



**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE
TLAXCALA**



**II Simposio Nacional de
Ingenierías Química y
Bioquímica Aplicadas**



Apizaco, Tlax, México; del 9 al 10 Septiembre de 2013





ÁREA ALIMENTOS



Elaboración de espumas utilizando diferentes proporciones de clara de huevo y pulque

César Antonio Ortiz Sánchez, Anselmo Osorio Mirón, Tania García Herrera, Rafael Uzarraga Salazar, Eduardo Hernández Aguilar, Luis Alberto Sánchez Bazán

Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Veracruzana, Prol. Ote. 6 No. 1009, Col. Rafael Alvarado Orizaba, Veracruz, C.P. 94340, México

ceortiz@uv.mx

En el presente trabajo se estudia la cinética de drenado de una espuma realizada a base de pulque y clara de huevo. Una espuma es un estado de dispersión que se puede definir como una dispersión de burbujas de gas (generalmente aire) suspendidas en el seno de un semisólido o de un líquido con una alta viscosidad. Durante su formación se produce una adsorción de moléculas reactivas en la interfase gas-líquido. En la preparación de la mayoría de las espumas se involucra generalmente un batido, el cual es un proceso dinámico altamente energético que se requiere para formar la interfase gas-líquido [1]. La albúmina de huevo es una de las proteínas más empleadas en la fabricación de espumas [2] y en alimentos normalmente se utilizan purés o bebidas, como por ejemplo el pulque, el cual es una bebida tradicional en los estados del centro de México, éste es producido a través de la fermentación del aguamiel que es extraído de diferentes especies de maguey.

La espuma fue elaborada a partir de pulque (P) y clara de huevo (CH) utilizando diferentes concentraciones y tiempos de batido. Se registró el volumen de líquido drenado durante 120 minutos y se determinó la densidad en los diferentes tratamientos. Para asegurar la homogeneidad de la materia prima se realizaron una serie de análisis físicoquímicos (sólidos totales, pH y °Brix). Se estudió el drenado y densidad para espumas elaboradas con una relación CH:P de 1:1, 1:2 y 2:1.

La cantidad de sólidos totales presentes en el pulque fue de 5.70 %, el pH de 4.16 y 4.83 °Brix. La figura 1 muestra la tendencia del drenado durante 120 minutos de reposo a la que se expuso la espuma, se observa que conforme aumenta el tiempo el volumen de drenado se incrementa.

El volumen de pulque drenado de la espuma elaborada con los diferentes tratamientos disminuye conforme se aumenta la concentración de clara de huevo. El aumento en la concentración de clara de huevo y el tiempo de batido provoca una disminución en la densidad de la espuma.

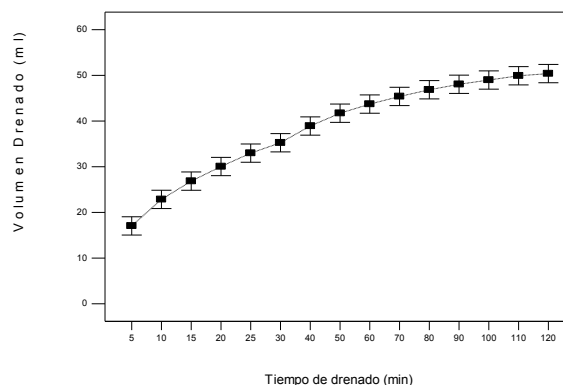


Figura 1. Tendencia del drenado durante 120 minutos de drenado.

[1] R.M. Arriaga-Orihuela, L.E. Maqueda-Hurtado, C.B. Calzada-Espinosa y F. Beristain, *Revista información tecnológica*. 2003, volumen 14, página 25-32.

[2] S. Badui-Dergal, *Pearson Education*. 2006. Página 516.



“Evaluación de la Adición de un Floculante para Sedimentar Impurezas en el Proceso de Elaboración de Piloncillo”

Gasga R.T.A., Verdejo P.A., Osorio M. A., Sánchez B.L.A., Sánchez B.I., Vicente M. J., Hernandez A.E.

Universidad Veracruzana, Facultad de Ciencias Químicas, Prolongación de Oriente 6 No. 1009 CP. 94340, Orizaba Ver., México. Tel./Fax (01 272) 72 4 01 20
gasga_tania@hotmail.com

El piloncillo o panela es un producto elaborado a partir de jugo de caña sin refinar y presenta una consistencia sólida moldeada de diversas formas. La eficiencia del proceso de producción de piloncillo está íntimamente relacionada con la etapa de sedimentación debido a que en esta se realiza la limpieza del jugo. La recuperación de sacarosa de una disolución es una función directa de la pureza de los jugos; así, el grado de limpieza alcanzado afectará la calidad del producto. El uso de floculante de una manera dosificada y apropiada es base de una operación de sedimentación óptima en proceso de elaboración de piloncillo. [1]

El proceso provee el mecanismo por medio del cual las impurezas insolubles suspendidas se convierten en flóculos que son convenientes para la separación por las unidades convencionales de sedimentación. [2] La cantidad de floculante que se utiliza en un trapiche, se ha determinado a través de la práctica y experiencia. Para la evaluación del efecto de la adición de un floculante comercial en la etapa de sedimentación para el proceso de elaboración de piloncillo se prepararon soluciones a diferentes concentraciones de floculante, utilizando un polímero de alto peso molecular, pretendiendo simular el momento en que éste es agregado en el tanque de sedimentación en un trapiche. Se llenaron probetas de 1000 ml de volumen con jugo de caña y se agregaron soluciones con concentraciones de floculante de 2.5, 3.0, 5.0, 7.5 y 10.0 gr, midiendo la altura inicial h_0 , dejándolas en reposo y determinando la altura h que ocupada la suspensión en función del tiempo. [3]

El estudio demostró que a menor concentración se tiene mayor rapidez de sedimentación y menor nivel de sedimentos. De la misma manera a partir de las condiciones en las que se realizaron los experimentos se pueden deducir relaciones para cualquier volumen de jugo de caña mediante estudios de escalamiento. [4]

Palabras Claves: Jugo de caña, Jugo clarificado, Floculación, Sedimentación, Piloncillo.

REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

- [1] Ghada A. Abdel-Razig, Isam A. Mohamed Ahmed, Elfadil E. Babiker & Abu ElGasim A. Yagoub. Effect of Addition of Separan at Different Concentrations as a Flocculants on Quality of Sugar Cane Juice, International Journal of Biological and Life Sciences, 2010, Vol 6, pp. 2.
- [2] Geankoplis Ch. J., Procesos de Transporte y Operaciones Unitarias. Ed. CECSA. México. 2006.
- [3] Primary Juice Flotation Clarification Analysis Data. The Andhra Sugars Limited, Unit 1 Tanuku 2011, pp.88-91
- [4] Mullapudi N. Flotation Clarification of Mill Juice. The Andhra Sugars Limited, Unit 1, Tanuku, India, 2011.





Obtención simultánea de CaO y de carbón activado a partir de cascarón de huevo y aserrín por tratamiento térmico.

Elda Jael Olivares Martínez^a, Gerardo César Díaz Castillo^b, José Antonio Guevara-García^a

^aLaboratory of Research in Bioinorganic and Biotechnology (LIByB). Apizaco, Tlaxcala. México.

^bFacultad de Ciencias Químicas e Ingeniería. Universidad Autónoma de Baja California.

Email: ejom_91@hotmail.com

Las cáscaras de huevo están compuestas de una red de fibras de proteína, asociada con cristales de carbonato de calcio (96% de peso de la concha), carbonato de magnesio (1%) y fosfato de calcio (1%), y también de otras sustancias orgánicas y agua. El carbonato de calcio (CaCO₃), el constituyente principal de la carcasa, es un cristal amorfo que se produce naturalmente, en forma de calcita (cristal hexagonal) [1]. La cáscara de huevo tiene dos membranas internas, que consiste en una mezcla de proteínas y glicoproteínas, con un alto contenido de enlaces disulfuro. Se ha estimado que alrededor del 70 al 75% de la estructura de la membrana se compone de proteínas [2].

En los últimos años, una gran cantidad de esfuerzo se ha llevado a cabo para la aplicación de la cáscara de los huevos como productos con valor agregado. Las principales aplicaciones incluyen un material de partida para la preparación de materiales biocerámicos de fosfato de calcio (por ejemplo, hidroxiapatita) [3], materiales compósitos [4], base para pigmentos para papel de impresión de inyección de tinta [5], y un adsorbente para la eliminación de contaminantes y colorantes de bajo costo en fase acuosa [6]. Además de catalizador para la síntesis de biodiesel [7] y otros productos como dimetilcarbonato [8], y la utilización de la membrana como supercapacitor [9].


En este trabajo, utilizamos el cascarón de huevo finamente pulverizado para preparar un catalizador para la síntesis de biodiesel, pero aprovechando la misma reacción de calcinado en que se produce el CaO, para sintetizar carbón activado a partir de harina de aserrín, utilizando como agente activador los gases con alto contenido en H₂S que se desprenden del calcinado del cascarón. El H₂S ha sido reportado anteriormente como un agente activante para obtener carbón activado [10].

La co-síntesis se realizó en crisoles concéntricos conteniendo cada uno una muestra pesada de cada material. Los crisoles se procesaron dentro de una mufla con un programa de temperaturas de tres rampas, hasta alcanzar los 700 °C. Se utilizó la adsorción con azul de metileno en solución acuosa, para estudiar el equilibrio de adsorción tanto del CaO como del carbón activado y caracterizarlos en sus propiedades texturales de poro. Los experimentos de capacidades de adsorción de azul de metileno se determinaron mediante el uso de un método por lotes descrito previamente [11].

Referencias

- [1] Tsai W.T., Yang J.M., *et al. Bioresource Technology*. **2006**, *97*, 488–493.
- [2] Oliveira D.A., Benelli P., Amante E.R. *Journal of Cleaner Production*. **2013**, *46*, 42–47.
- [3] Goloshchapov V., Kashkarov M., *et al. Ceramics International*, **2013**, *39*, 4539–4549.
- [4] Lungea S., Thakre D., *et al. Journal of Hazardous Materials*. **2012**, 161–169.
- [5] Yoo S., Hsieh J.S., Zou P., Kokoszka J. *Bioresour. Technol.* **2009**, *100*, 6416–6421.
- [6] Murakami F.S., Rodrigues P.O., *et al. Cienc. Tecnol. Aliment.*, **2007**, *27*(3), 658–662.
- [7] Boroa J., Deka D., Thakur A. J. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, **2012**, *16*, 904–910.
- [8] Gao Y., Xu C. *Catalysis Today*. **2012**, *190*, 107–111.
- [9] Yu H., Tang Q., *et al. Journal of Power Sources*, **2012**, *206*, 463–468.
- [10] Koe L., Tong D. *Journal of The Institution of Engineers*, **2005**, *45*, 4.
- [11] Tsai W.T., Yang J.M., *et al. Bioresour. Technol.* **2006**, *97*(3), 488–493.





Aprovechamiento de los residuos de orégano (*Origanum vulgare*) como soporte en la producción de tanasa fúngica

Salvador Vega Vicente^a, *Mario Cruz Hernández*^a, *Armando Robledo Olivo*^b.

^a Universidad Autónoma Agraria Antonio Narro. Calzada Antonio Narro # 1923. Col Buenavista, Saltillo, Coahuila. México C.P. 25315. Departamento de Ciencia y Tecnología de Alimentos. ^b Universidad Autónoma de Coahuila.

Blvd V. Carranza e Ing Cárdenas s/n. Col. República.

E-mail: salvadorvega03@gmail.com

La tanasa es una enzima capaz de hidrolizar los enlaces éster del ácido tánico. Los extractos con actividad tanasa son usados actualmente en la industria alimenticia para disminuir concentraciones elevadas de taninos responsables de efectos no deseables en el procesamiento de alimentos, tales como, la turbidez del té instantáneo o de los jugos de frutas. La tanasa tiene varias aplicaciones potenciales entre las cuales tenemos: la industria del vino para mejorar la calidad del mismo, esta enzima también podría usada para disminuir los efectos antinutricionales de los taninos, cuando estos están presentes en algunos forrajes. Por lo que el presente estudio demuestra la posibilidad de uso de los residuos orgánicos como lo son los del orégano.

El objetivo de éste trabajo fue evaluar el potencial uso del residuo de orégano (*Origanum vulgare*), como soporte y sustrato en la fermentación por *Aspergillus niger* LR aisladas de residuos de leche para la producción de tanasa y ácido gálico.


Para la producción de la enzima se empleó la cepa *A. niger* (Colección DCTA-UAAAN). El orégano fue tratado previamente para uso como soporte inerte [1]. Al material homogenizado, se le determinó el índice de absorción de agua (IAA) y el punto crítico de humedad (PCH) [2]. Para el crecimiento fúngico sobre el soporte sólido, se colocaron 5 g de residuos de orégano y 11.6 mL del medio mínimo de sales Czapek-Dox, enriquecido con 0.03 g de melaza y 0.03 g ácido Tánico por gramo de soporte. El medio fue inoculado con 2×10^7 esporas de *A. niger* por gramo de soporte y se monitoreo la fermentación a 6 días, evaluando cada 24 h. Para la extracción enzimática se utilizo 40 mL una solución amortiguadora acetato sódico 50 mM (pH 6.0). La determinación la actividad tanasa se evaluó mediante el método de rodanina metanólica [3]. Una unidad de actividad tanasa fue definida como la cantidad de enzima requerida para liberar un μmol de ácido gálico por minuto, bajo las condiciones del ensayo. La caracterización del soporte mostró valores de IAA y PCH de 6.8g gel/g soporte seco y 11.59% respectivamente. La producción de actividad tanasa presentó los mayores niveles a las 24hrs con una concentración enzimática de 39ppm, empleando melaza y A. tánico en 0.13g por g de soporte solido como fuente de carbono.

En conclusión, los valores de IAA y PCH indican la viabilidad de emplearse como soporte en la fermentación en estado sólido, debido a sus capacidades de retención y modificación del contenido de humedad. El orégano puede ser una nueva fuente de obtención de tanasa y ácido gálico, debido a su contenido de polifenoles, dándole un valor agregado al residuo, por lo tanto el aprovechamiento de estos residuos, reduciría costos al no desarrollar métodos de aislamiento ya que se ha demostrado que en este sistema de fermentación la tanasa es completamente extracelular, como muchas otras enzimas producidas en FMS.

[1]. Mussatto S.I., Aguilar C.N., Rodriguez L.R., Teixeira J.A. 2009. *Journal of Molecular Catalysis B: Enzymatic*, (2009) 59(1-3), 76-81.

[2]. Robledo A, Aguilera-Carbó A, Rodriguez R, Martinez JL, Garza Y, Aguilar CN. *J Ind Microbiol Biotechnol* (2008) 35:507–513.

[3]. Sharma, S., Bhat, T. K. & Dawra, R. K. *Analytical Biochemistry* (2000) 279(1):85-89.



Elaboración y caracterización fisicoquímica de yogurt adicionado con un concentrado de fibra dietaria de bagazo de carambola

Guadalupe Vivar Vera, Luis Alberto Sánchez Bazan, José Vicente Martínez, Nayeli Gutiérrez Casiano, Tania García Herrera, Osbaldo Hernández Guevara

Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Veracruzana, Prol. Ote. 6 No.1009, Col. Rafael Alvarado Orizaba, Veracruz, C.P. 94340, México

gvivar@uv.mx

Se ha demostrado recientemente el potencial que tiene el concentrado de fibra dietaria de bagazo de carambola (CFDBC) como una fuente importante de compuestos bioactivos (fibra dietaria y polifenoles) [1]. Es por esto, que la adición del CFDBC a productos elaborados para el consumo representa un campo a explorar viable para contribuir en el desarrollo tecnológico de productos funcionales en beneficio de la salud humana.

El objetivo del presente trabajo fue determinar el tipo de leche (light, descremada y entera) en la elaboración de un yogurt batido; así como el punto en el proceso (antes o después de la inoculación) para la adición del CFDBC mediante la determinación de sus propiedades fisicoquímicas (acidez, pH, color, densidad, humedad, sinéresis) durante el almacenamiento.

El método empleado para obtener el CFDBC fue el reportado por Pantaleón (2012), y en la elaboración de yogurt se siguió el procedimiento experimental sugerido por Tamime y Robinson [2]; la adición del CFDBC se realizó antes (AI) y después (DI) de la inoculación utilizando un cultivo láctico liofilizado marca Jointec 203 con bacterias lácticas *Streptococcus thermophilus* y *Lactobacillus bulgaricus*, y evaluando las propiedades fisicoquímicas de las muestras en tiempo 0, y durante 7 y 14 días de almacenamiento. El diseño experimental fue un 2x3x3 (AI y DI, 3 tipos de leche y 3 réplicas).

Los resultados indican que la adición del CFDBC tiene principalmente un impacto significativo ($p < 0.05$) en el pH y la acidez del yogurt; el pH disminuyó mientras que el contenido de ácido láctico incrementó (Figs 1 y 2). Esta tendencia también fue observada por efecto del tiempo de almacenamiento además de un aumento significativo en la sinéresis de las muestras. Lo anterior sugiere cambios estructurales importantes provocados por la interacción de la fibra con los agregados de caseína del yogurt, así como a un efecto sinérgico del CFDBC y del yogurt sobre el metabolismo del microorganismo. Por otro lado, se encontró que durante el proceso de elaboración del yogurt la incorporación del CFBC se debe hacer después de la inoculación empleando leche entera para su manufactura.

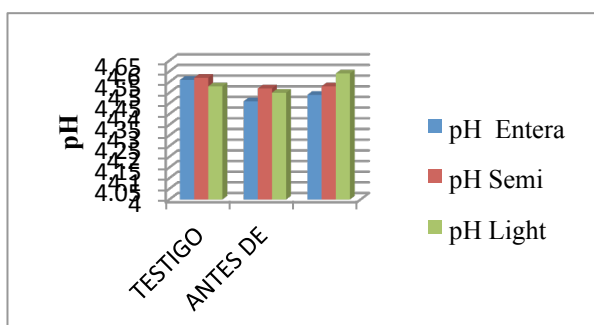


Figura 1. Efecto de la adición de fibra sobre el pH de las muestras A.I y D.I, para los tres tipos de leche evaluados.

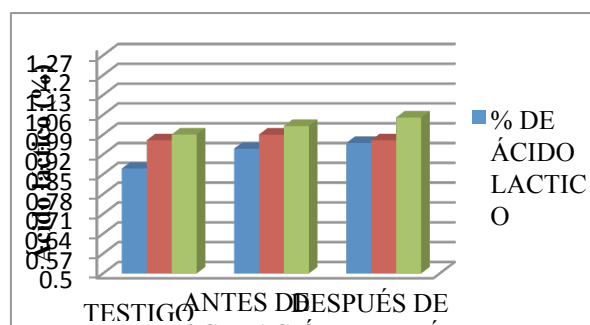


Figura 2. Efecto de la adición de fibra sobre % de ácido Láctico de las muestras A.I y D.I, para los tres tipos de leche evaluados.

[1] Pantaleón Velasco, M. R. (2012). Obtención y caracterización de un concentrado de Fibra Dietaria a partir de bagazo de carambola (Averrhoa carambola L.). Tesis de Maestría. Instituto Tecnológico de Tuxtepec. 110 pags.

