) y del potencial electrostático molecular. Se buscó encontrar alguna correlación entre la arquitectura molecular y la distribución de carga en las moléculas. Basándose en la magnitud del momento dipolo en estado excitado, los resultados sugieren que se espera una mejor separación de carga para moléculas con grupos donadores y aceptores de electrones, reduciendo la posibilidad de recombinación del par electrón-hueco. Este resultado sugiere que este tipo de sistemas podrían ser usados como candidatos para aplicaciones fotovoltaicas. Asimismo se encontró que el disolvente juega un papel importante en los desplazamientos de Stokes, a mayor polaridad, los desplazamientos son mayores.

Palabras clave: dendrímeros, estados excitados, momentos dipolo



# Efectos de Adsorción de cúmulos de Ag, Au, Pt y Pd en la conductividad del grafeno

R. M. Del Castillo, L. E. Sansores<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México*  
*e-mail: roxanadelcastillo@ciencias.unam.mx*

Se presentan los efectos de adsorción en cúmulos metálicos sobre superficies de grafeno. Se realizó un estudio DFT con la aproximación PBE y pseudopotenciales para observar la adsorción de cúmulos de plata, oro, platino y paladio con  $n$  átomos ( $n = 1, 2, 3$  y  $4$ ). También analizamos la estructura electrónica y la conductividad de los sistemas. La conductividad fue calculada vía el modelo propuesto por Katsnelson y Geim [1] llamado “Frozen ripples”, donde los sitios de adsorción son los centros dispersores de nuestro sistema. En este modelo las corrugaciones microscópicas del grafeno serán tratadas como ondas controladas, creando un potencial de dispersión de largo alcance. La conductividad puede ser medida en términos de radios y alturas de las deformaciones creadas por los cúmulos adsorbidos.

Palabras clave: Grafeno, DFT, conductividad, “Frozen-ripples”.

Agradecimientos: Este trabajo fue financiado por una beca CONACyT.

Referencias:

[1] M. I. Katsnelson, A. K. Geim, *Phil. Trans. R. Soc. A*, **366**, 195-204 (2008).



## Estudio de cúmulos de oro con dos boros.

T. Castillo<sup>1</sup>, A. Martínez<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México

e-mail: [taniacastilloh@gmail.com](mailto:taniacastilloh@gmail.com); [martina@unam.mx](mailto:martina@unam.mx)

Los cúmulos de oro son de gran importancia en la actualidad debido a su importante uso en diferentes ramas de la ciencia tales como la medicina, la catálisis y el estudio de nuevos materiales en donde estos cúmulos son utilizados como sensores [1-2]. Los cúmulos de oro pueden adoptar diferentes geometrías en dos o tres dimensiones confiriéndoles distintas propiedades de gran interés en nanotecnología. Estas geometrías pueden ser jaulas planas o esféricas, o bien geometrías piramidales [3-4]. El hecho de que los cúmulos se presenten preferentemente en una estructura que en otra, tiene repercusiones importantes en sus propiedades químicas, ya que las estructuras planas resultan ser mejores aceptores electrónicos que las tridimensionales [4]. Los cúmulos de oro son reactivos frente a moléculas pequeñas como el CO, el O<sub>2</sub> y el C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>.

Últimamente, se ha centrado la atención en el estudio de las propiedades de cúmulos de oro con sustituciones de otros átomos como el boro [5]. Esto resulta de gran interés ya que ambos elementos son muy conocidos por formar, individualmente, cúmulos de geometrías planas a grandes tamaños. Estudios sobre las propiedades electrónicas de estos sistemas, revelan resultados muy interesantes a nivel de su capacidad de aceptar electrones. La presencia de átomos con diferente electronegatividad dentro del cúmulo, afecta su estructura y su capacidad de donar electrones. Los cúmulos de oro con un boro se vuelven mejores donadores electrónicos que sus cúmulos de oro equivalentes [5], esta propiedad se intensifica al agregar otro átomo de oro. Esto conlleva una modificación en la reactividad del cúmulo volviéndolo más reactivo frente a especiesceptoras de electrones.

Palabras clave: Cálculos DFT, cúmulos oro-boro, aceptores electrónicos.