[2] Tamime, A. Robinson, R. Yogurt Ciencia y Tecnología. Ed. Acribia, Zaragoza España. 1991.



Valoración del uso potencial de mosto para la obtención de un alimento funcional.

Alma Delia Román-Gutiérrez^{1,*}, María Angélica Gutiérrez Nava², Laura Jacqueline Gutiérrez Osnaya¹ y Edith Angelina Vásquez Siordia¹

¹Área Académica de Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Ciudad Universitaria Carretera Pachuca – Tulancingo Km. 4.5. s/n Col. Carboneras, Mineral de la Reforma, Hidalgo. Tel: (771)7172000 ext. 2514. E-mail: aroman@uaeh.edu.mx, almadeliaroman@yahoo.com.mx.

²Laboratorio de Biotecnología Departamento de Sistemas Biológicos Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Xochimilco Tel: 54.83.70.03 Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Xochimilco

Se analizó la viabilidad del mosto de malta de cebada para utilizarse como materia prima en la creación de un alimento funcional. Mediante análisis proximal, cuantificación de proteínas y aminoácidos, vitaminas, azúcares reductores y totales, así también se obtuvo el poder diastásico para determinar la calidad de la malta. La cantidad de azúcares sencillos en la cebada aumenta considerablemente cuando el grano es sometido al proceso de malteado o germinado debido a la hidrólisis del almidón que produce, entre otros azúcares, maltosa y glucosa.

La principal función del malteado es transformar las reservas alimenticias del grano, principalmente almidón insoluble y proteína. Antes de laborar el mosto, la malta fue triturada con la única finalidad de fragmentar el grano, después se introdujo en un matraz y se mezcló a una temperatura de 65-70°C por un lapso de 2 horas con agitación, a una proporción de 1:3 condiciones establecidas por Jaén (2010)¹.

Los resultados obtenidos del análisis de la malta de cebada mostraron un elevado poder diastásico, un porcentaje de humedad de 9.3 ± 0.5 , cenizas de 2.7 ± 0.0 , proteína de 11.8 ± 0.5 , grasa de 0.9 ± 0.0 , fibra de 1.7 ± 0.0 y carbohidratos de 75.1 ± 0.5 , el análisis del mosto en cuanto a azúcares totales es de 180.42g/L y de azúcares reductores 58.9g/L.

Estos resultados muestran que el mosto presenta un alto contenido de carbohidratos y proteínas con cantidades importantes de ácido glutámico (17.7 g/100g de proteína) y leucina (7.6 g/100g de proteína), en base a vitaminas la más representativa es la piridoxina (1.72 mg/100g) y la niacina (1.54 mg/100g), por lo que se demuestra que es mosto de malta de cebada puede ser utilizado como materia prima debido a sus composición nutrimental.

¹Jaén, E.E. (2010). Usi de malta caramerlo para la elaboracion de una cerveza artesanal. Tesis de Licenciatura. Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo. Mexico





ÁREA AMBIENTAL

ÁREA AMBIENTAL



Implementación de una metodología económica y accesible para la biorremediación del colorante índigo carmín.

José Luis Gil^a, Aida Solís^b, Myrna Solís^c, Herminia I. Pérez^b, Norberto Manjarrez^b

^aUniversidad Politécnica de Morelos, ^bUniversidad Autónoma Metropolitana, Unidad Xochimilco, ^cCentro de Investigación en Biotecnología Aplicada, IPN.

En general, la presión que ejercen los grupos de interés o stakeholders, tanto internos como externos, sobre las micro y pequeñas lavanderías textiles es muy débil, por lo que estas no adoptan prácticas de responsabilidad social corporativa, ni implementan procesos para eliminar o minimizar los contaminantes que generan. Las acciones del gobierno y de la sociedad encaminadas a motivarlas u obligarlas son mínimas. La competitividad de las lavanderías textiles se sustenta en el precio, a los clientes no les interesa si las empresas han emprendido o no, acciones para reducir el impacto ambiental; los propietarios no tienen interés en hacer inversiones en gestión ambiental, consideran que esta inversión afectará sus beneficios y su competitividad, pues no cuentan con los recursos técnicos y económicos necesarios para lograrla. Por lo que en esta propuesta se plantea la implementación de una metodología sencilla, económica y amigable con el ambiente para el posible tratamiento de los efluentes de las micro y pequeñas lavanderías textiles.

La presente investigación considera el uso de materiales vegetales prácticamente de desecho como cáscaras y hojas, por lo que solo involucran el costo de recuperación. Se utilizaron las cáscaras (cas.) y hojas de diversas frutas y vegetales (Figura 1), como fuente de biocatalizadores para la degradación del colorante índigo carmín (IC). Dichos materiales se molieron con agua, en una licuadora, posteriormente la mezcla se centrifugó. Al sobrenadante se le agregó el IC para tener concentraciones finales de 500 y 1000 ppm, la mezcla se agitó magnéticamente por 24 h.

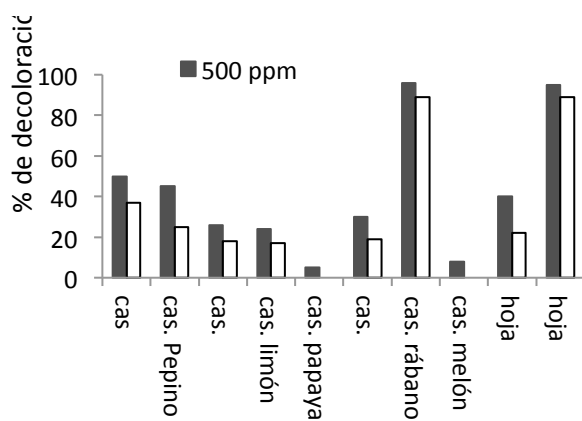


Figura 1. Decoloración de índigo carmín utilizando extractos

de cáscaras y hojas de vegetales como fuente de biocatalizadores.

En la figura 1 se observan los resultados, donde todos los materiales decoloraron al IC, excepto las cáscaras de papaya y melón. Los más interesantes son la cáscara de rábano y las hojas de cebollita, ya que prácticamente decoloran por completo 500 ppm de IC, así como más de un 90% de 1000 ppm de IC. Las desventajas de la cáscara de rábano es que esta se produce en muy baja cantidad, ya que se consume con cáscara. Le sigue en capacidad de decoloración la cáscara de chícharo, la cual si se desecha, por lo que junto con las hojas de cebollita y rábano tienen una potencial aplicación para la degradación de IC.

La importancia de la metodología propuesta radica en la aplicación de los procesos de degradación, para mejorar la calidad de los efluentes contaminados, utilizando pocos recursos económicos.

[1] M.C.S. Abreu, F. de Castro, F. de Assis Soares, J.C.L. da Silva Filho, *J. Clean. Prod.* **2012**, *20*, 119-126.

[2] G. Kassinis, N. Vafeas, **2006**, *Acad. Manag. J.* *49*, 145-159.



Uso de Nanotubos de Carbono para Reducir la Toxicidad de un Pesticida

Nezdira de León-Mena^a, Sonia Y. Silva-Belmares^a, Lucero Rosales-Marines^b, Guadalupe de la Cruz Galicia^a, Nancy V. Pérez-Aguilar^b

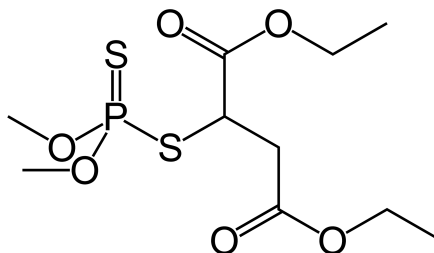
^aCuerpo Académico de Químico Farmacobiólogo, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Coahuila, Blvd. Venstiano Carranza sin número, Saltillo, Coahuila, México, ^b Cuerpo Académico de Ingeniería Química, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Coahuila, Blvd. Venstiano Carranza sin número, Saltillo, Coahuila, México


Email del autor para correspondencia: nancyperez@uadec.edu.mx

La vulnerabilidad de los ecosistemas a la exposición por compuestos químicos depende de varios factores, como el destino y transporte de los compuestos liberados, la complejidad del sistema y la respuesta de los organismos expuestos a estas sustancias. La ecotoxicología ha proporcionado las herramientas para valorar los efectos de diferentes sustancias químicas, al desarrollar bioensayos o ensayos de ecotoxicidad, en los que se utilizan organismos en distintas fases de desarrollo como indicadores ecológicos, por ejemplo, las especies *Lymnaea peregra*, *Chironomus prasinus*, *Daphnia magna* y *Artemia salina*. La selección adecuada del indicador ecológico para los ensayos de ecotoxicidad es muy importante, aunque la variedad de especies disponibles actualmente para estos ensayos es muy limitada [1-2].

En esta investigación se presentan resultados preliminares de la toxicidad de malatión, un pesticida organofosforado, sobre *A. salina*, además de evaluar el uso de nanotubos de carbono de pared múltiple (MWCNT) y nanotubos de carbono oxidados (MWCNT-ox) para reducir el efecto de toxicidad de este pesticida. El malatión es un insecticida organofosforado sintético (Figura 1), de aspecto líquido incoloro a pardo amarillento con olor característico a ajo. Los usos principales son erradicar insectos en cosechas agrícolas y en jardines. El malatión entra al ambiente principalmente cuando se rocía sobre cosechas agrícolas. El método de *A. salina* es un ensayo simple, rápido, económico, confiable y aceptado por la EPA (Environmental Protection Agency, U.S) para evaluar la toxicidad de diferentes compuestos químicos en el medio ambiente [3]. *A. salina* es un crustáceo sensible a una amplia variedad de compuestos con actividad biológica y de muy diversas estructuras químicas. Este organismo es usado para medir la contaminación ambiental y además para correlacionar la toxicidad que podría tener en plantas y animales. Los resultados preliminares han mostrado que la reducción del riesgo de toxicidad del malatión usando nanotubos de carbono de pared múltiple, ya que la concentración letal media, CL₅₀ se incrementó desde 232 ppm a una concentración mayor de 1000 ppm.

Figura 1. Estructura química del malatión



- [1] Sánchez-Argüello, P. “Valoración ecotoxicológica de la contaminación de origen agrario: incorporación de bioensayos en los protocolos de evaluación del riesgo ambiental”. *Tesis de Doctorado*. Universidad Complutense de Madrid. 2002.
 - [2] Pascoe, D., Wenzel, A., Janssen, C., et al. The development of toxicity tests for freshwater pollutants and their validation in stream and pond mesocosms. *Water Res.* **2000**, 34: 2323-2329.
 - [3] Environmental Protection Agency. *Methods for Measuring the Acute Toxicity of Effluents and Receiving Waters to Freshwater and Marine Organisms*. Fifth Edition. U.S., October 2002.
- 

Aprovechamiento de residuos agrícolas para producción de biogás como energía alternativa.

Chicatto G. Vanesa^a, Solís O. Myrna^a, Teniza G. Ogilver, Cabrera B. Lucía.
Instituto Politécnico Nacional, Centro de Investigación en Biotecnología Aplicada, Tlaxcala
ibq.v.chicatto@gmail.com

Introducción. La combustión de combustibles fósiles provoca el incremento de los niveles de CO₂ atmosférico que se relaciona directamente con el cambio climático. Los biocombustibles como el biogás, producidos de biomasa de plantas o desechos orgánicos puede ayudar a reducir la dependencia del petróleo y la emisión de gases de efecto invernadero [1]. El biogás tiene como componentes mayoritarios son el metano (CH₄) y el dióxido de carbono (CO₂). Se genera por la descomposición anaeróbica de sustratos orgánicos por un consorcio de microorganismos que incluyen bacterias fermentativas y arqueas metanogénicas [2].

El objetivo del presente trabajo fue evaluar el uso residuos agrícolas de jitomate y estiércol de ganado bovino para la producción de biogás como energía alternativa.

Metodología. Se diseñaron digestores anaerobios con un volumen de trabajo de 2.4 L, el proceso se desarrolló a temperatura mesofílica de 30 ± 2 °C, durante un tiempo de digestión de 2.5 meses. El sustrato para el proceso fue un 50% (porcentaje en peso) residuos de plantas de jitomate (hojas, tallos, jitomates) y como co-sustrato estiércol de vaca en un 50%, para generar un 10% de sólidos totales, después de la molienda del sustrato se hace un ajuste de pH inicial a 7.5. Se realizaron análisis quincenales de pH, sólidos totales (ST), sólidos volátiles (SV). Se determinó el contenido de metano en biogás y los ácidos grasos volátiles (AGV) por medio de cromatografía de gases (CG). El residuo al final de la digestión se analizó para coliformes totales, coliformes fecales, *Salmonella* y fitotoxicidad [3].

Resultados. La figura 1 muestra el comportamiento del pH, producción de biogás y de metano. El valor inicial de pH fue de ajustado a 7.52 y se mantuvo entre el intervalo de 7.51 - 7.75. La producción de biogás y metano fue constante y desde el día 15 ya se presentaba una cantidad apreciable de metano, teniendo su mayor valor al día 45 con 1.34 L. La producción total fue 8.08 L of biogás con 1.93 L de metano.

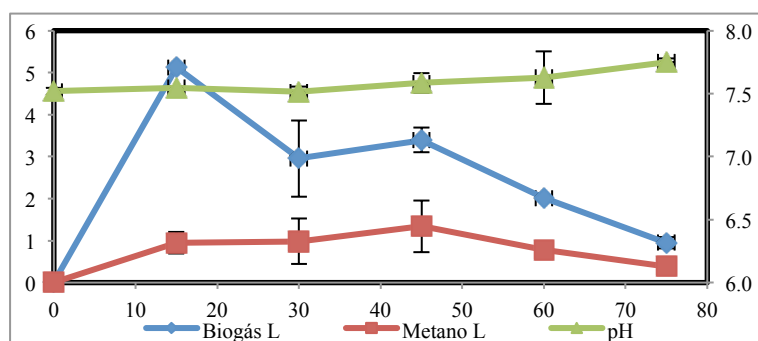


Fig.1. Comportamiento del digestor, pH, producción de biogás y metano en litros.

El NMP de coliformes totales en el digestor fue de 460 y no hubo presencia de coliformes fecales y *Salmonella*. El residuo digerido no presenta fitotoxicidad al 5% en pruebas de semillas de lechuga

[1] R. Chandra, H. Takeuchi, T. Hasegawa, *Renew Sust Energ Rev*, **2012**, 16, 1462-1476.

[2] N. Krakat, S. Schmidt, P. Scherer, *Appl Environ Microbiol*, 2010, 76, 6322-6326.

[3] B. Young, N. Riera, M. Beily, P. Bres, D. Crespo, A. Ronco, *Ecotox Environ Safe*, **2012**, 76, 182-18.



La co-digestión de vísceras de conejo y estiércol de cabra para la producción de metano

Teniza Ogilver, Chicatto Vanesa, Bustos Edgar E., Reyes Diego O., Solís Myrna, Ocaranza Erik

^a Centro de Investigación en Biotecnología Aplicada-IPN, Tlaxcala, Tlaxcala, 90000.

^b Colegio de Estudios Científicos y Tecnológicos del estado de Tlaxcala-CECyTE, Reforma 10 Apetatitlán, Tlaxcala, México.

Jocsan1998@hotmail.com , myrobotlx@yahoo.com.mx

Introducción. La digestión anaerobia (DA) es un proceso en cual los sustratos orgánicos son degradados en ausencia de oxígeno por actividades bacterianas vía enzimática, produciendo biogás que puede ser usado como una fuente de energía renovable ya que sus principales componentes son metano (CH₄) y dióxido de carbono (CO₂). Co-digestión es la digestión simultánea de una mezcla homogénea de dos o más sustratos. Se ha observado recientemente que con una variedad de sustratos se hace más estable el proceso DA e incrementa la eficiencia del proceso. La situación más común es cuando el sustrato principal en mayor cantidad es mezclado y digerido con otro sustrato o una variedad de estos en menor cantidad (1). El uso de co-sustratos mejora la producción de biogás de la DA debido al sinergismo positivo establecido en el medio de digestión y el suministro de nutrientes que faltan por los co-sustratos (2). Hay trabajos en los cuales se realiza co-digestión de dos o más residuos obteniendo Buenos resultados en el contenido de metano (3). El objetivo de este estudio fue estudiar el proceso de DA usando vísceras de conejo en codigestión con estiércol de cabra y aserrín para incrementar la producción de metano.


Metodología. Ocho digestores de polietileno tipo batch de 120 litros, fueron armados para un volumen de trabajo de 80 litros y temperatura mesofílica de 27 + 2 0C; en cuatro de estos se ajustó el pH con Na₂CO₃, en dos de ellos se incrementó la relación carbono-nitrógeno (C/N); en dos de los cuatro restantes solo se incrementó la relación (C/N) y los dos restantes fueron el control. Los digestores estuvieron en invernadero por 75 días; y fueron alimentados con 90% (peso) de vísceras de conejo como sustrato y 10% (peso) de estiércol de cabra como co-sustrato, además de la adición de aserrín para incrementar la relación (C/N), para generar al final una carga de 10% de sólidos totales. Los análisis los análisis fueron determinados cada semana según la NMX-AA-034-SCFI-2001, sólidos volátiles (SV) y pH. La relación C/N con un analizador elemental Perkin Elmer 2400. La producción de biogás fue medida por “el método de desplazamiento del líquido”(4). El contenido de metano en el biogás producido y los ácidos grasos volátiles (AGVs) del digestato fueron determinados por cromatografía de gases (CG).

Resultados.

Los digestores en los cuales fue ajustado el pH, este oscilo entre 6.89-7.4, mientras que el pH de los digestores control y en los que solo se incrementó la relación C/N este parámetro oscilo entre 5.7-6.4 durante el proceso. La formación de metano fue más rápida en los digestores control y en los que se incrementó la relación C/N, a partir del día 14 y hasta el final del proceso, con una producción total de metano de 39.53 mientras para el digestor donde se ajustó el pH la producción total de metano fue 19.59.

Conclusiones. Lo más importante encontrado en esta investigación es que las vísceras de conejo usadas como sustrato en codigestión con estiércol de cabra pueden producir metano. La mezcla de vísceras de conejo y estiércol de cabra, al ajustar el pH al parámetro recomendado de 6.8-7.2, el proceso de co-digestión se ve alterado con la disminución en la producción de biogás y metano.

Referencias.

- 1.-Braun. R. [http://www.novaenergie.ch/iea-bioenergytask37/](http://www.novaenergie.ch/iea-bioenergytask37/Dokumente/final.PDF) Dokumente/final.PDF. **2002**; Access on Nov. 7th, 2007.
 - 2.-Mata-Alvarez, J.; S. Mace; P. Llabres. *Bioresource Technology*. **2000**; **74**: 3-16.
 - 3.- Guangqing L., Ruihong Z., Hamed M., Renjie D. *Bioresource Technol.* **2009**; **100**(21): 5103-5108.
 - 4.- Yetilmezsoy, K and S. Sakar. *J. Hazardous Materials*. **2008**; **153**:532-543
- 



Uso de grasa láctea residual de LICONSA para producción de Biodiesel

Ana Maria Lumbreras García^a, Bunfilio Eduardo Ramos Cortés^a, José Antonio Guevara-García^a

^aLaboratorio de Investigación en Bioinorgánica y Biotecnología (LIByB). Fac. de Ciencias Básicas, Ingeniería y Tecnología. Universidad Autónoma de Tlaxcala, Campus Apizaco, P.O. Box 140, 90300. Apizaco, Tlaxcala. México.

Email: amlumbreras@gmail.com

El biodiesel se obtiene mediante transesterificación de aceites y grasas que provienen principalmente de granos y semillas [1]. El reto actual es la de utilizar fuentes de aceites y grasas naturales que no interfieran con la producción de alimentos o requieran de grandes extensiones de terreno para cultivo de plantas [2].

El objetivo de este trabajo es obtención de biodiesel a partir de una grasa láctea residual. Se utilizó una grasa residual de la planta de LICONSA en el estado de Tlaxcala. Se caracterizaron las propiedades fisicoquímicas de humedad, rancidez hidrolítica, acidez, índice de iodo, y saponificación [3].

Posteriormente se esterificaron los ácidos grasos libres por reacción en reflujo en medio ácido con H₂SO₄. Se substituyó el ácido con catalizador Amberlita IR 124 para realizar la reacción en fase heterogénea. Una vez comprobada la presencia del éster de los ácidos grasos se obtuvo el biodiesel por el método convencional utilizando una mezcla de hidróxido de sodio en etanol anhidro a reflujo.

Posteriormente, se substituyó el hidróxido de sodio por CaO obtenido de cascarón de huevo, para la reacción de transesterificación [4]. Los productos de esterificación y transesterificación se caracterizaron por espectroscopía de IR y Masas.


La determinación de la calidad de biodiesel obtenido se hizo de acuerdo a las normas internacionales [5]. Actualmente se trabaja para llevar a cabo la producción de biodiesel en flujo continuo, con radiación de microondas, y en la automatización y control del proceso a través de instrumentación con interface hombre-máquina.

Palabras Clave: *biodiesel, grasas lácteas, amberlita, cascarón de huevo.*

Referencias

- [1] Ma Fangrui, Hanna Milford A. *Bioresource Techn.* **1999**, *70*, 1-15.
- [2] Banković-Ilić Ivana B., Stamenković Olivera S., Veljković Vlada B. *Renewable and Sustainable Energy Rev.* **2012**, *16*, 3621– 3647.
- [3] Lapuerta M., Fernández J.R., de Mora E.F. *Energy Policy.* **2009**, *37*, 4337–44.
- [4] P Khemthong., *et al. Catal. Today.* **2012**, doi:10.1016/j.cattod.2011.12.024.
- [5] ASTM. 2013. Sitio de internet: <http://www.astmbiodieselfuel.com/oppt/greenmeetings/index.htm>





Estudio computacional de derivados del antiparasitario Nitazoxanida con ToxAlerts y Ochem para administrar e investigar las propiedades toxicas y farmacológicas de sustancias bio-activas

Thomas Scio^a, Jorge Lozano-Aponte^a, José Antonio Guevara-García^b, Eduardo M. Salinas-Stefanon^c, Sergii Novotarskyi^d, Iurii Sushko^d, Robert Körner^d, Elena Salmina^d, Achmed Abdelaziz^d and Igor Tetko^d

^aLaboratorio de Simulaciones moleculares computacionales, Fac. de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Puebla, C.U. Puebla, Pue. México.

^bLaboratorio de Investigación en Bioinorgánica y Biotecnología (LIByB). Apizaco, Tlaxcala. México.

^cInstituto de Fisiología, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Ciudad Universitaria, Puebla, Pue, México.

^dLaboratorio de eADMET GmbH, Lichtenbergstraße 8, D-85748 Garching, München, Germany.

Email: tscior@correo.buap.mx

ToxAlerts es un banco de datos para expertos en materia de toxicología y reacciones bioquímicas en el organismo con opciones y herramientas para almacenar, documentar y predecir propiedades químicas y biológicas de sustancias de todo tipo, tales como reactivos químicos, precursores de medicamentos, componentes moleculares de alimentos, materiales industriales, etc. [1]. Si se encuentra una subestructura dentro de la fórmula química se da una alerta en lo relativo a un efecto tóxico (*structural alerts*). Tal subestructura, que conlleva un efecto peligroso o venenoso, se llama "toxicóforo", del griego *tox*, veneno y *phorein*, traer o aportar, en analogía al grupo farmacóforo de los fármacos. Se pueden utilizar las plantillas moleculares ya registradas en la plataforma ToxAlerts, o se pueden insertar nuevas plantillas 2D o 3D como filtros de búsqueda de efectos tóxicos (*pattern search*). Dicha operación se conoce como filtrado virtual de toxicidad (*tox-screen*), ya que se ha descubierto que ciertos grupos químicos se asocian con un tipo de toxicidad en particular [2].

La herramienta virtual se puede aplicar para prevenir accidentes y garantizar más seguridad en el manejo, almacenamiento y transporte vial de todo tipo de sustancias, siempre y cuando se conozca su naturaleza química estructural. En caso de mezclas, se requiere el conocimiento de uno(s) componente(s) para el uso de ToxAlerts. En **Ochem** se aplican los métodos cuantitativos para relacionar las estructuras químicas con las propiedades fisicoquímicas o actividades biológicas: Quantitative Structure Activity Relationship (QSAR) y Quantitative Structure Property Relationship (QSPR) para predecir nuevas estructuras a partir de una serie de compuestos experimentalmente conocidos y registrados en la plataforma [3,4]. El presente estudio de investigación aplica el método QSAR, aplicando el software **Ochem** (<http://www.eadmet.com/de/ochem.php>) con unos derivados sintéticos del antiparasitario Nitazoxanida.

Palabras Clave: *toxicidad, material peligroso, documentación, simulaciones computacionales moleculares*

Referencias

- [1] Sushko I, Salmina E, Potemkin VA, Poda G, Tetko IV. ToxAlerts: A Web Server of Structural Alerts for Toxic Chemicals and Compounds with Potential Adverse Reactions. *J Chem Inf Model*. **2012**. 27;52(8):2310-2316.
- [2] Scior, T.; Bender, A.; Tresadern, G.; Medina-Franco, J.; Martínez-Mayorga, K.; Langer, T.; Cuanalo-Contreras, K.; Agrafiotis, D.K., Recognizing Pitfalls in Virtual Screening: A Critical Review, *J Chem Inf Mod*, **2012**, 52(4), 867-881.
- [3] Sushko I, Novotarskyi S, Körner R, Pandey AK, Rupp M, Teetz W, Brandmaier S, Abdelaziz A, Prokopenko VV, Tanchuk VY, Todeschini R, Varnek A, Marcou G, Ertl P, Potemkin V, Grishina M, Gasteiger J, Schwab C, Baskin II, Palyulin VA, Radchenko EV, Welsh WJ, Kholodovych V, Chekmarev D, Cherkasov A, Aires-de-Sousa J, Zhang QY, Bender A, Nigsch F, Patiny L, Williams A, Tkachenko V, Tetko IV. Online chemical modeling environment (OCHEM): web platform for data storage, model development and publishing of chemical information. *J Comput Aided Mol Des*. **2011**; 25(6):533-554.
- [4] Scior, T.; Medina-Franco, J. L.; Do, Q.-T.; Martínez-Mayorga, K.; Rojas, J. A. Yunes; Bernard, P., How to recognize and work around pitfalls in QSAR studies: a critical review, *CMC*, **2009**, 16(32), 4297-4313.





Efecto de la molienda en la cascara del naranjo agrio (*Citrus aurantium*) para la bioadsorción.

Gloria Sandoval Flores^a, Rosa Isela De La Rosa Flores^a, Luis Eduardo Ramos Hernández^a, Isidro Palos Pizarro^a, Sofía Alvarado Reyna^a

^aUniversidad Autónoma de Tamaulipas, Unidad Académica Multidisciplinaria Reynosa-Aztlán, calle 16 y lago de chápala fracc. Aztlán cp.88740 Reynosa, Tam.

isi_palos@hotmail.com

Conforme se incrementa la civilización, aumentan las necesidades de adquirir diversos productos y con ello, el número de industrias que compiten para producir dichos satisfactores, desafortunadamente la gran mayoría de las industrias no cuentan con programas para manejar los desechos que se eliminan en sus procesos de fabricación, depositando sus residuos, en muchos casos tóxicos, al drenaje o a cuerpos de agua. Una de muchas problemáticas actuales que se presentan, es la contaminación del medio ambiente presentando un gran interés en la contaminación del agua. La aplicación de la técnica de bio adsorción para el tratamiento de eliminación de metales pesados en aguas, constituye una alternativa de gran interés, por ser obtenido de manera natural y de bajo costo [1]. En esta investigación se utilizó biomasa obtenida de la cascara de naranjo agrio *Citrus aurantium* como bioadsorbente, llevándose a cabo diversos pre tratamientos. En el inicio de la experimentación la biomasa se cortó en pequeños trozos y se lavó con agua bidestilada para eliminar impurezas, posteriormente se secó en una estufa a 60°C, para luego ser trituradas y tamizadas a malla 40, 100 y sin tamizar. La activación del bioadsorbente se realizó con la desmetoxilación de la biomasa seca en una solución de hidróxido de sodio 0.2M a una temperatura de 8 °C, manteniendo una agitación constante durante 2 horas, al finalizar este tiempo se filtró haciendo lavados sucesivos con agua bidestilada. Posteriormente se realizó la reticulación de la Biomasa en base seca, colocándola en una solución de cloruro de calcio 0.2 M [2], manteniendo una agitación constante. Al finalizar el tratamiento se lavó varias veces con agua bidestilada, se filtró y se secó. Este proceso permite la formación de mallas tridimensionales en la parte interna del material y aumenta la estabilidad mecánica. Los efectos de adsorbancia del material sintetizado se evaluaron haciendo pasar por un lecho fijo una solución preparada a una concentración de 100 ppm de Hierro (III), y determinando la concentración de la corriente de salida por medio de la técnica de espectrofotometría de Uv-Visible. Los resultados preliminares de espectrofotometría confirman la actividad del bioadsorbente al mostrar una adsorción en el contenido de Hierro (II) de 54.61-61.87%. El análisis del rango de adsorbancia muestra que es producto de la variación del pH de la desmetoxilación. El estudio indica que la cáscara de Naranja agrio (pectina) obtenido por esta técnica tiene un efecto en la separación de iones de metales pesados [3].

[1] R. Vilchez Vargas. “Eliminación de metales pesados en aguas subterráneas mediante sistemas de lechos sumergidos: estudio microbiológico de las películas”; *Tesis doctoral Universidad de Granada* 2005.

[2] Claudia Villanueva H. y Nelson Tapia H; *Rev. Per. Quím. Ing. Quím.* 2005, vol. 8 n.º 1; pag 11-15.

[3] Maria Luisa Castro de Esparza, “Manual de Control de Calidad Analítica del Laboratorio del CEPIS”; 1995





Determinación del Coeficiente de Extinción Molar de la Acrilamida

Pérez Alonso J.^a, Reyes Pérez E.^b

^{a,b}Facultad de Ciencias Básicas Ingeniería y Tecnología, Universidad Autónoma de Tlaxcala

^ajawi_7@hotmail.com, ^beneidarp2009@gmail.com

Durante los últimos años las emisiones de compuestos orgánicos volátiles a la atmósfera aumentan como consecuencia al uso de hidrocarburos y otros productos similares en las distintas actividades industriales, debido a su influencia de manera nociva en el medio ambiente y a la salud humana, siendo precursores de la producción de ozono y de partículas finas, contribuyen al cambio climático y muchos de ellos son sustancias tóxicas cancerígenas. En los sistemas acuosos los procesos de degradación de contaminantes orgánicos son por degradación química que es la hidrólisis y la fotodegradación (fotólisis directa e indirecta). Este trabajo se enfoca en la fotólisis directa, entre 200 y 800 nm que comprende la región UV-Vis. Para determinar el valor del coeficiente de extinción molar de la acrilamida y los espectros de absorción en la región UV-Visible.

El dispositivo experimental, con el cual, se determinó el coeficiente de extinción molar de la acrilamida comprende dos celdas de cuarzo colocadas en paralelo conectado a un atenuador de luz. La luz atraviesa el sistema a través de las fibras ópticas (Ocean Optics) de 400 μm , las dos celdas de cuarzo (Ocean Optics) que tienen un camino óptico de 1 cm y un volumen de 3.5 ml. La luz es producida por una lámpara de Deuterio (Ocean Optics, DH-2000), una lámpara de Hg (Ocean Optics, Cal-2000). Se aplicó un diseño de experimentos 2^k , ya que diversos factores como, temperatura, pH, concentración de sal y de disolvente, pueden alterar la carga de las moléculas, que afectan provocando desplazamientos de los espectros de absorción UV en una disolución acetona-agua. Los resultados obtenidos del diseño de experimentos nos indican que dichos factores no afectan en la realización de la prueba experimental. Después de optimizar el método experimental se procedió a obtener los valores del coeficiente de extinción molar de la acetona en agua destilada entre la longitud de onda entre 240 y 340 nm. Los resultados obtenidos del coeficiente de extinción molar de la acetona en agua determinado por Feigenbrugel, V. y col. (2005), es $\epsilon(253.7\text{nm}) = 13.9 \text{ (M}^{-1} \text{ cm}^{-1})$. En este trabajo el valor encontrado de la acetona en agua $\epsilon(253.7\text{nm}) = 14.16 \text{ (M}^{-1} \text{ cm}^{-1})$. Una vez validado el método se procedió a la obtención del coeficiente de extinción molar de la acrilamida, para el rango de concentraciones de 0.005, 0.0075 y 0.01 M, se obtuvo un $\epsilon(253.7\text{nm}) = 18.9 \text{ (M}^{-1} \text{ cm}^{-1})$ de la acrilamida con la lámpara de Deuterio y $\epsilon(253.7\text{nm}) = 20.1 \pm 2$ con la lámpara de Mercurio, que se determinó a partir de ecuación de la ley de Beer-Lambert.

De acuerdo a los valores obtenidos del coeficiente de extinción molar en la fase acuosa de la acrilamida, nos proporciona información útil para estimar el destino potencial en el medio ambiente. Debido a los valores encontrados del coeficiente de extinción molar y las absorbancias de la acrilamida, puede ser degradado por fotólisis. Su espectro de absorción UV presenta sólo un pico que tiene un máximo de absorbancia alrededor de 234.2 nm ($\epsilon \sim 70.18 \text{ M}^{-1} \text{ cm}^{-1}$).

Feigenbrugel, V. y col. (2005). Near-UV molar absorptivities of acetone, alachlor, metolachlor, diazinon and dichlorvos in aqueous solution. *Journal of Photochemistry and Photobiology: Chemistry* 174, 76-81. Elsevier.



Bioprospección de Microorganismos Productores de Antimicrobianos

Joaquín Adrián López Rodríguez, Víctor Manuel Ovando Medina, Elsa Cervantes González

Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Coordinación Académica Región Altiplano, Carretera a Cedral Km 5+600, San José de las Trojes, Matehuala, San Luis Potosí, CP. 78700, México.

elsa.cervantes@uaslp.mx

La aparición y propagación de importantes infecciones causadas por bacterias resistentes a tratamientos con antibióticos, se ha vuelto uno de los principales problemas de salud global del siglo XXI, el principal problema recae en que los casos infecciosos se han vuelto más severos y requieren largos y complejos tratamientos [1]. Actualmente se han llevado a cabo investigaciones enfocadas a la búsqueda de microorganismos productores de antibióticos efectivos contra microorganismos patógenos y de acción de amplio espectro. Las búsquedas más habituales se realizan analizando muestras de suelo y agua proveniente de diferentes hábitats y condiciones climatológicas, enfocándose generalmente en la rizosfera de ubicaciones con abundante vegetación y humedad; cuerpos de agua que albergan gran biodiversidad o de fuentes que presentan gran carga y diversidad de microorganismos [2, 3]. Es por ello que en el presente trabajo se realizó la búsqueda de microorganismos productores de antimicrobianos muestreando suelo y agua con cargas potenciales de microorganismos en la localidad de Matehuala, San Luis Potosí. Se realizaron diversas técnicas para la detección de los microorganismos de interés contenidos en las muestras al ser sometidas a interacción con bacterias consideradas como patógenas, las cuales fueron: *Staphylococcus aureus*, *Salmonella sp* y *Escherichia coli*. La técnica óptima consistió en la preparación de placas con doble capa de agar Luria Bertani (LB), en las cuales la superficie de la capa inferior poseía crecimiento de microorganismos mixtos provenientes de una dilución específica del enriquecimiento de alguna muestra de suelo o agua y la capa superior contenía a una de las bacterias patógenas a través de la técnica de vertido en placa. Los resultados mostraron el aislamiento y purificación de por lo menos un microorganismo productor de un compuesto antimicrobiano efectivo contra *E. coli* como se muestra en la figura 1. Una vez purificado el microorganismo productor del antimicrobiano se evaluó la efectividad del compuesto ante *S. aureus*, *Salmonella sp.*, *Salmonella enteritidis*, *Bacillus subtilis*, *Micrococcus luteus* y *Streptococcus agalactiae*, obteniéndose efecto de inhibición solo ante *S. aureus* y *S. agalactiae*. Finalmente se seleccionó

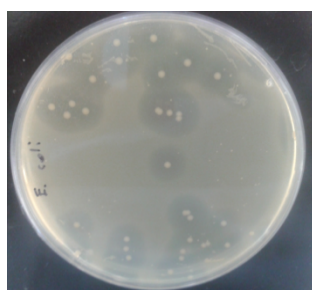


Figura 1. Inhibición de *E. coli* ante microorganismo productor de antibiótico

[1] A. Alanis, *Arch med res* **2005**, *36*, 697-705

[2] L. Sergio, Y. Marisa, *Rev Med Chile* **2004**, *132*, 151-159

[3] Y. Moustafa, *The journal of Microbiology* **2007**, *45*, 263-267



Estudió de las vías de eliminación del acrilamida en la atmósfera.

Morales V.,^a Contreras O.,^a Reyes E.^a y Elías A.^a

^aUniversidad Autónoma de Tlaxcala, Calzada Apizaquito s/n, Apizaco, Tlaxcala, México.
eneidarp2009@gmail.com, aeliasdom@yahoo.com.mx

La contaminación atmosférica es un tema recurrente debido a que está ha ido aumentando drásticamente en los últimos años por el exceso de población y el desarrollo industrial para satisfacer las necesidades de la población. La industria emite entre un 14 y 17 % de los contaminantes existentes en la atmósfera de acuerdo a la Secretaria del Medio Ambiente [1].

National Industrial Chemicals Notification and Assessment SHEME reporta que el 0.1 % es Acrilamida [2]. El uso de la acrilamida a partir del 2004 crece a una tasa promedio del 5.5% anual utilizándola en la recuperación mejorada del petróleo y en un 4% y 3% anual para el tratamiento de aguas residuales. Debido a esto la exposición humana a la acrilamida se presenta principalmente por el contacto con la piel y la inhalación de polvo y vapor o a través del agua potable contaminada [3].

Una vía de eliminación del Acrilamida de la atmósfera se presenta cuando las moléculas del acrilamida interactúan con las moléculas de agua presentes en las nubes. El acrilamida y el agua se solubilizan y se precipitan a los suelos donde ocurre la degradación. Otra vía de eliminación es por reacciones fotoquímicas en la atmósfera con los rayos UV, fotólisis o bien con los radicales OH, NO₂ y O₃.