### Referencias:

[1] M. Valden, X. Lai, D.W. Goodman, Onset of catalytic activity of gold clusters on titania with the appearance of nonmetallic properties, *Science* 281 (1998) 1647–1650.

[2] P. Schwerdtfeger, Gold goes nano-from small clusters to low-dimensional assemblies, *Angew. Chem.* 42 (2003) 1892–1895.

[3] (A) H. Häkkinen, U. Landman, Gold clusters (Au<sub>N</sub>, 2 < N < 10) and their anions, *Phys. Rev. B* 62 (2000) R2287; (B) H. Häkkinen, Atomic and electronic structure of gold clusters: understanding flakes, cages and superatoms from simple concepts, *Chem. Soc. Rev.* 37 (2008) 1847–1859.

[4] A. Martínez, Size matters, but is being planar of any relevance? electron donor-acceptor properties of neutral gold clusters up to 20 atoms, *J. Phys. Chem. C* 114 (2011) 21240–21246.



## Análisis conformacional y actividad antirradical de pigmentos omocromos

Y. Romero<sup>1</sup>, A. Martínez<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México  
e-mail: yanetrn@gmail.com

Los omocromos son pigmentos que se encuentran principalmente en artrópodos e insectos y son los principales productos obtenidos de la ruta metabólica del triptófano[1]. Este grupo de colorantes naturales, constituidos principalmente por la kinurenina, el ácido kinurénico, la 3-hidrokinurenina, la xantomatina y la omatina-D, abarcan tonalidades como el amarillo brillante, anaranjado, café, rojo e incluso púrpura y violeta. Tanto para la kinurenina como para la 3-hidrokinurenina, se han encontrado propiedades antioxidantes[2]. Sin embargo, estudios recientes en el campo de la neurología, han mostrado que la 3-hidrokinurenina presenta propiedades antirradicales; pero que al mismo tiempo, la presencia de esta molécula en procesos cerebrales podría estar relacionada con diferentes desordenes psiquiátricos[3].

A pesar de todos estos resultados, no existen análisis teóricos sobre la capacidad antirradical de los omocromos ni el mecanismo de reacción que les confiere tal propiedad. Por esta razón, este trabajo se centra en estudiar desde el marco teórico de la Teoría de los Funcionales de la Densidad (TFD), la capacidad antirradical de estos pigmentos. Para ello, se realiza un análisis conformacional de las estructuras geométricas de cada molécula y se estudian dos mecanismos de transferencia principales: transferencia electrónica y transferencia de átomo de hidrógeno. Los principales resultados indican que la transferencia electrónica cuando las moléculas se encuentran en un medio polar es energéticamente posible para la kinurenina, 3-hidroxykinurenina y la omatina D. La transferencia de átomo de hidrógeno es termodinámicamente posible y de igual manera que para la transferencia electrónica, la ommatina D resulta ser el mejor antirradical.

**Palabras clave:** omocromos, antirradical, transferencia electrónica, transferencia de átomo de hidrógeno, TFD.

**Agradecimientos:** Este trabajo fue financiado por CONACyT, a través de la beca de doctorado con registro 202990.

### Referencias:

[1] Linzen, B. The tryptophan to ommochrome pathway in insects. *Insect Physiol. Academic Press*, London UK, 1974, pp. 177-246.



## Memorias 2do. Simposio de Estudiantes Asociados al IIM

[2] Wadano, A.; Takenaka, Y.; Matumoto, M. 3-Hydroxykynurenine as a radical scavenger in the blowfly *Aldrichina graham*. *Insect Biochem. Molec. Biol.* **23**, No. 8, 1993, pp. 919-925.

[3] Colín-González, A. L.; Maldonado, P. D.; Santamaría, A. 3-hydroxykynurenine: An intriguing molecule exerting dual actions in the central nervous system. *NeuroToxicology*. **34**, 2013, pp. 189-204.



Memorias 2do. Simposio de Estudiantes Asociados al IIM

## Reacciones prohibidas de cicloadición de moléculas estrogénicas y fulerenos. Estudio teórico.

Citlalli Rios, Estrella Ramos, Roberto Salcedo.