Para el estudio de la posible vía de eliminación del acrilamida en la atmósfera por medio de rayos UV o fotólisis, se necesita un dispositivo experimental para la determinación del coeficiente de extinción molar y el espectro de absorción molar. El dispositivo experimental lo conforma una lámpara de mercurio [CAL-2000], lámpara de deuterio [HD-2000], un atenuador de luz [FVA-UV], un interruptor doble [FOS-2x2-TTI], 2 celdas de absorción [CV-Q-10], 4 fibras ópticas [QP400-1-UV-VIS], 2 fibra óptica con doble bifurcación [QBIF400-1-UV-VIS], el espectrómetro [USB4000-UV-VIS] conectado a una computadora para el procesamiento de datos.

El coeficiente de extinción molar se obtuvo a (253.7 nm) = $10.2422 \pm 1.44906 M^{-1} cm^{-1}$ y muestra que la absorbancia en la acrilamida tiene un comportamiento lineal en las concentraciones de 0.005 M a 0.012 M. El espectro de absorción molar del acrilamida se obtuvo a una longitud de onda (λ) entre 240 a 340 nm con una resolución espectral de 0.022 nm, presenta un pico máximo (λ_{max}) a 258 nm y $14 M^{-1} cm^{-1}$ con un error sistemático del 5.5%. La absorción de la molécula del acrilamida es considerada como despreciable por arriba de los 280 nm por consecuencia la vía de eliminación por fotólisis directa de la molécula del acrilamida en el ambiente es insignificante.

[1] S.M.A. (2009), Secretaria del Medio Ambiente.


http://www.sma.df.gob.mx/sma/links/download/archivos/inv_cont_toxicos/03inventario.pdf

[2] NICNAS. (2002), National Industrial Chemicals Notification and Assessment SHEME

http://nicnas.gov.au/Publications/CAR/PEC/PEC23/PEC_23_Full_Report_PDF.pdf

[3] EPA.(2007), U.S. Agencia de Protección Ambiental, Revista Toxicológica del Acrilamida. Pag. 22





Determinación de nitro-hidrocarburos aromáticos policíclicos en aerosoles atmosféricos en el suroeste de la Ciudad de México

Hugo A. Saldarriaga-Noreña^a, Sandra I. Ramírez-Jiménez^a, Rodrigo Morales-Cueto^a, Rebecca López-Márquez^a, Omar Amador-Muñoz^b, Rafael Villalobos-Pietrini^b

^a Centro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos

^b Centro de Ciencias de la Atmósfera, UNAM

hsaldarriaga@uaem.mx

Introducción: Los nitro-HAP se encuentran en la atmósfera por ser emitidos directamente durante procesos de combustión incompleta de diesel o gasolina, o como producto de una amplia gama de reacciones de los HAP con óxidos de nitrógeno [1]. Los HAP generan nitro-HAP al reaccionar con el radical OH o el NO₃ en presencia de NO₂ en fase gaseosa [2], de igual forma se pueden formar en presencia de N₂O₅ y HNO₃ cuando el HAP está asociado con el aerosol [3]. Los nitro-HAP son de interés particular para la comunidad científica dado su alto poder mutagénico [4]. Sin embargo, a pesar de los riesgos que esta familia de compuestos representa para la salud humana, aún hace falta información científica que permita conocer mejor sobre su comportamiento químico y sus niveles de concentración ambientales. Por tal motivo, el objetivo de este estudio fue determinar el contenido de nitro-HAP en partículas menores o iguales a 10 micrómetros (PM₁₀) en el suroeste de la Ciudad de México entre marzo y mayo del 2008.

Metodología: El muestreo de las partículas PM₁₀ se llevó a cabo en el Centro de Ciencias de la Atmósfera de la UNAM. Para validar la metodología analítica, se tomó un cuarto de cada filtro muestreado y se fortificó con una disolución estándar de nitro-HAP (48-375 ng mL⁻¹). Se realizó el análisis por cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas utilizando el modo de ionización química negativa. Los compuestos analizados fueron: 1,3 + 1,5 Dinitronaftaleno (1,3+1,5 DNNaft), 9-Nitroantraceno (9-NAnt), 3-Nitrofenantreno (3-NFen) y 2-Nitrofluoranteno (2-NFIt).

Resultados y Discusión: Los porcentajes de recuperación para los nitro-HAP detectados oscilaron entre 36 y 80 % con un CV del 30 %. , al respecto, la Agencia de Protección Ambiental de los Estados Unidos de Norteamérica (US-EPA, por sus siglas en inglés) sugiere porcentajes de recuperación entre 60-120% para los HAP; esto es razonable dada la complejidad de la matriz, así como las diferentes etapas del análisis que involucran desde la colecta hasta el análisis cromatográfico, lo que implica mucha manipulación de la muestra y por ende poca recuperación. La concentración total promedio de los nitro-HAP en este período fue de 350 pg/m³. Los compuestos más abundantes fueron 1,3+1,5-DNNaf (150 ± 90 pg/m³), 2-NFIt (120 ± 40 pg/m³) y 9-NAnt (60 ± 40 pg/m³). La presencia de 2-NFIt es atribuida exclusivamente a la formación atmosférica, producto de las reacciones en fase gaseosa del fluoranteno con radicales OH durante el día y con radicales NO₃. Las correlaciones positivas observadas entre la concentración de NO_x (óxidos de nitrógeno) con la concentración promedio de nitro-HAP y la concentración promedio de 2-NFIt, sugieren que en la zona de estudio, la principal fuente de nitro-HAP son las reacciones atmosféricas.

Bibliografía:

1. Sasaki, J., Arey, J. y Harger, W. (1995). Formation of mutagens from the photooxidations of 2-4 rings PAH. *Environ. Sci. Technol.* 29, 1324-1335
2. Atkinson, R. y Arey, J. (1994). Atmospheric chemistry of gas phase polycyclic aromatic hydrocarbons: formation of atmospheric mutagens. *Environ. Health Perspect.* 102, 117-126
3. Kamens, R., Guo, J., Guo, M. y McDow, S. R. (1990). Polynuclear aromatic hydrocarbons degradation by heterogeneous reactions with N₂O₅ on atmospheric particles. *Atmos. Environ.* 24, 1161-1173.
4. Jinhui X, Lee FSC (2000). *Anal Chim Acta* 416:111-115.



Evaluación de Impacto Ambiental en San Pedro y San Pablo Teposcolula, Oaxaca para la etapa de preparación del sitio por Matriz de Gómez Orea

Juana Silva López^a, María Noemi Bonilla y Fernandez^b, Guillerimos Juárez López^c, Roberto Acosta Pérez^d ^aFacultad de Ciencias Básicas Ingeniería y Tecnología, Universidad Autónoma de Tlaxcala. Calzada Apizaquito s/n Apizaco Tlaxcala. ^b Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, ^c Instituto de Minería, Universidad Tecnológica de la Mixteca, Carretera a Acatlima Km 2.5 C.P. 6900, Huajuapán de León, Oaxaca. ^d Centro de Investigación en Genética y Ambiente, Universidad Autónoma de Tlaxcala. Ixtacuixtla, Tlax., México.

juanasilva@live.com.mx

Introducción. La Evaluación del Impacto Ambiental (EIA) se ha convertido en uno de los principales instrumentos preventivos para el control de los Impactos Ambientales que una obra o actividad puede causar al ambiente. Por lo anterior el estudio pretende identificar, cuantificar, analizar y proponer medidas que permitan mitigar los impactos adversos al ambiente que puede causar el aprovechamiento del mármol a cielo abierto en la zona de estudio [1], [2]. Ante la problemática económica por la que atraviesa actualmente nuestro país, es importante buscar diversas formas de conseguir ingresos económicos en los hogares que contribuyan tanto al desarrollo económico como social del entorno [3], [4]. Nos hemos dado a la tarea de hacer un estudio de Evaluar el impacto ambiental ocasionado por el aprovechamiento del mármol en el Colibrí, Municipio de San Pedro y San Pablo, Teposcolula, Oaxaca, en la etapa de preparación del sitio, bajo la Matriz de Gómez O. [1], [5].

Metodología. Se fundamenta en un estudio de preparación del sitio de impacto del aprovechamiento del marmól, bajo la matriz de Gómez Orea donde se valoran los índices de impacto en las actividades (desmonte, despalme, limpieza del sitio en estudio, cortes y excavaciones, uso de maquinaria y equipo, manejo de residuos, contratación de mano de obra), factores/atributos, criterios de incidencia, índice de incidencia, calidad del factor (con y sin proyecto), valor del impacto, jerarquización [6], [7].

Resultados y discusión. En base a la (Tabla 1), podemos decir que en la etapa de preparación del sitio se generarán 3 impactos importantes, 1 medio, 21 moderados, 24 muy moderados. Para un total de 54 impactos ambientales, de los cuales 49 son adversos y 5 benéficos.

TIPO DE IMPACTO ETAPAS	RANGO	NEGATIVO O ADVERSO	POSITIVO O BENÉFICO
PREPARACIÓN DEL SITIO	MUY IMPORTANTE		
	IMPORTANTE	3	
	MEDIO	1	
	MODERADO	21	
	MUY MODERADO	24	5

(Tabla 1) Resultados del tipo de impactos en la etapa de preparación del sitio de aprovechamiento del marmól

Conclusiones. Con el resultado de este estudio en la etapa de preparación del sitio de aprovechamiento del marmól, se orientará a la población presente en el cuidado del escenario geográfico y la calidad de vida puesto que será en un futuro el sustento de sus generaciones ya que permitirá proponer mejores sitios de aprovechamiento de los recursos del marmól.

Referencias.


- [1] Domingo Gómez Orea. 2003. Evaluación de Impacto Ambiental, Un instrumento preventivo para la gestión ambiental, segunda edición .Ediciones Mundi-Prensa
- [2] Kussmaul. 2005. Minería a cielo abierto. Definición e Impacto ambientales minería a cielo. Frente Nacional de Operación a la Minería, Costa Rica
- [3] Conesa fernandez- Vitora. 2003. Guía Metodológica para la Evaluación del Impacto Ambiental. Vicen Editorial Conesa Fernandez(1997) Auditorías Medioambientales. Vicen Editorial
- [4] García García J.E. 2004. Medio Ambiente y Sociedad. Alianza Editorial, Primera edición Conde Londoño J., Empresa y Medio Ambienta. Nivola Libros y ediciones, S.L.
- [5] Coiesa Fernandez. 2008. Guía Metodológica para Evaluación Impacto Ambiental. Mundi Presa , tercera edición. SEMARNAT
- [6] CIE Inversiones Editoriales. 200-2008. Evaluación del Impacto Ambiental en España: nuevas perspectivas libro de actas del IV Congreso nacional de Evaluación de Impactos. Primera Edición: Madrid
- [7] Regueiro, M., González, B. 2003. Exploración y explotación de rocas ornamentales. Prof. Manuel Regueiro y González-Barros. Instituto Geológico y Minero de España. 13p



ÁREA DE BIOPROCESOS

ÁREA DE BIOPROCESOS





Evaluación preliminar de la actividad antimicrobiana de extracto de fruto de *Solanum elaeagnifolium*

Manuel Alejandro Torres Nágera, Lluvia Itzel López López, María Guadalupe de la Cruz Galicia, María Antonia González Zavala, Sonia Yesenia Silva Belmares.


Universidad Autónoma de Coahuila, Facultad de Ciencias Químicas, Cuerpo Académico de Químico Farmacobiólogo y Núcleo Básico de la Maestría en Ciencia y Tecnología Química. Blvd. Venustiano Carranza. Saltillo, Coahuila, México. CP25280.

Asesor contacto: yesenia_silva@uadec.edu.mx

Resumen

El abuso de antibióticos ha generado cepas bacterianas multidrogoresistentes, que provocan complicaciones en el control de enfermedades infecciosas, por lo que es importante la búsqueda de nuevas alternativas a los antibióticos convencionales. Las solanáceas tienen un alto potencial antimicrobiano, se han utilizado en la medicina tradicional mexicana como anti diarreicos y antifúngicos, no existe documentación científica que valide el uso de *S. elaeagnifolium* como agente antimicrobiano, por lo que como contribución para la resolución de ésta problemática, en este trabajo se propuso el aislamiento de proteínas de *S. elaeagnifolium* con efecto antimicrobiano; por lo que en este trabajo se propuso como objetivo la evaluación de la actividad antimicrobiana de un extracto metanólico del fruto de *S. elaeagnifolium*, sobre microorganismos de importancia médica, para lograr esto se realizó una extracción del fruto previamente triturado y tamizado, la extracción se realizó con metanol al 10 porcentaje peso/volumen, se determinó el porcentaje de humedad del extracto obtenido, así como porcentaje de recuperación del mismo, se preparó una solución madre de 2,000 ppm, mediante procedimientos apegados a las BPL (GLP), posteriormente se determinó el efecto antimicrobiano por el método de microdilución en placa de 96 pozos empleando como estándar de suspensión microbiana el método de MC. Farland, apegado a la normatividad del documento M27-A3 del Clinical and Laboratory Standards Institute (CLSI), empleando como controles positivos gentamicina y ciprofloxacino. Los resultados mostraron un porcentaje de humedad del 47.15 ± 2.334 , un porcentaje de recuperación de 8.229 ± 0.464 y actividad antimicrobiana sobre los microorganismos probados.





Pruebas preliminares para la caracterización de tempesquistle (*Sideroxylon palmeri*)

Marisa Avelino Arias^[a], M. Juana Paredes-Bautista^[a], Tania Meza Gaspar^[a], J. Deysi Santamaría Juárez^[a]

^[a] Facultad de Ingeniería Química, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla. Ciudad Universitaria, C.P. 72570, Puebla, México.

paredesbautista@yahoo.com.mx

El tempesquistle (*Sideroxylon palmeri*) [1, 2, 3, 5] es un fruto que se da de manera silvestre en la región de la mixteca poblana es producido por árboles que llevan el mismo nombre. Su principal uso es para consumo humano, sin embargo el estudio de este fruto se enfoca en la observación en su proceso de cocción ya que al realizar esta actividad y agregándole un olote (parte espinal del elote en estado seco) se captura una sustancia viscosa desprendida del fruto y que al enfriar se vuelve una resina totalmente pegajosa, tomando como referencia que los polímeros naturales como la celulosa tienen esta característica se realiza el estudio de este fruto.

El tempesquistle es un fruto parecido a la aceituna, es carnoso, redondo de 1 a 2 cm de largo, su color es verde amarillento, con resina pegajosa, contiene una semilla de 8 mm de largo de forma redondeada. Se ha hecho una revisión bibliográfica sobre el fruto sin que haya documentos que nos hablen de su estudio desde el punto de vista químico. [1] [2] En el presente trabajo se realiza el análisis de solubilidad con solventes polares y no polares, espectroscopia infrarroja del fruto de tempesquistle utilizado por los pobladores de San Juan Ixcaquixtla para consumo humano y que resulta de interés para la determinación de un polímero natural que pueda tener aplicaciones en la industria. Se realizan pruebas preliminares para la caracterización de éste producto por el interés de conocer cuáles serán las posibles aplicaciones que se le pueda dar a la resina.

Entre los ensayos fisicoquímicos que se le realizan al fruto son: pruebas de solubilidad, % de humedad, materia orgánica. Las pruebas de solubilidad se realizaron con solventes polares y no polares (C₂H₆O, CH₃OH, CHCl₃, THF, DMSO, H₂O, C₆H₁₄); resultando ser soluble en THF, parcialmente soluble en CH₃OH, CHCl₃ y C₆H₁₄ e insoluble en C₂H₆O, DMSO y H₂O. Se hace también la extracción de lípidos crudos por el Método *Soxhlet* en el equipo Barnstead 5000. Posteriormente se obtienen los espectros de infrarrojo tanto de la resina como de los lípidos crudos.

Referencias

1. Carranza González, Eleazar, SAPOTACEAE, *Flora del Bajío y de Regiones Adyacentes*, 2005, Fascículo 132.
2. González-Soberanis, Carmen, Casas Alejandro, Traditional management and domestication of tempesquistle, *Sideroxylon palmeri* (Sapotaceae) in the Tehuacán-Cuicatlán Valley, Central Mexico, *Journal of Arid Environments*, 2004, 59, 245–258.
3. Guízar-Nolazco, E., Granados-Sánchez, D., Castañeda-Mendoza, A., Flora y Vegetación en la Porción Sur de la Mixteca Poblana. *Revista Chapingo. Serie ciencias forestales y del ambiente*, Universidad Autónoma Chapingo, Chapingo, México, 2010, vol. 16, núm. 2, 95-118.
4. Morrison and Boyd, QUÍMICA ORGÁNICA, 5a. Ed., Addison-Wesley Iberoamericana, 1990, 1211-1238.
5. Pennington T.D & J. Sarukhán, ÁRBOLES TROPICALES DE MÉXICO, MANUAL PARA LA IDENTIFICACIÓN DE LAS ESPECIES. Texto Científico Universitario. UNAM-FCE. 2005, 523.
6. Silverstein, Robert M., Webster, Francis X., SPECTROMETRIC IDENTIFICATION OF ORGANIC COMPOUNDS, 6a. Ed., John Wiley & Sons, 1998, 71-143.

AGRADECIMIENTOS

M. C. Salvador López Morales, Gerardo Cedillo Valverde, Instituto de Investigación en Materiales. UNAM.

I. A. Madai Gizeh Sanchez Arzubide. Facultad de Ingeniería química. BUAP.



Obtención de alcohol a partir de almidón de arroz como una alternativa para la industria arrocera

Tania García Herrera, José Martín Ávila Núñez, María Guadalupe López Rivadeneyra, Alejandra Velasco Pérez, Nancy Oviedo Barriga, Ignacio Sánchez Bazán

Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Veracruzana, Prol. Ote. 6 No. 1009, Col. Rafael Alvarado
Orizaba, Veracruz, C.P. 94340, México
tangarcia@uv.mx

Siendo el arroz uno de los cultivos más importantes dentro del sector agropecuario en un gran número de países, sobre todo los asiáticos, principales productores de arroz en el contexto mundial y debido a que, después del trigo, es el cereal de mayor consumo humano en el mundo, ya que tiene un alto contenido proteínico y su adaptabilidad a diferentes condiciones climáticas permite la cosecha en cualquier estación del año; es importante tener alternativas para su aprovechamiento integral.

El arroz, junto con el maíz, frijol y trigo, forma parte de la dieta básica de la población Mexicana; y es precisamente en México donde se detecta un problema que ocurre en la recepción del arroz, el grano presenta gran cantidad de almidón que se transforma en una pérdida económica pues el consumidor considerará un grano de mala calidad cuando tiene esta característica. Siendo un grave problema para los productores de esta gramínea ya que tienen que comercializar estos granos de arroz generalmente para alimentación animal, en algunos casos los llegan a mezclar con otros granos de arroz lo cual reduce la calidad y en la mayoría de los casos se pierde porque no se llega a vender en estas condiciones al mercado.

En este trabajo se pretende aprovechar el alto contenido de almidón en arroz para la producción de etanol hidrolizándolo previamente para convertirlo en azúcar mediante la fermentación utilizando la levadura *Saccharomyces cerevisiae*. El almidón se somete a una hidrólisis con H_2SO_4 para producir una solución azucarada denominada mosto a la cual se le agregan los microorganismos que dan como resultado alcohol y gas carbónico. Durante la hidrólisis se mide cada 5 min el pH para dar un seguimiento al proceso, una vez que el pH se mantiene estable se realiza la prueba de Fehling para detectar la presencia de azúcares reductores (glucosa). Se inocula con la levadura y se monitorea la producción de dióxido de carbono hasta que se deja de percibir su formación (Figura 1), al finalizar la fermentación se retira la masa fermentada por decantación y mediante destilación se obtiene el etanol. Mediante la prueba de Lucas se comprueba la presencia de etanol.

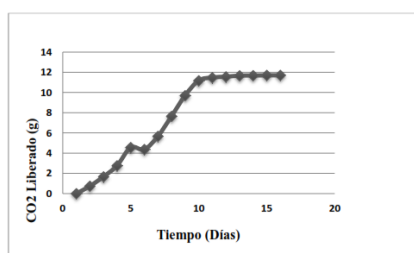


Figura 1. CO₂ liberado durante la fermentación

De 3 muestras de 100 gr de almidón de arroz se obtuvieron en promedio 25 g de etanol destilado; lo que muestra un mayor rendimiento que otro tipo de almidón como lo es el obtenido a partir de papa blanca que sólo tiene un rendimiento del 2 % [1].

[1] J.M. Avila Nuñez, M.G. López Rivadeneyra, Obtención de alcohol a partir de almidón de arroz y aprovechamiento de subproductos. *Tesis de Licenciatura*. 2011

Entalpías de dilución en soluciones poliméricas acuosas

Mayret Lozano Meléndez^a, Fernando Pérez Villaseñor^a, Shirley Carro Sánchez^a
^aFacultad de Ciencias Básicas Ingeniería y Tecnología, Universidad Autónoma de Tlaxcala
fervilla68@hotmail.com

Las entalpías de dilución y disolución, junto con la capacidad calorífica, constituyen importante fuente de información acerca de las propiedades térmicas de las disoluciones tanto de electrolitos como no electrolitos, pero, la información disponible sobre ellas es aún muy escasa^[1], particularmente en lo relacionado a entalpías de exceso, disolución o dilución de polímeros en solución^{[2],[3],[4]}.

El objetivo de este trabajo es determinar experimentalmente entalpías de dilución para soluciones acuosas de polímeros asociativos. Para tal fin se ha desarrollado una técnica para realizar mediciones de entalpías de dilución en un calorímetro para aplicaciones en solución Parr 6755 acoplado a un termómetro calorimétrico Parr 6772, al dispositivo experimental se le implementó una caseta isotérmica con control automático de temperatura con la finalidad de asegurar la reproductibilidad de las mediciones.

Para validar la metodología experimental, se reprodujeron las mediciones de entalpía de dilución de soluciones acuosas de KCl reportadas por Arsuaga y col.^[5], en un dispositivo similar. Las desviaciones entre los resultados encontrados y los reportes de literatura son del orden del 3%. Una vez validada la técnica de medición, se prepararon disoluciones acuosas con concentraciones de 1, 2, 3 4 y 5% en peso de polímero, para obtener concentraciones finales de entre 0.1 y 0.01%.

En la figura 1, se muestra el cambio de temperatura obtenido en el proceso de dilución de poliacrilamida. Debido al alto peso molecular, las entalpías de dilución obtenidas son del orden de superiores a 10^6 cal por mol.

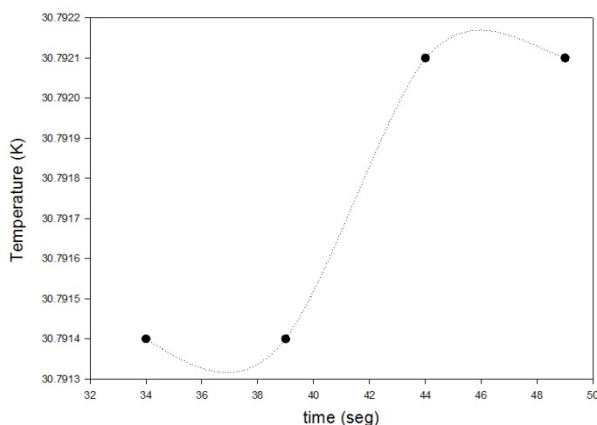


Figura 1. Efecto del cambio de temperatura por la dilución de la solución polimérica.

- [1] Arsuaga, J.; Taravillo, M.; Cáceres, M. *Journal of Solution Chemistry*. **2001**, 30, 1091-1100
- [2] Jones, M.; Percy, M. *Kolloid-Z. u. Z. Polymere*. **1973**, 251, 343-347.
- [3] Benegas, J.; Di Blas, A.; Paoletti, S.; Cesàro A. *Journal of Thermal Analysis*. **1992**, 38, 2613-2620
- [4] Wohlfarth, C. *Thermodynamic Data of Polymer Solutions at Elevated Pressures*. CRC PRESS. **2005**
- [1] Arsuaga, J.; Taravillo, M.; Cáceres, M.; Núñez J. *Información Tecnológica*. **2004**, 15, 81-86



ÁREA DE MATERIALES



Nanopartículas de polipirrol obtenidas mediante polimerización en heterofase-semicontinuo en presencia de ultrasonido

María E. Castillo López^o, Víctor M. Ovando-Medina^o, César B. Cázares Rodríguez^o

^oDepartamento de Ingeniería Química, COARA – Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Carretera a Cedral Km 5+600, San José de las Trojes, Matehuala, SLP, México 78700.

E-mail address: eliza_cl19@hotmail.com

La polimerización en microemulsión es un proceso novedoso para obtener látices con partículas de tamaño muy pequeño (< 50 nm), distribución de tamaños de partícula relativamente estrecha, polímeros de alto peso molecular (similar a los obtenidos en polimerización en emulsión), y partículas con estructuras y formas únicas [1]. Por otro lado, los polímeros conductores con dobles enlaces conjugados han recibido gran atención para ser utilizados como materiales avanzados. En particular, el polipirrol (PPy) es el que ha sido de mayor interés debido a su buena estabilidad ambiental, facilidad de síntesis y alta conductividad. El PPy puede ser preparado mediante oxidación química o mediante polimerización electroquímica de pirrol. Sin embargo, muchos factores pueden influir en las propiedades del PPy tales como la naturaleza del disolvente, método y velocidad de polimerización así como el pH del medio de reacción [2]. En este trabajo se reportan los resultados de la síntesis de polipirrol (PPy), llevada a cabo en presencia de ultrasonido, a través de una polimerización en microemulsión. Se utilizó agua destilada, dodecil sulfato de sodio (SDS) como surfactante, persulfato de amonio (APS) como iniciador, pirrol como monómero y gas argón como purgante de oxígeno. Las reacciones se realizaron en un reactor de vidrio con chaqueta de calentamiento y con capacidad de 250 mL. El surfactante y el agua fueron puestos en el reactor y la mezcla fue burbujeadada con argón de ultra alta pureza durante 60 minutos para desplazar el oxígeno disuelto en el agua. Posteriormente, se agregó el pirrol disperso en 5 g de agua y el APS disuelto en 5 g de agua colocados en dos jeringas montadas en una bomba dosificadora para dar inicio a la polimerización durante 90 minutos. La mezcla fue agitada con un agitador magnético y con ultrasonido. Las reacciones se realizaron a 50 °C. Las conversiones fueron determinadas por gravimetría. En las reacciones la conversión máxima observada fue de un 98%, siendo más alta cuando se polimeriza en presencia de ultrasonido (Figura 1). La caracterización del PPy fue realizada mediante espectroscopia de UV/vis y voltametría cíclica. En presencia de ultrasonido se observó una mayor estabilidad de los látices finales, mientras que cuando no se utilizó ultrasonido, se presentó precipitación del polímero, lo cual se debe a los mayores tamaños de partículas.

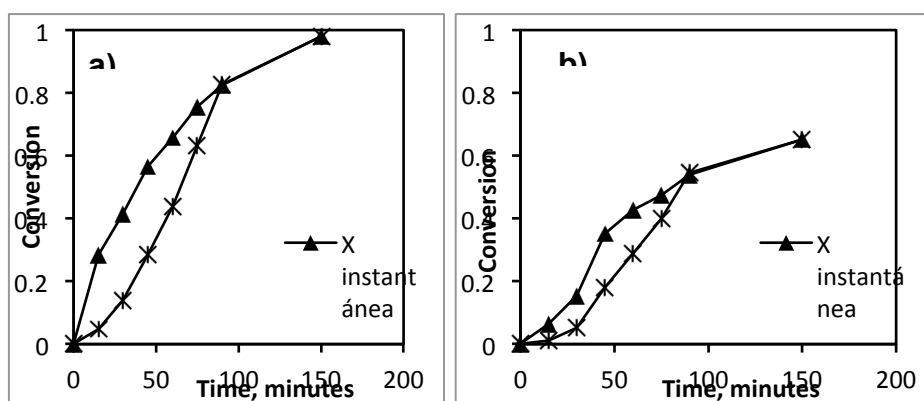


Figura 1. Cinética de la polimerización de pirrol en presencia de ultrasonido (a) y sin ultrasonido (b).

[1] F. López Serrano, J. E. López Aguilar, E. Mendizábal, J. E. Puig y J. Álvarez; Polimerización en microemulsión: construyendo un modelo utilizando la conversión experimental y su derivada; Revista mexicana de ingeniería química; Rev. Mex. Ing. Quím vol.7 no.1 México abr. 2008.

[2] V.M. Ovando, R.D. Peralta, E. Mendizábal, H. Martínez-Gutiérrez, T.E. Lara-Ceniceros, R. Ledezma-Rodríguez, Colloid Polym. Sci. 2011, 289, 759.

“Síntesis de poliacrilamida modificada hidrófobamente mediante polimerización en emulsión inversa vía raft”

Saucedo L. Rubén^a, Carro S. Shirley^a, Castillo T. Jorge^a, González C. Valeria^b, Tepale O. Nancy^b.

^aUniversidad Autónoma de Tlaxcala, ^bBenemérita Universidad Autónoma de Puebla

E-mail del autor para correspondencia: shir_cs@hotmail.com

La obtención de polímeros asociativos (PAS), principalmente los derivados de la acrilamida, se encuentra en constante estudio, ya que en la actualidad se busca controlar la estructura o arquitectura del polímero, peso molecular y viscosidad[1]. Una forma innovadora de obtener estructuras complejas y uniformes es mediante la polimerización por Transferencia de Adición-Fragmentación de cadena Reversible (RAFT) [2]. Tradicionalmente los PAS son sintetizados en solución pero se obtienen pesos moleculares (PM) muy bajos en tiempos de reacción muy elevados. Una forma de incrementar la velocidad de reacción y el PM es sintetizarlos mediante emulsión[3]. El objetivo de este trabajo es sintetizar poliacrilamida modificada hidrófobamente

mediante polimerización en emulsión inversa vía RAFT para obtener copolímeros asociativos con estructura controlada.

Se utilizó como monómero hidrófilo Acrilamida, (AM) Hexadecil Acrilamida (HDAM) y dodecil acrilamida (DAM) como monómeros hidrófobos, tolueno como fase continua, Span 80® como emulsificante, 4,4 Azobis Ácido Cianovalérico (ACVA) como iniciador, dos Ditióesteres y tres Tritiocarbonatos como agentes RAFT, con relación de agente transferencia/iniciador de 2/1 y 1/1

Se logró el control del PM, en función de la relación agente transferencia/iniciador, disminución del tiempo de reacción y se aumentó el peso molecular en comparación a los obtenidos en solución(Figura 1).

Se midieron propiedades reológicas del polímero en solución acuosa encontrando que el tipo de co-monómero y el PM del polímero obtenido influyen en la viscosidad.

Agradecimientos: al PROMEP por el apoyo al cuerpo académico de redes temáticas de colaboración, con clave 103.5/12/2116

[1] González Coronel Valeria., **2007**, Síntesis y caracterización de polímeros asociativos combinados utilizando iniciadores hidrófobos di-sustituídos en polimerización en solución. Tesis Centro de Investigación en Química Aplicada. Saltillo, Coahuila. México.

[2] S. Brent, D. Michael, M. Yoshiro, L. Andrew, M. Charles, *J. Amer. Chem. Soc.* **2001**, 34, 6561-6564.

[3] M. Paul, C. Jean, C. Christian, C. Francoise, M. Martial, S. Joseph, **2000**, *Associative Polymers Containing 2,4,6-Triphenethyl Benzyl Poly (Ethoxy) (Meth) Acrylate as a monomer and Their Process of Preparation by Inverse Emulsion Polymerization.*, 6107398.

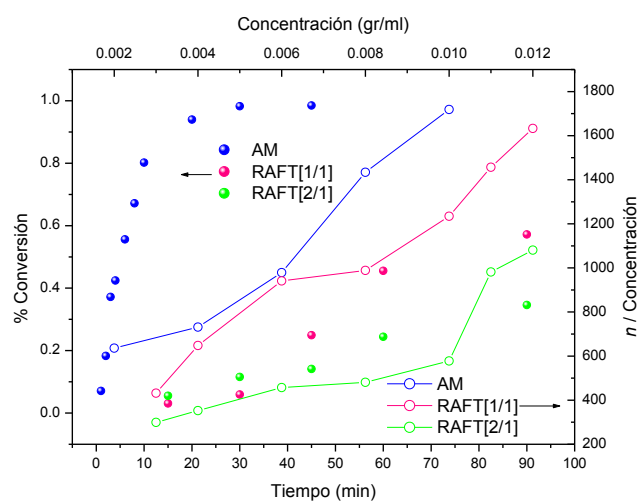


Figura 1. Comportamiento de la conversión y viscosidad.





Biodegradable films from hydroxypropylmethylcellulose (HPMC), casein, glycerol and castor oil

Alma Delia Herrera Vázquez^a, Irán F. Hernández-Ahuactzi^b, Maribel Hernández-Guerrero^c, José Antonio Guevara-García^a

^aLaboratory of Research in Bioinorganic and Biotechnology (LIByB). Apizaco, Tlaxcala. México.

^bCentro de Investigaciones en Materiales Avanzados (CIMAV). Alianza Norte 202. Parque de Investigación e Innovación Tecnológica. Apodaca, Nuevo León, México. P.O. 31109.

^cDepartamento de Procesos y Tecnología. UAM-Cuajimalpa, México D.F., 01120

Email: jaguevarag@hotmail.es

Oil derived plastics generate environmental problems such as greenhouse gas emissions apart from the significant amount of oil used to produce plastics. This situation has led to the search for renewable sources of environmentally degradable polymers, such as waste cellulose derivatives. In particular, HPMC is one of the most attractive for being economic. Moreover its use contributes to the reduction of environmental pollution. In addition, biodegradable films fabricated with milk proteins such as casein and whey are selective barriers to migration of gases and solutes [1] and are characterized by being transparent, and provide better mechanical properties [2].

In this work, several strategies were implemented for modifying the properties of biopolymers HPMC/casein: addition of calcium to enhance the structural rigidity of the lattice of the polymeric chains, temperature treatment to improve the miscibility between the biopolymers, and incorporating natural castor oil to increase hydrophobicity.

Homogeneous and uniform films were prepared from HPMC, casein, glycerol, and castor oil, and cast in PVC molds or in glass using slow wet procedure. All the components used were reactive grade and ultrapure reagent quality water was used. Studies were conducted by FTIR, TGA, DTGA, DSC, and DSC to characterize the materials. An optical tensiometer was used to measure contact angle.

Spectroscopic analysis showed the presence of intermolecular interactions between the starting biopolymers and demonstrated the formations of new materials with specific characteristics. These films were further improved in their mechanical properties with the best results obtained with a composition of 2.8 % (v/v) glycerol.

The hydrophobicity of the films was then increased by the introduction of castor oil up to 34.39%, measured by contact angle of pure water on the films, from $\theta = 18.15^\circ$ in the initial films HPMC/casein/glycerol up to $\theta = 52.54^\circ$ in laminated films in glass by slow wetting. The best results were achieved with the following composition: 48.6% (v/v) HPMC and casein, 2.8% (v/v) glycerol, and 1% (w/w) castor oil.

Through composting assay, it was observed that the films disappear after 108 h, so that the blend films have to be classified as biodegradable and compostable according to ASTM 6400-99.

Elastic, resilient and pliable biodegradable films were obtained with the blend of HPMC, casein, glycerol, and castor oil. HPMC miscibility in glycerol significantly increases the stability of the HPMC in the mixture and promotes the emergence of new bonds improving the mechanical properties. The addition of castor oil to the mixtures does not seem to weaken the network of inter and intramolecular bonds but increases the hydrophobicity of the films.


These new biodegradable polymers may have a use as active coatings for packaging in food industry.

References

[1] Nazan T., Sancak Z. Ö. E., Ayana B. *et al. J. Food Process Eng.* **2007**, *30*, 485–500.

[2] Rungsinee S., Rhim J., Hong S. *J. Food Eng.* **2009**, *91(3)*, 468–473.





Medición del número de partículas en línea mediante conductivimetría: obtención de parámetros para el modelo de predicción

*Linares N. Fernando^a, Carro S. Shirley^a, Castro A. Angel^a, López L. Eduardo^a,
Amador N. Cesar^a*

^aUniversidad Autónoma de Tlaxcala,

Email del autor para correspondencia: Demian_sklive@hotmail.com

Uno de los métodos de polimerización más empleado es emulsión, debido a que presenta ventajas sobre otras técnicas, como la obtención de pesos moleculares elevados y un control en el calor de reacción[1]. En las polimerizaciones en emulsión es importante conocer la evolución del número de partículas (N_p) formadas, ya que de ello depende la velocidad de reacción.

Conductivimetría es una técnica en línea que responde a cambios en la concentración de las especies iónicas, principalmente de emulsificante[2], la cual puede ser relacionada con fenómenos de coagulación y formación de partículas.

En un proyecto anterior (Saucedo, 2012) se implementó la técnica de conductivimetría para la medición de N_p en línea y cálculo de concentración de emulsificante en las diferentes fases de la polimerización. La señal de conductividad, así como de temperatura, se emplea para determinar el número de partículas mediante un modelo propuesto por Santos y col. (2003), empleando los parámetros propuestos por éste último, válidos para un intervalo de concentración de emulsificante de 0.1-0.5 M. Debido a que los parámetros se obtuvieron a partir de las polimerizaciones realizadas bajo las condiciones experimentales del modelo de referencia, existe una considerable desviación cuantitativa de la predicción de N_p respecto a las polimerizaciones efectuadas.

Por este motivo, en este trabajo se realizaron polimerizaciones en emulsión para determinar los parámetros correctos para el sistema de polimerización disponible en la institución. Se empleó como monómero estireno y dodecil sulfato de sodio como emulsificante. La temperatura se mantuvo constante, a 50° C, debido a que tiene efecto en la movilidad de las especies iónicas[3].

Agradecimientos:


Al CONACyT por el financiamiento del proyecto 84472.

A la UATx y CAS por permitir hacer uso de sus instalaciones.

[1] Odian, George. *Principles of polymerization*, 2004, Fourth Edition, 350.

[2] Santos y col. Online Monitoring of the Evolution of the Number of Particles in Emulsion Polymerization by Conductivity Measurements, 2002, 1.