*Universidad Nacional Autónoma de México. Instituto de Investigaciones en Materiales, México D.F., México.*

*e-mail: citriogo@yahoo.com.mx*

Las reacciones químicas que puede llevar a cabo el fullereno pueden invadir sectores prohibidos para otras sustancias orgánicas. Se sabe que en química orgánica las reacciones térmicas de cicloadición están prohibidas por las reglas de Woodward-Hoffman, sin embargo, en las simulaciones llevadas a cabo por nuestro grupo, hemos encontrado la grata sorpresa de que el fullereno si puede llevar a cabo éstas reacciones.

El epóxido de estradiol es conocido como el causante de la ruptura de DNA, que lleva al cáncer de mama que es un grave problema de salud pública en todo el mundo.

Se han llevado a cabo simulaciones de reacciones entre fullereno sustituido y epóxido de estradiol en diferentes medios, se ha encontrado que gracias a estas reacciones el epóxido de estradiol queda inhabilitado para causar daño sobre el DNA.

Basándose en esta información, es este trabajo se describen estas reacciones desde el punto de vista teórico, los resultados son tan prometedores que es posible proponer los derivados de fullereno como agentes farmacéuticos de prevención y tratamiento contra el cáncer de mama.

Palabras clave: cicloadiciones prohibidas, fulerenos, epóxido de estradiol.



## **Estudio experimental y simulacional para la remoción de contaminantes metálicos depositados en superficies conductoras mediante surfactantes**

María del Alba Pacheco Blas<sup>1</sup>, Héctor Domínguez Castro<sup>1</sup>, Margarita Rivera

<sup>1</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México  
*e-mail: [madelalba@gmail.com](mailto:madelalba@gmail.com)*

Actualmente la contaminación de suelos y aguas por metales pesados es un problema que busca resolverse ya que es un riesgo potencial para el ser humano.

Estudiamos surfactantes: catiónico, aniónico y biológico para analizar el efecto de remoción de contaminantes metálicos sobre superficies conductoras. En la parte experimental se contaminan superficies conductoras como grafito y el disco de cristal de cuarzo de una microbalanza QCM con  $\text{CdSO}_4$ ,  $\text{ZnSO}_4$  y se caracterizan mediante SEM y AFM. Después se introducen al surfactante y se estudia en la microbalanza de cuarzo el efecto de remoción del contaminante.

Paralelamente se realizan simulaciones de dinámica molecular de estos sistemas en el programa DLPOLY con la finalidad de encontrar propiedades tales como la tensión superficial y la distribución de densidad que podemos comparar directamente con el experimento.



## **Estudio teórico de los glucósidos AHV-alfa y beta empleando distintos mecanismos de transferencia para explicar variaciones experimentales para la inhibición del radical DPPH.**

M. Reina<sup>1</sup>, Y. Romero<sup>1</sup>, A. M. Martínez<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Investigaciones en Materiales, México D. F., México*  
*e-mail: mreina.2404@hotmail.com*

Se ha observado experimentalmente que dependiendo de las conformaciones  $\alpha$  ó  $\beta$  de algunos azúcares hay diferencias en la inhibición de ciertos radicales libres (DPPH, ROO y OH). En este trabajo se presenta el estudio teórico de los glucósidos AHV  $\alpha$  y  $\beta$  empleando distintos mecanismos de transferencia (electrónica, de átomo de hidrógeno (HAT) y de protones ( $H^+$ )). Además se estudiaron los centros de reactividad química con base en el análisis de las funciones de Fukui, los mapas de superficie de energía potencial y la adición de especies químicas explicando satisfactoriamente por estos métodos las diferencias observadas experimentalmente.

Palabras clave: radical DPPH, glucósido AHV, funciones de Fukui

Agradecimientos: Conacyt, número de beca 307727.

### Referencias:

- [1] Cumpstey Ian, On a so-called "kinetic anomeric effect" in chemical glycosylation, Org. Biomol. Chem. 2503 (2012) 10.
- [2] Krawczuk Paul, The anomeric effect, Baran Group Meeting (2005).



Visítenos en: [www.iim.unam.mx/simpest](http://www.iim.unam.mx/simpest)

Contacto: [symposium.estudiantes@iim.unam.mx](mailto:symposium.estudiantes@iim.unam.mx)

Síguenos en:



2do Simposio de Estudiantes del IIM



@simpestiim