[3] B. Carlos, N. Hernán, *Titulaciones conductimétricas*, 8.



Polimerización de metacrilato de metilo en heterofase-semocontinua empleando un surfactante reactivo y ultrasonido

Citlalli Yetlanezi Vargas Salazar^{a*}, Piedad S. Piña-García^a, Víctor M. Ovando-Medina^a, Hugo Martínez-Gutiérrez^b

^a Departamento de Ingeniería Química, Coordinación Académica Región Altiplano (COARA), Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Carretera a Cedral KM 5+600, San José de las Trojes, Matehuala, San Luis Potosí 78700 México. ^b Centro de Nanociencias y micro y nanotecnologías, Instituto Politécnico Nacional, Luis Enrique Erro S/N, D.F. 07738, México.
E-mail: victor.ovando@uaslp.mx

En la polimerización de microemulsión es posible obtener nanopartículas con tamaños más pequeños, que aquellos obtenidos mediante polimerización en emulsión. Sin embargo, la polimerización en microemulsión, requiere grandes cantidades de tensoactivo para las formulaciones ($\approx 10\%$ de masa total). La idea básica es diseñar tensioactivos de tal manera que puedan participar en las polimerizaciones heterofásicas, ya sea como co-monomeros (surfmers) o iniciadores (inisurfs) y, finalmente, ser unido covalentemente al polímero [1]. En el presente trabajo se experimenta con una fuente de energía (el ultrasonido) que genera una onda sonora a través de un medio químico, ocasionando la formación de un número elevado de microburbujas en unos pocos microsegundos. Este fenómeno se conoce como cavitación ultrasónica [2]. El uso del ultrasonido fue con la finalidad de estudiar el efecto que se tiene sobre las características morfológicas y coloidales de las nanopartículas de polimetacrilato de metilo durante la polimerización en heterofase-semicontinua y empleando un surfactante reactivo (Hitenol BC10).

Se copolimerizó el metacrilato de metilo (MMA) con el surfactante reactivo Hitenol BC10 (HBC10) utilizando dodecil sulfato de sodio (SDS) como agente pre-estabilizante y persulfato de potasio (KPS) como iniciador a una temperatura de $50\text{ }^{\circ}\text{C}$. Se varió la concentración de MMA/HBC10, la cual se adicionó a una velocidad (Ra) constante de 0.4 g/min de modo continuo en 5 reacciones y por otro lado, se mantuvo constante la concentración de MMA/HBC10 mientras se variaban las velocidades de adición a $0.4, 0.5$ y 0.6 g/min en 3 reacciones más. Se observaron altas velocidades de polimerización en todos los casos. También se observó, que la distribución de diámetro de partículas (PSD) fue, en la mayoría de los casos con tendencia monomodal. A continuación se muestran en las figuras 1a y 1b las conversiones en función del tiempo relativo.

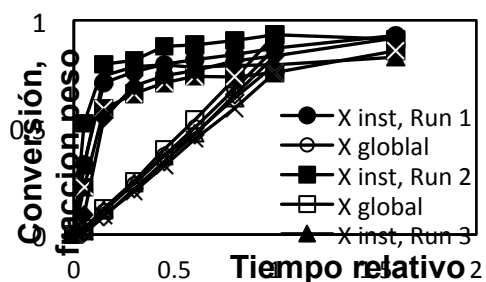


Figura 1a. Conversión a distintas concentraciones de HBC10

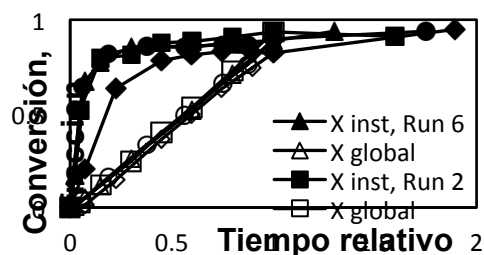


Figura 1b. Conversiones a distintas Ra

1. V.M. Ovando-Medina, P.S. Piña-García, M.A. Corona-Rivera, P.E. Díaz-Flores, R.D. Peralta, H. Martínez-Gutiérrez, T.E. Lara-Ceniceros, Polym. Bull. **2012**, 68, 2313.
2. C. Parra, G. González, C. Albano, Y. Sánchez, Revista latinoamericana de metalurgia y materiales, **2006**, 1, 29.



Síntesis de nanoestructuras de óxidos de hierro para la adsorción de arsénico

Piedad S. Piña-García^a, María G.C. López-Palacios^a, Víctor M. Ovando-Medina^a, Alfredo Márquez-Herrera

^aDepartamento de Ingeniería Química, Coordinación Académica Región Altiplano (COARA), Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Carretera a Cedral KM 5+600, San José de las Trojes, 78700 Matehuala, S.L.P., México,

^bDepartamento de Ingeniería Mecánica Administrativa, Coordinación Académica Región Altiplano (COARA), Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Carretera a Cedral KM 5+600, San José de las Trojes, 78700 Matehuala, S.L.P., México

Los hidroxidos de hierro son de los óxidos de metales de transición más importantes tecnológicamente. Dieciséis facetas puras de óxidos de hierro, es decir, los óxidos, hidróxidos u oxi-hidróxidos son conocidos hasta la fecha. Estos son $\text{Fe}(\text{OH})_3$, $\text{Fe}(\text{OH})_2$, $\text{Fe}_3\text{HO}_8 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$, Fe_3O_4 , FeO , cinco polimorfos de FeOOH y cuatro de Fe_2O_3 . Estos óxidos pueden ser sintetizados por todos los métodos químicos húmedos conocidos pero para controlar el tamaño de partícula en el rango y morfología nano para una aplicación particular sigue siendo una tarea difícil. Algunas de las técnicas de síntesis incluyen la precipitación química, sol-gel, hidrotermal, precipitación, emulsión, microemulsión, electro-deposición, e hidrotermal asistida por microondas. Estos óxidos pueden ser utilizados como catalizadores, adsorbentes, pigmentos, floculantes, recubrimientos, sensores de gas, intercambiadores de iones y para lubricación [1]. Los nanocompuestos de óxido de hierro tienen aplicaciones potenciales en áreas tales como el almacenamiento de datos, “tonners” y tintas para la xerografía, y la resonancia magnética, el tratamiento de aguas residuales, bioseparación y medicina. En particular, las partículas de magnetita tienen aplicación en la remoción de arsénico presente en fase acuosa. En este trabajo se sintetizaron nanopartículas de magnetita a partir de cloruro férrico hexa-hidratado con hidróxido de sodio, y otra reacción a partir de nitrato férrico con hidróxido sodio. Las reacciones de síntesis se realizaron mediante calentamiento a 60 °C y cada una en presencia de cuatro diferentes surfactantes dioctil sulfosuccinato de sodio (AOT), bromuro de dodeciltrimetil amonio (DTAB), bromuro de cetiltrimetil (CTAB), dodecil sulfato de sodio (SDS), y una sin surfactante, como punto de comparación. En la tabla 1 se muestran las condiciones para las reacciones de síntesis con cloruro férrico-hidróxido de sodio (A) y nitrato f-hidróxido de sodio (B).

Tabla 1. Condiciones de síntesis empleadas.


No. De Reacción	FeCl3	NaOH	FeNO3	H2O (mL)	Surfactante*
1	2.55108	1.14188		20	CTAB (0.3064)
2		1.12208	3.7612	20	AOT (0.3234)
3	2.55108	1.14188		20	DTAB (0.3125)
4		1.12208	3.7612	20	CTAB (0.3538)
5		1.12208	3.7612	20	DTAB (0.3333)
6	2.55108	1.14188		20	Sin surfactante
7	2.55108	1.14188		20	SDS (0.3121)
8		1.12208	3.7612	20	Sin surfactante
9		1.12208	3.7612	20	SDS (0.3031)
10	2.55108	1.14188		20	AOT (0.3031)

* Los valores mostrados entre parentesis corresponden a las cantidades empleadas de casa surfactante.

Se observó que bajo las condiciones de las reacciones 5 y 6 (Tabla 1) se forma principalmente magnetita de alta pureza (en presencia de CTAB y libre de surfactante, respectivamente). Sin embargo, para la reacción 6 se obtienen partículas de mayor tamaño y se observó una mayor aglomeración.

[1] M. Mohapatra, S. Anand, 2010. *Synthesis and applications of nano-structured iron oxides/hydroxides, International Journal of Engineering, Science and Technology*. Vol. 2, No. 8, 2010, pp. 127-146.





Obtención de Nanomateriales mediante ATRP, en presencia de NTCPM's, asistidos por ultrasonido.

IQ. Alberto Jorge Dávila Mendoza^a, Dra. Aidé Sáenz Galindo^b, Dra. Catalina Pérez Berúmen^c, Dra. Lluvia López López^d, Dr. Carlos Ávila Orta^e, LCQ. Janeth Valdez Garza^f.

^{a,b,c,d} Depto. de Química Orgánica. Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Autónoma de Coahuila. Blvd. Venustiano Carranza, 2500. Saltillo, Coahuila, México.

^{e,f} Depto. de Materiales Avanzados, Centro de Investigación de Química Aplicada. Blvd. Enrique Reyna Hermosillo No.140, 25250. Saltillo, Coahuila México.

e-mail de correspondencia: aidesaenz@uadec.edu.mx

Los nanocompuestos a base de polímero, formados por dos o más fases donde al menos una de estas fases tienen una de sus tres dimensiones en escala nanométrica, actualmente son de gran interés a causa de sus sorprendentes propiedades mecánicas y térmicas con respecto a materiales puros. Su obtención puede ser por diferentes vías destacando la polimerización *in situ*. Uno método novedoso que permite obtener polímeros específicos es la polimerización radicalica controlada, la cual permite tener distribución de peso molecular cercana a 1 y una variedad de arquitecturas complejas.

La más estudiada es la polimerización radicalica por transferencia de átomo (ATRP), es una técnica tolerante a la presencia de grupos funcionales y a una gran variedad de monómeros vinílicos [1]. Los polímeros preparados por ATRP se han producido comercialmente en EE.UU, Japón y Europa desde 2002. Estos polímeros se utilizan en áreas tales como: medicina, electrónica, materiales, farmacéutica, etc, con un gran número de aplicaciones [2].

ATRP resulta ser un método novedoso y sobre todo amigable con el medio ambiente para la obtención de nanomateriales, se ha reportado la obtención de nanomateriales incorporando nanopartículas de diferente naturaleza química, por ejemplo nanopartículas metálicas (Ag, Cu, Au, Fe, etc), nanofibras de carbono, nanotubos de carbón (NTC's) entre otras, para nuestro grupo de trabajo estas últimas son de interés, debido a las mejoras que se pueden obtener, como la resistencia mecánica y térmica del compuesto, así como brindarle propiedades eléctricas [3], la preparación de estos nanomateriales se puede llevar a cabo por diversas vías destacando al polimerización *in situ*, donde las nanopartículas juegan un papel muy importantes en diferentes parámetros destacando la velocidad de polimerización. En los últimos años se han buscado metodologías verdes para sintetizar nanocompuestos obteniendo un menor impacto en el ambiente, como la utilización de solventes amigables con el medio ambiente y utilizar técnicas alternativas como lo son el ultrasonido o las microondas, con el fin de que disminuyan el consumo de energía y ATRP, lograr cumplir estos requisitos, es decir se ajusta a la filosofía de la *Química Verde*.

Por lo que en este trabajo se presenta la síntesis de un nanocompuesto a base de NTCPM's y polimetilmetacrilato utilizando ATRP estudiando el efecto de la iniciación por ultrasonido como una técnica alternativa para disminuir el gasto energético. El nanocompuesto fue preparado utilizando: MMA como monómero, tolueno como solvente, etil bromo propionato como iniciador y biperidina como ligante con una relación de equivalentes de [100 MMA][1 ETBrP][0.01 CuBr][0.1 biperidina] y finalmente añadiendo 0.01g de NTCPM's, la caracterización se llevó a cabo mediante GPC, espectroscopia infrarroja empleando ATR, y Microscopia SEM, destacando la obtención del nanomaterial polimérico obtenido mediante ATRP, asistido por energía ultrasónica en la etapa de iniciación.

Bibliografía

1. Zaremski, M., Kalugin D, Y Golubev V. *Polymer Science Series A*. **2009** 51, 103–122.
2. Gao C., Wenwen L., Hisao M., Yutaka N. Y Toru M. *J. Phys. Chem. B*. **2006** 110, 7213–7220.
3. Seok H., Hyoung-Joon J., Moo-Chang K. Y Yu R., *Biomacromolecules*. **2006**, 7, 1280–1284





Respuesta reológica de polímeros asociativos por dinámica molecular

Cosme Parra Sánchez^a, Jorge Castillo Tejas^a

^aUniversidad Autónoma de Tlaxcala, Facultad de Ciencias Básicas, Ingeniería y Tecnología, Calzada Apizaquito S/N, Apizaco, Tlaxcala, 90300, México

RESUMEN

En este trabajo se estudia el comportamiento de los polímeros con modificaciones hidrófobas, utilizando la técnica de dinámica molecular. Los polímeros asociativos pueden ser de tres tipos: telequético, multiunión y combinados. Para representar una cadena de polímero se utiliza un modelo de grano grueso tipo *monómero-resorte* [1], donde una cadena es vista como una colección de sitios conectados entre sí por resorte no armónicos. En el modelo se considera que todos los sitios de una cadena tienen el mismo tamaño y energía de interacción, a excepción de los sitios hidrófobos, cuya energía de interacción es cinco veces mayor que la de un sitio no hidrófobo. La caracterización reológica se obtiene a partir de reproducir una condición de flujo de corte simple [2].

Los resultados indican la existencia de tres regímenes de concentración, en donde, la viscosidad de corte en tasa cero η_0 se incrementa con la concentración, de manera distinta para cada tipo de polímero. A bajas concentraciones $0.05 \leq \phi \leq 0.30$, η_0 es prácticamente la misma para los tres polímeros, indicando la no formación de agregados. En el intervalo $0.35 \leq \phi \leq 0.50$, la viscosidad se incrementa con la concentración con una pendiente de 1.22 y 0.65 para el polímero telequético y multiunión, respectivamente. Aparentemente, en este régimen los efectos de enredamiento son más importantes en los polímeros telequéticos por la ubicación de los sitios hidrófobos. A altas concentraciones $0.55 \leq \phi \leq 1.0$, la viscosidad incrementa con ϕ con una pendiente de 2.3 y 1.2 para los polímeros telequéticos y multiunión, respectivamente. Notar que la pendiente de aumento en la viscosidad del telequético es el doble que en el multiunión; tal que, a una $\phi = 1.0$ la viscosidad en tasa de corte cero es de 33.7, siendo tres veces mayor que la del multiunión. Lo anterior demuestra que el efecto espesante que tiene un polímero asociativo depende la colocación de los sitios hidrófobos en la cadena de polímero.


Agradecimientos:

Los autores agradecen el financiamiento recibido de la Universidad Autónoma de Tlaxcala, en el Marco del Programa CACyPI-UATx-2013.

Referencias:

- [1] K. Kremer, G. Grest, *J. Chem. Phys.* **1990**, 92, 5057.
- [2] D. Evans, G. Morriss, *Statistical Mechanics of Non-equilibrium Liquids*. **1990**, Academic Press, New York.





Flujo por presión para un fluido simple a través de una región de simulación cilíndrica usando dinámica molecular

Marino Vásquez Checa^a, Jorge Castillo Tejas^a

^aUniversidad Autónoma de Tlaxcala, Facultad de Ciencias Básicas, Ingeniería y Tecnología, Calzada Apizaquito S/N, Apizaco, Tlaxcala, 90300, México

RESUMEN

En este trabajo se utiliza la dinámica molecular de no equilibrio para generar el flujo por presión de un fluido simple a través de una región de simulación cilíndrica, como la mostrada en la Figura 1. El fluido simple es modelado con un potencial Lennard-Jones, las ecuaciones de movimiento para simular el flujo Poiseuille son resueltas con el Algoritmo de Verlet extendido a situaciones de no equilibrio [1], y las simulaciones son realizadas a temperatura constante utilizando el termostato de Nose-Hoover [2]. El flujo es generado aplicando un campo externo de fuerza F_e , en forma parabólica, a la entrada de la región de simulación; y por el tipo de confinamiento, únicamente se aplican condiciones de frontera periódica y de mínima imagen en la dirección del flujo.

Para simular el efecto de superficies rugosas se utilizan paredes estocásticas, es decir, si una partícula sale de la región de simulación en la dirección del gradiente, ésta es rechazada al interior y su velocidad es escalada a la temperatura [3]. A las condiciones de la simulación, el perfil de densidad $\rho(r)$ establece que existe un ordenamiento de las partículas en capas acentuado en la cercanía de la superficie. El campo de velocidad y esfuerzo es consistente con las predicciones de la mecánica del continuo, sin embargo, el fluido exhibe una violación a la condición hidrodinámica de no deslizamiento en la pared, misma, que se incrementa con el campo externo de fuerza F_e . Finalmente, los perfiles de presión muestran una pérdida lineal de la presión en la dirección del flujo.

Agradecimientos:

Los autores agradecen el financiamiento recibido de la Universidad Autónoma de Tlaxcala, en el Marco del Programa CACyPI-UATx-2013.

Referencias:

- [1] D. Frenkel, B. Smit, *Understanding molecular simulation. From algorithms to applications*, 2002, Academic Press, New York.
- [2] S. Nose, *J. Chem. Phys.* **1984**, 81, 511.
- [3] D.C. Rapaport, *The art of molecular dynamics simulation*, 2004, Cambridge University Press, United Kingdom.



Obtención de nanopartículas de estireno-acrilato de butilo en microemulsión, usando como surfactante reactivo Hitenol BC10, en régimen semi-continuo

César Bladimir Cázares Rodríguez^a, Victor Manuel Ovando Medina^a

^aIngeniería Química, Coordinación Académica Región Altiplano (COARA), Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Carretera a Cedral KM 5+600, Ejido San José de las Trojes, Matehuala, S.L.P., México.

cis787@hotmail.com

El interés por la polimerización en microemulsión se inició a principios de la década de los ochenta como una extensión de los estudios que se efectuaron sobre el empleo de las microemulsiones en la recuperación terciaria del petróleo. Las microemulsiones permiten crear microlátexes cuyas principales aplicaciones son la microencapsulación y la liberación de fármacos, el recubrimiento de superficies, los adhesivos, lubricación, etc. La gran estabilidad y el pequeño tamaño de partícula de estos microlátexes permiten un manejo más seguro y una liberación más eficiente que la que se obtiene actualmente con látex preparados mediante polimerización en emulsión. Los microlátexes también pueden ser utilizados para la inmovilización de anticuerpos y en la encapsulación de células, para estudios de difusión en reacciones fotoquímicas y para producir materiales porosos en ultrafiltración así como polímeros conductores.

El presente trabajo consta sobre el estudio de la copolimerización de estireno con acrilato de butilo en microemulsión, a una proporción de estireno:acrilato de butilo de 80:20 (peso:peso) bajo un régimen semi-continuo, y empleando como innovación el surfactante Hitenol BC10, el cual es un surfactante reactivo y se puede incorporar a la cadena polimérica creando así un polímero con mejor resistencia a la absorción de agua cuando forma películas. Se observó que al disminuir la velocidad de adición de monómeros al reactor, la conversión instantánea se incrementa y tiende a un valor aproximadamente constante a un menor tiempo de polimerización. Un ejemplo de este efecto se muestra en la Figura 1.

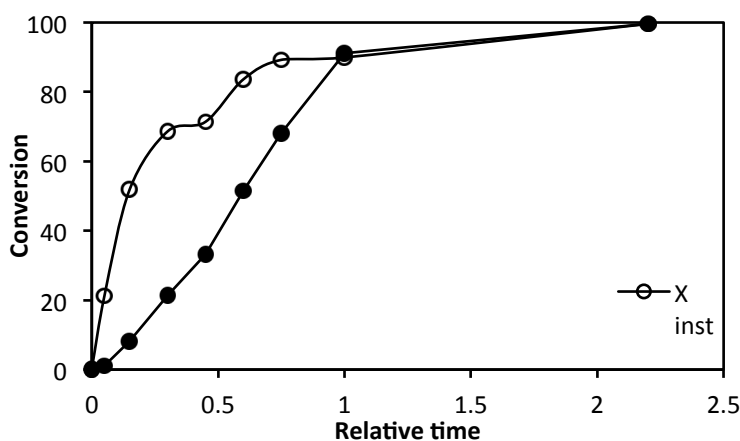


Figura 1. Evolución de la conversión instantánea (símbolos vacíos) y de la conversión global (símbolos llenos) con respecto al tiempo relativo para una velocidad de adición de 0.8 g/min en la copolimerización en microemulsión en régimen continuo.



Síntesis de poliacrilamida entrecruzada mediante polimerización en microemulsión inversa

Francisca Eréndira Silva-Aguilar^a, Víctor Manuel Ovando-Medina^a, Miguel Ángel Corona-Rivera^a

^a Departamento de Ingeniería Química, Coordinación Académica Región Altiplano (COARA). Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Carretera a Cedral Km 5+600, San José de las Trojes, Matehuala, SLP, 78700, México. E-mail: coronamiguelangel@yahoo.com.mx

Resumen

En este trabajo, se ha estudiado la influencia de la naturaleza del sistema tensoactivo, la concentración de monómero (acrilamida), la concentración de hexanol (Hx) como cosurfactante, la naturaleza de la fase oleosa y el efecto de los diferentes iniciadores utilizados en la obtención de nanopartículas de acrilamida mediante polimerización en microemulsión inversa. Los resultados muestran que con los iniciadores: peróxido de benzoilo (PB), persulfato de amonio (APS) y dihidrocloruro de 2,2-azobis(amidinopropano) (V-50) se obtuvieron microemulsiones estables empleando una relación en peso de sal sódica del sulfosuccinato de bis (2-etilhexilo) /fase continua (AOT/tolueno) de 15:85 con una conversión de acrilamida de 95, 92 y 99% respectivamente, además, se obtuvieron diámetros de partícula (D_p) menores a 100 nm. En todos los casos se obtuvieron distribuciones de tamaño de partícula estrechas.

Introducción

El concepto de la polimerización en microemulsión apareció alrededor de 1980, al parecer como consecuencia de los numerosos estudios realizados en sistemas de microemulsión después de la crisis del petróleo de 1974. Desde entonces, este campo se ha desarrollado rápidamente como se puede constatar en el número creciente de publicaciones sobre polimerización en microemulsión [1]. Las microemulsiones son fluidos termodinámicamente estables que se forman espontáneamente mediante el mezclado de una fase orgánica y una fase acuosa en presencia de un tensoactivo en las proporciones adecuadas. Mediante la polimerización en microemulsión, es posible obtener nanopartículas poliméricas con altas masas molares y con una variedad de microestructuras, las cuales influyen en sus propiedades [2]. En una conferencia pronunciada en 1959, Richard Feynman sugirió que los dispositivos y materiales podrían algún día ser fabricados según las especificaciones atómicas. La materialización de la visión de Feynman es el campo que ahora se llama nanotecnología, una disciplina que trabaja en la escala nanométrica ($1\text{nm}=10^{-9}\text{m}=10\text{Å}$), la cual prevé la posibilidad de controlar la estructura de la materia a nivel molecular [3].

Las microemulsiones inversas son microemulsiones de agua en aceite con estructura globular constituida por gotas de agua dispersas en la fase orgánica. Las partes polares del tensoactivo están orientadas hacia el interior de la micela, mientras que las cadenas hidrófobas están orientadas hacia el exterior. El medio continuo es el orgánico [3].

Metodología

Se utilizó agua destilada, AOT como tensoactivo, APS, V-50, KPS y PB como iniciadores, acrilamida (AA) como monómero y N,N'-metilenbisacrilamida (NMBA) como entrecruzante. Las reacciones se realizaron en un reactor de vidrio con chaqueta de enfriamiento/calentamiento y con capacidad de 250 ml, empleando agitación magnética constante y una temperatura de 70 °C. El tensoactivo, hexanol y el tolueno fueron colocados en el reactor, posteriormente se agregó una solución de entrecruzante, monómero y agua, y se burbujeó nitrógeno durante todo el tiempo de reacción para desplazar el oxígeno disuelto en el agua. Finalmente, se agregó el iniciador para dar inicio a la polimerización, dejándola reaccionar durante 2 horas.

Agradecimientos al proyecto CONACYT de la convocatoria Ciencia Básica: **CB-169444**

Referencias

1. Pavel, F.M., "Microemulsion Polymerization", J. Disp. Sci. Tech. 25, 1, 1-16. (2004).
2. Ovando Medina V. M., Martínez Gutiérrez H., Mendizábal E., Corona M. A., Peralta R. D., J. Appl. Polym. Sci. 111, 329-337, (2009).
3. Herrera Barros A. P., Tesis de maestría, Universidad de Puerto Rico Campus Mayagüez. Puerto Rico. (2005).





Síntesis de hidrogeles de poli(acrilamida-co-ácido acrílico) interpenetrados con polipirrol

Nicolás Alejandro Torres-de-León^a, Víctor Manuel Ovando-Medina^a, Miguel Ángel Corona-Rivera^a

^a Departamento de Ingeniería Química, Coordinación Académica Región Altiplano (COARA). Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Carretera a Cedral Km 5+600, San José de las Trojes, Matehuala, SLP, 78700, México. E-mail: coronamiguelangel@yahoo.com.mx

Resumen

En este trabajo se sintetizaron hidrogeles interpenetrados (IPNs) por sus siglas en inglés (Interpenetrating Polymer Networks) mediante polimerización en solución, los hidrogeles basados en poli(acrilamida-co-ácido acrílico) y polipirrol, utilizando como agente entrecruzante N,N-metilenbisacrilamida (NMBA) y utilizando como iniciador persulfato de potasio (KPS). Este estudio se refiere a la preparación de nuevos sistemas compuestos en los que el hidrogel entrecruzado de poli(acrilamida-co-ácido acrílico) es una matriz y el polipirrol es un componente electroconductor. Los efectos sobre las condiciones de síntesis, la estructura de los sistemas compuestos, su capacidad de hinchamiento en agua, y las características mecánicas son estudiados. El procedimiento de síntesis propuesto permite la producción de un tendido eléctrico que es la fase del polipirrol en la matriz del hidrogel. Se estudió el efecto de la concentración del agente entrecruzante en el hidrogel y el carácter de distribución de polipirrol en la matriz. En el composito anterior se combinan las características eléctricas del polipirrol con la alta elasticidad y la capacidad de hincharse repetidamente del hidrogel entrecruzado.

Introducción

Para el desarrollo de una nueva generación de materiales, los llamados sistemas sensibles a estímulos que cambian sus características en respuesta a una acción externa o en diferentes condiciones externas son de especial interés. En este contexto, la atención de los investigadores se ha centrado en hidrogeles poliméricos, que presentan una marcada respuesta a diversos estímulos.

Los hidrogeles a base de polielectrolitos reticulados con un alto grado de hinchamiento no sólo absorben agua en cantidades superiores a cientos o miles de veces su masa original, si no, también retienen el agua a una presión determinada. El volumen de un hidrogel cambia durante las variaciones de temperatura, pH, la composición química del medio circundante, y el voltaje del campo eléctrico externo, por lo que se utilizan ampliamente como promotores de diversos agentes. Desde el punto de vista práctico, entre todos los posibles medios de activación, el campo eléctrico tiene una importancia especial, ya que permite un control efectivo sobre la intensidad de un estímulo externo y la integración de material de una manera que ahorra espacio en los sistemas electromecánicos. Sin embargo, debido a la baja conductividad inherente de una red polimérica del hidrogel, la respuesta de volumen se retarda considerablemente. Este problema puede ser resuelto mediante el desarrollo de sistemas compuestos de una matriz de hidrogel y un componente conductor distribuido en su volumen. Como este componente, los polímeros conductores que han atraído mucha la atención de los investigadores, debido a las ventajas prometedoras de su aplicación práctica en los componentes en la electrónica, sensores, y los sistemas electromecánicos son de máximo interés [1,2]. Los polímeros conductores también tienen capacidad de absorber radiación electromagnética, específicamente microondas (MW), que inducen el colapso de volumen por absorción de MW y luz láser (IR) [3].

Agradecimientos al proyecto CONACYT de la convocatoria Ciencia Básica: **CB-169444**

Referencias

1. Ali T. O., Surf. Coat. Technol. 200, 3918 (2006).
2. Guo M. Y., Wei Y., MacDiarmid A. G., and Lelkers P. I., Biomaterials 27, 2705 (2006).
3. Smirnov M. A., Bobrova N. V., Yu I. Dmitriev, Bukolšek V., Elyashevich G. K., Polymer Science, 53, 1., 67–74. (2011).





Aplicación del comparador óptico en la lectura de ángulos de contacto en gotas sentadas

Martha A. Cerpa-Gallegos^{1*}, Silvia B. Mercado-Ramírez, Edgar E. Leal-Martínez¹, Manuel del Río-Gama², Vicente A. Lara-Valencia¹ Diana M. Figueroa Flores³.

¹Divisiones de Máquinas-Herramienta y Manufactura de Plástico y ²Informática del Centro de Enseñanza Técnica Industrial (CETI), Nueva Escocia No. 1885, Guadalajara, Jal. México.
E-mail: cerpag@ceti.mx

³Universidad de Guadalajara Departamento de Ingeniería Química.
E-mail: cicerinus.rioga@gmail.com

Todo a nuestro alrededor tiene una explicación lógica y racional, un proceso una acción, todo tiene su causa, sus factores y así mismo, sus efectos. Es así como se comienza a comprender que hasta algún pequeño detalle que se puede considerar por muchos trivial y sin función, para otros llega a ser de inmensa trascendencia, así es el poder de la ciencia.

Uno de estos comportamientos que parece tener vaga investigación pero que sin embargo tiene un gran impacto en distintos medios, es el del entendimiento de las tensiones tanto interfaciales como superficiales, y la relación que tiene esta propiedad con el ángulo de contacto que desarrollan todas las sustancias o materiales entre sí¹, esto a su vez tiene una relación directa desde, como un indicador de la estructura química de un material, hasta para la aplicación industrial en el área de las pinturas, recubrimientos, adhesivos¹, detergentes² y cosmética entre un sin fin por numerar.

Aunque en este trabajo sólo nos limitaremos por cuestiones de complejidad del tema a explicar lo relacionado a la implementación del método de medición del ángulo de contacto mediante el uso del comparador óptico; cuya práctica no es convencional en el área de la industria química. Siendo una posible alternativa para sustituir el empleo del goniómetro.

Fue posible implementar el método en la obtención de valores de ángulo de contacto para solventes y polímeros, haciendo uso del comparador óptico, se llegó a la conclusión que los datos obtenidos del estudio reducen el factor de error considerando que al amplificar la imagen disminuye la imprecisión de la medición. Los experimentos se llevaron a cabo con una precisión de 1.0 μm , para las magnitudes lineales y de 1 s para las angulares^{3,4}.

Referencias

1. S. Wu, Polymer Interface and Adhesion, New York, Marcel Dekker, Inc., **1982**, Cap. 8, 9
2. A.W. Adamson, Physical Chemistry of Surfaces, New York, Wiley Interscience, 1990, Cap. 13
3. A. Escamilla Esquivel. Metrología y sus Aplicaciones, **2009**, 138
4. R. Zeleny, Metrología Dimensional II para la Verificación Geométrica del Producto, Instituto de Metrología Mitutoyo, **2000**





Degradación de poliuretanos residuales de la industria del calzado

Martha A. Cerpa-Gallegos 1, Silvia B. Mercado-Ramírez, Myrna D. Barrientos- Almaguer1, Laura G. Estrada-Guerrero1, Manuel del Río-Gama2, Vicente A. Lara-Valencia1*

*¹División de Máquinas-Herramienta y Manufactura de Plásticos, Centro de Enseñanza Técnica Industrial (CETI), Nueva Escocia No. 1885, Guadalajara, Jal. México.
E-mail: cerpag@ceti.mx*

²Universidad de Guadalajara Departamento de Ingeniería Química

Las necesidades del mundo actual cada vez están más dirigidas a reutilizar, reciclar y reducir los materiales de desecho derivados de procesos industriales, lo cual represente beneficios tanto ambientales como monetarios. En este sentido los materiales poliméricos que se producen en gran volumen, han cobrado interés como punto de estudio sobretodo en el reciclado¹, siendo uno de estos el poliuretano.

Por otro lado los poliuretanos son materiales poliméricos cuya gama de aplicaciones industriales es muy amplia debido a sus propiedades de flexibilidad, elevada resistencia al impacto y durabilidad. En la industria biomédica están cobrando importancia por ser biodegradables y no tóxicos², entre sus aplicaciones médicas destacan en la fabricación de parches, apósitos³, catéteres y microcápsulas⁴.

En el presente trabajo se llevaron a cabo ciclos de degradación térmica y de foto envejecimiento de poliuretanos derivados de la industria del calzado, los materiales fueron sometidos a degradación por períodos cortos y prolongados, durante los cuales se llevó a cabo caracterización óptica y de desgaste para las superficies. Se lograron degradar las muestras de poliuretano, así mismo sus propiedades se vieron afectadas después de este proceso.

Por los motivos mencionados con anterioridad en este trabajo se presenta un estudio de degradación para poliuretanos derivados del proceso de la industria del calzado, que servirá de soporte para una propuesta futura de la reutilización de este material en otro proceso productivo.

Referencias

1. T. Thomson Polyurethanes as Specialty Chemicals. CRC, **2004**
2. H. Sheikh. International Journal of Adhesion and Adhesives. **2000**, 20, 299-304
3. I. Gutiérrez, A. Sagrador Rasero, F. Pérez Hernández, FAP, **2004**, 2 (3), 89
4. J. H. Park, M. Ye, K. Park, J. Molecules, **2005** 10, 151





Estudio de microcinética de hinchamiento de biohidrogeles

Vicente A. Lara-Valencia^{1,2*}, Martha A. Cerpa-Gallegos², Myrna D. Barrientos-Almaguer², Laura G. Estrada-Guerrero²

¹ Departamento de Ingeniería de Proyectos, CUCEI, Universidad de Guadalajara, José Guadalupe Zuno 48, Los Belenes, Zapopan, Jalisco, México C. P. 45100 E-mail: vicentelaval@gmail.com

² Manufactura de Plásticos, Centro de Enseñanza Técnica Industrial, Nueva Escocia 1885, Guadalajara, Jalisco 44630 México.

El hueso de *Persea americana* variedad Hass está constituido en su mayor parte (35%) por almidón¹, además de azúcares reductores^{4,5}, extractos de éter, fibra, taninos y polifenoles^{2,3}; el almidón formado por dos tipos de estructurales de amilosa y amilopectina⁴. Estas estructuras se mantienen con esa forma tan característica gracias a los puentes de hidrógeno y a las fuerzas hidrofóbicas, que mantienen unidos los monosacáridos de dichas moléculas⁵.

Toda esta disposición otorga al polisacárido una estabilidad, que permite que estas moléculas sean empleadas en la formulación de polímeros naturales, constituyendo redes poliméricas tridimensionales interpenetradas o formando parte de la red principal, afectando la conformación estructural a la capacidad de absorción de agua. Además con el aumento de la densidad de entrecruzamiento, hay un incremento de la hidrofobicidad, trayendo como consecuencia una correspondiente reducción en la capacidad de estiramiento de la red de polímero⁶.

En el presente trabajo, se propone un estudio de microcinética de hinchamiento de hidrogeles acrílicos y polisacáridos extraídos en hueso de *Persea americana* variedad Hass, sintetizados con diferentes mezclas de acrilamida/ácido acrílico/polisacárido, mediante polimerización solución por vía redox. Para realizar la caracterización de microcinéticas se empleó microscopía óptica, en donde se utilizaron probetas con dimensiones de 0.5x0.5cm a 25 °C, observándose a diferentes tiempos de microhinchamiento y niveles de entrecruzamiento.

Referencias

1. Pahua Ramos, M. E., Ortiz Moreno, A., Chamorro C., G., Garduño S., L. (2007). Estudio de las propiedades de la semilla de aguacate (*Persea americana*) variedad Hass, para el aprovechamiento integral del fruto. En: IX Congreso de ciencia de los alimentos y V Foro de ciencia y tecnología de alimentos.
2. Shojiro Tango, J., Limonta Carvalho, C. R., Soares, N. B. (2004). Physical and chemical characterization of avocado fruits aiming its potential for oil extraction. *Rev. Bras. Frutic.*, 26 (1), 17-23.
3. García-Fajardo, J. A., Ramos-Godínez, M. del R., Mora-Galindo, J. (1999). Estructura de la semilla de aguacate y cuantificación de la grasa extraída por diferentes técnicas. *Revista Chapingo Serie Horticultura*, 5, 123-128
4. Bello-Perez, L. A., Rodríguez-Ambríz, S. L., Sánchez-Rivera, M. M., Agama-Acevedo, E. (2010). Starch macromolecular structure. En Bertolini, A. C. (Ed.) *Starches-Characterization, properties and applications*. (Cap. 1). Florida: CRC Press.
5. Idem 4, Capítulo 3
6. Pal, K., Banthia, A. K., Majumdar D. K. (2009). *Polymeric Hydrogels: Characterization and Biomedical Applications – A mini review*. *Designed monomer and polymers*, 12, 197-220.





Síntesis y caracterización de copolímeros de poli(acrilonitrilo-acetato de vinilo) aleatorio.

Pedro R. garcía Morán^a, Shirley Carro Sánchez^b, Humberto vázquez Torres^c

^{a,b}Facultad de Ciencias Básicas, Ingeniería y Tecnología, UATx

^cUniversidad Autónoma Metropolitana, Iztapalapa

pedrogarciamoran@gmail.com

El polibutadieno es el material elastomérico por excelencia; del cual, alrededor del 70% es utilizado en la manufactura de llantas; el 25% es usado como modificador de impacto en productos de estireno, por ejemplo en el poliestireno de alto impacto (o HIPS, por High Impact Polystyrene) y, en la producción del terpolímero acrilonitrilo butadieno estireno (ABS), con el que se fabrican muchos productos de consumo, y el resto en productos diversos [1]. Un material elastomérico interesante es el nitrilo butadieno (HNBR) hidrogenado. Cuyas aplicaciones incluyen sellos automotrices, mangueras y bandas automotrices, en accesorios en la industria petrolera; revestimientos para molinos de rodillos de acero o papel, y situaciones que requieran un rendimiento alto del elastómero. Los HNBR son producidos por la hidrogenación selectiva de los dobles enlaces C-C libres en el acrilonitrilo butadieno. Luego de la hidrogenación, se tiene un copolímero de etileno y acrilonitrilo con pequeñas proporciones de butileno y dobles enlaces residuales. Pero la diferencia en las reactividades implica que la copolimerización directa entre etileno y acrilonitrilo no puede ser llevada a cabo, a menos que se empleen muy altas presiones. Sin embargo, bajo estas condiciones se enfrentan otras dificultades como la falta de homogeneidad. Un copolímero con propiedades físicas similares a las del HNBR podría ser obtenido por la terpolimerización de etileno, acrilonitrilo y acetato de vinilo. Sin embargo, debido a la gran diferencia de reactividades, solo se ha obtenido un limitado éxito en su polimerización en masa y a presiones de alrededor de 2000 bares. Por lo que resulta interesante buscar un proceso para producir este material. En este proyecto se estudia la copolimerización de acrilonitrilo acetato de vinilo y sus propiedades viscoelásticas. La meta es preparar un copolímero aleatorio y la evaluación de sus propiedades como elastómero. La diferencia en reactividades entre el acrilonitrilo y el acetato de vinilo, 10:1 aproximadamente, dificulta su síntesis [2]. La diferencia de reactividades podría salvarse empleando un proceso semibatch ofrece para sintetizar un copolímero aleatorio. Aprovechando la diferencia de reactividades se han preparado copolímeros en bloque de poli(acetato de vinilo-b-acrilonitrilo) en solución, usando dimetil formamida como disolvente y un iniciador tipo azo, como el 2,2'-azobis(4-metoxi-2,4-dimetilvaleronitrilo), (V70), en atmósfera de nitrógeno, a 30 °C, luego de 26 horas de reacción alcanzaron 46% de conversión [3]. También han sido sintetizado copolímeros por dispersión en agua desionizada utilizando persulfato de potasio (KPS) y bisulfato de sodio como iniciador (SBS) redox, haciéndolo reaccionar por 3 horas a 40°C alcanzaron conversiones que van del 53 al 88% [4]. En este proyecto se está trabajando en la preparación de un copolímero aleatorio de acrilonitrilo-acetato de vinilo por un proceso semicontinuo (semibatch), con la finalidad de compensar las diferencias en las reactividades de los dos monómeros. Se espera hacer estudios de copolimerización tanto en solución como por dispersión o incluso por emulsión.

Las muestras resultantes se caracterizarán por espectroscopía de infrarrojo, FTIR, resonancia magnética nuclear de hidrógeno para conocer la microestructura. Se harán estudios de sus propiedades viscoelásticas para determinar sus cualidades como elastómeros. Finalmente se determinarán sus propiedades térmicas por calorimetría de barrido diferencial (DSC).

[1] Fritz Ullmann, Matthias Bohnet. Encyclopedia of industrial chemistry. Volume 11. Rubber chapter

[2] N.T. McManus, A. Penlidis, G.L. Rempel. Dev. Chem. Eng. Mineral Process., 6(3/4), p p.153-170

[3] Debuigne, A; Warnant, J; Jerome, R; Voets, I; de Keiser, A; Cohen Stuart, M, A; Detrembleur, C. Macromolecules 41, 2353-2360, 2008.

[4] Han N, Zhang, X, X; Wang, X, C. Iranian Polymer Journal. 19 (4), 243-253, 2010.





Obtención de curva de saturación para etanol mediante Simulación Monte Carlo

*M. Fernández-Vázquez, B. J. Ordoñez Aguirre, F. López Medina**

Universidad Autónoma de Tlaxcala, Facultad de Ciencias Básicas, Ingeniería y Tecnología. Licenciatura en Ingeniería Química. Calzada Apizaquito s/n, Apizaco, Tlaxcala. México.

[*frine76@hotmail.com](mailto:frine76@hotmail.com), lopezmedinafrine@gmail.com

Introducción. Las soluciones son mezclas homogéneas de partículas de dos o más sustancias sólidas, líquidas y gaseosas; constituidas por un soluto y uno o varios solventes. En el estudio de soluciones electrolíticas el solvente más común es el agua, también se emplean alcoholes o mezclas de agua-alcohol(es). Los alcoholes más usados en este tipo de soluciones son el metanol y etanol. Estos se han empleado en mezclas binarias como solvente y se han estudiado con profundidad de manera experimental y en las últimas décadas, se han abordado mediante el uso de técnicas de simulación molecular (SM) tanto Monte Carlo (MC) como Dinámica Molecular (DM). Desde la perspectiva de SM existen varios modelos moleculares reportados en la literatura para describir el agua y alcoholes. Específicamente para alcoholes, los más empleados son conocidos como modelos rígidos^{2,4} y flexibles. Ambos enfoques incluyen interacciones repulsivas, atractivas y electrostáticas, abordándolas con diferentes procedimientos. En este trabajo se desea estimar densidades y presiones para etanol puro a diferentes temperaturas empleando técnicas MC. Este estudio representa una etapa preliminar para la determinación de propiedades termodinámicas de solventes ternarios para soluciones electrolíticas.

Metodología: Se está generando un código computacional empleando técnicas MC con ensamble de Gibbs (NVT), el cual describe las interacciones moleculares existentes entre moléculas de etanol en el equilibrio. La simulación en el ensamble de Gibbs Canónico se desarrolla utilizando dos regiones de simulación (fases líquida y vapor), cada una con condiciones de frontera periódicas. Las cajas se mantienen a una temperatura constante T, el volumen total de las dos regiones es fijado en V y el número de moléculas total permanece también constante. Se realizan los siguientes movimientos Monte Carlo: desplazamiento de partículas, fluctuación de volumen e intercambio de partículas entre ambas cajas de acuerdo con el algoritmo para este ensamble¹. Se emplea un modelo molecular rígido para caracterizar al etanol empleado por Guevara-Carrion y col.² Este modelo está constituido por el potencial Lennard-Jones y el potencial coulombico. Se aplican reglas de combinación de Lorentz-Berthelot. El sistema se ubica en un enrejado cubic simple. Se emplean correcciones para las interacciones de largo alcance del etanol, ya que es una molécula altamente polar. La técnica empleada es llamada Reaction Field (RF) y se utiliza la propuesta por Chen y col.³ Además, se realiza un truncamiento a las interacciones de largo alcance empleando la técnica Truncation and shift⁵. Los parámetros del etanol empleado son mostrados en Tabla 1², en donde k_B es constante de Boltzmann, σ es el tamaño de especie, ϵ es el parámetro de interacción energética y e es la carga electrónica.


Tabla 1. Parámetros Lennard-Jones y puntos de carga del modelo molecular para etanol.

Sitio	σ_{aa} Å	ϵ_{aa}/k_B K	q_{ia} e
CH ₃	3.6072	120.15	-
CH ₂	3.4612	86.291	+0.25560
OH	3.1496	85.053	-0.69711
H	-	-	+0.44151

Referencias Bibliográficas

- [1] Allen, M. P. y Tildesley, D. *Computer Simulation of Liquids*, 1987. Oxford University Press inc., USA.
- [2] Guevara-Carrion, G.; Nieto-Draghi, C.; Vrabc, J. y Hasse, H. *J. Phys. Chem. B.* **2008**, 112 (51), 16664-74.
- [3] Chen, B., Potoff, J., Siepmann, I. *J. Phys. Chem. B.* **2001**, 105, 3039-3104.
- [4] Taylor, R. S.; Shields, R. L. *J. Chem. Phys.* **2003**, 119,12569.





Biosíntesis de nanopartículas de oro y titanio usando látex de *Jatropha curcas*.

A. Netzahual Xolocotzi¹, J. Alarcón León¹, B. Chávez Aguila², A. M. Ríos Cortés², Orlando Zaca Moran², A. Orduña Díaz, Marlon Rojas Lopez², R. Delgado Macuil², V. López Gayou²

¹ Universidad Politécnica de Tlaxcala, San Pedro Xalcaltzinco, Tepeyanco, Tlaxcala. C.P. 90180,

² Centro de Investigación en Biotecnología Aplicada, Carretera Estatal Tecuexcomac-Tepetitla Km 1.5, Tlaxcala C.P. 90700

La síntesis de nanopartículas de metales nobles ha cobrado gran importancia hoy en día debido a sus múltiples aplicaciones en medicina, catálisis, electrónica y óptica [1]. Las nanopartículas de oro, han tomado gran relevancia debido a sus aplicaciones biomédicas principalmente, por su parte el dióxido de titanio (TiO₂) al ser un compuesto no tóxico se aplica en la fabricación de muchas sustancias cotidianas tales como pinturas y cosméticos [2]. La reciente implementación de métodos biotecnológicos en la obtención de nanoestructuras metálicas ha tomado gran relevancia en ciencia de materiales [3,4]. El uso de microorganismos tales como bacterias, levaduras, hongos, actinomicetos y las plantas se ha empezado a utilizar en la biosíntesis de nanoestructuras metálicas, debido a su simplicidad y respeto al medio ambiente, ya que es un método ecológico[4]. De esta manera se han logrado sintetizar nanopartículas metálicas a partir de plantas como la alfalfa, el aloe vera, *Cinnamomum camphora*, *Azadirachta indica*, *Embllica officinalis*, hierba de limón y la *Jatropha curcas*. *Jatropha curcas* ha surgido como un agente importante en la reducción y la estabilización de nanopartículas metálicas [5]. El látex y extracto de semilla de *J. curcas* se ha utilizado en la síntesis de nanopartículas de plata y plomo [4]. En la presente investigación se muestra una síntesis sencilla y rápida de nanopartículas de Au y TiO₂ utilizando látex de *Jatropha curcas* como agente reductor. Las nanopartículas sintetizadas fueron caracterizadas mediante espectroscopia UV-Vis y Microscopía electrónica de barrido. Para llevar a cabo la síntesis de las nanoestructuras utilizamos látex de *Jatropha curcas* obtenido de Huixilan Puebla, el cual fue diluido de 0.1% hasta 1% en agua desionizada. Las soluciones de Oro y titanio fueron adquiridas a sigma aldrich y ambas fueron preparadas en agua desionizada a una razón molar de 1mM. Una vez que se tienen las soluciones fuente estas fueron mezcladas y agitadas a 350rpm a temperatura ambiente por 4Hr. Una vez sintetizadas las nanoestructuras de oro y dióxido de titanio estas presentan un cambio de coloración en el caso de oro un color rojo purpura y en el caso de dióxido de titanio un color café, lo cual nos indica la presencia de las nanoestructuras. Esto fue corroborado mediante UV-Vis observando sus plasmones característicos de oro (540nm) y dióxido de titanio (385nm). Las micrografías de TEM, muestran que el látex de *Jatropha curcas* favorece la formación de nanopartículas esféricas con un tamaño promedio de 17nm para el caso de oro y de 44nm para dióxido de titanio. Se observa también que los parámetros que controlan el tamaño y la forma de la nanopartículas, es la concentración de iones Au y Ti en la solución precursora, aunque el volumen del agente reductor empleado es el parámetro que ejerce una mayor influencia sobre las características de las nanopartículas.

Literatura citada

- [1] R. Moctezuma, V. Néstor, S. Mendieta. Superficies y Vacío. 2010. 23: 94-97.
- [2] Joerger R, Klaus T, Granqvist CG. Adv Mater 2000. 12- 407
- [3] Tolles WM, Rath BB. Curr Sci 2003. 85- 1746.
- [4] H. Bar, D. Bhui, G. Sahoo, P. Sarkar, P. Sankar, A. Misra. Colloids Surf A Physicochem Eng Asp. 2009. 339:134-139.
- [5] H. Bar, D. Bhui, G. Sahoo, P. Sarkar, S. Pyne, A. Misra. Colloids Surf A Physicochem Eng Asp. 2009. 348:212-216.



Preparación y caracterización de dispersiones solidas de Furosemida utilizando como acarreador Poliacrilamida

Valeria Jordana Gonzalez Coronel^{a,c}, Marco Antonio Gonzalez Coronel^b, Julio Cesar Rico Sanchez^b

^aFacultad de Ingeniería Química, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Puebla, México

^bFacultad de Ciencias Químicas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Puebla, México

La mejora de la biodisponibilidad oral de fármacos de baja solubilidad en agua sigue siendo uno de los aspectos que presenta mayores desafíos en el desarrollo de fármacos. Es necesaria que la disolución del fármaco sea asegurada, con el objetivo de obtener una mejor absorción y biodisponibilidad para que esto permita ejercer la acción terapéutica para la cual están destinados los fármacos. La furosemida aumenta la excreción de sodio, cloro, potasio, hidrógeno, calcio, magnesio, bicarbonato, amonio y fosfatos. Lo que la hace un excelente diurético, sin embargo su problema consiste en que es rápidamente absorbida del tracto gastrointestinal porque así como se absorbe se elimina (corta duración de diuresis). Siendo su $T_{máx}$ de 1-1.5 horas. Su absorción muestra una gran variabilidad inter e intraindividual por lo que la intención de este proyecto es preparar dispersiones solidas de furosemida con un acarreador de poliacrilamida.

En la figura 1 se presenta la cinética de disolución realizada a una tableta comercial y a una mezcla de furosemida-poliacrilamida (solo la relación 1:0.5). La tableta comercial va disminuyendo de una forma gradual en las concentraciones de fármaco. Esta disolución es superada ampliamente en cualquiera de las concentraciones que se usaron del polímero en nuestras dispersiones sólidas, también al hacer el análisis encontramos que en las disoluciones la dispersión sólida que da mejores resultados es la de concentración menor de polímero poliacrilamida (1: 0,5). Solo se muestra la concentración mínima de polímero utilizada sin embargo fue esta la que mayor liberación de fármaco presentó. Otro dato importante a destacar es que mientras la tableta comercial disminuye considerablemente su concentración, la mezcla analizada sostiene la concentración de fármaco, lo cual es muy deseable desde el punto de vista terapéutico.

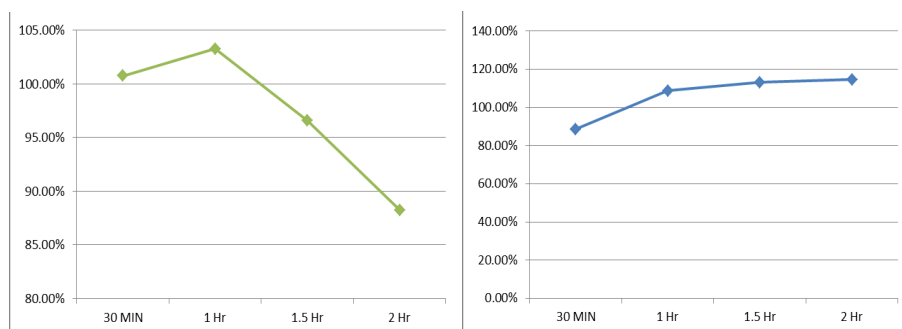


Figura 1. Cinética de disolución obtenida de una disolución de :a) tabletas de furosemida de una marca comercial , b) una dispersión sólida (fármaco : polímero) concentración: (1: 0.5) (furosemida: poliacrilamida)

1. M. T. Marín Boscá, "Características físicas y propiedades de disolución de dispersiones solidas de oxazepam con carbomero 934P", 2007, Granada, España, p 311-322.
2. Win. L. Chiou, S. Riegelman, "Pharmaceutical applications of solid dispersion systems". Estados Unidos de Norteamérica, 1971, p 1281-1302.
3. Tejas Patel, "Formulation and characterization of solid dispersions containing glibenclamide" USA, , 2010, p 138-141.

Síntesis, y caracterización de un copolímero tribloque, con estructura tipo telequérico obtenido por polimerización RAFT

Valeria Jordana Gonzalez Coronel^{*a}, Sandra Avila Rueda^a, Ramiro Guerrero Santos^b, Hortensia Maldona Textle^b, Judith Cabello Romero^b, Nancy Tepale Ochoa^a

^aFacultad de Ingeniería Química, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Puebla, México

^bCentro de Investigación en Química Aplicada, Coahuila, México

La estructura básica de los polímeros asociativos está constituida principalmente de una cadena soluble en agua con pequeños grupos hidrófobos, los cuales pueden estar repartidos a lo largo de la cadena (polímeros multiuniones), en los extremos de la cadena (polímeros telequéricos) o tanto en los extremos como en el interior de la cadena hidrosoluble (polímeros combinados) [1-3, 8].

Para el caso particular de las poli(acrilamidas), se encuentran estudios con copolímeros de acrilamida y monómeros hidrófobos obteniéndose polímeros multiunión [1]. En función de esto, en el presente estudio se plantea obtener copolímeros tribloque hidrosolubles del tipo B-A-B, poli-(Dodecilacrilamida-b-Acrlamida-b-Dodecilacrilamida) funcionalizados en los extremos con cadenas hidrocarbonadas vía RAFT, que tengan buenas propiedades espesantes en solución acuosa. Para ello se probaron 3 agentes de transferencia, los mas eficientes de acuerdo a reportes previos. Los agentes usados son: S,S'-Bis(α,α' -dimetil- α'' -ácido acético)-tritiocarbonato, 2-Dodecilsulfaniltiocarbonilsulfanil-2- ácido metilpropiánico, Cianometil dodecil tritiocarbonato.

De los resultados de MnSEC y PDI se tuvo que el agente de transferencia que mostró mayor eficacia fue el CTA1: S,S'-Bis(α,α' -dimetil- α'' -ácido acético)-tritiocarbonato. En tanto que, los agentes CTA2 y CTA3 fueron adecuados agentes de control en la primera etapa (síntesis de macroagente), no obstante se observó que dichos macroagentes no fueron adecuados en las etapas de extensión de cadena (síntesis de dibloque y tribloque).

El estudio del comportamiento reológico de los copololímeros tribloque sintetizados mostro que la cantidad de polímero asociativo en una solución acuosa, así como el tamaño de la modificación hidrófoba cambian las propiedades reológicas del fluido. El polímero P(DAM-b-AM-b-DAM)1 es el que muestra mayor viscosidad en solución acuosa, seguido del copolímero P(DAM-b-AM-b-DAM)3 y finalmente del copolímero P(DAM-b-AM-b-DAM)2. Debido a que la estructura del primer copolímero tribloque contiene una mayor cantidad de grupos hidrófobos. Lo cual remarca la elección apropiada del agente RAFT.

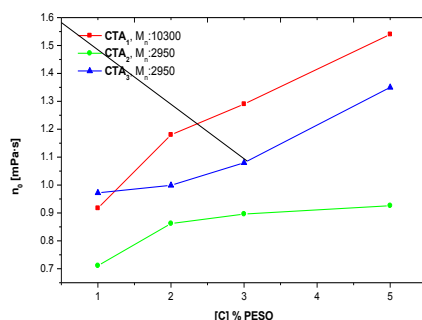


Figura 1. Variación de η_0 en función de la concentración para los tres copolímeros tribloque (telequéricos) P(DAM-b-AM-b-DAM).

1. Convertine, A. J.; Sumerlin, B. S.; Thomas, D. B.; Lowe, A. B.; McCormick, C. L., *Synthesis of Block Copolymers of 2- and 4-Vinylpyridine by RAFT Polymerization*. *Macromolecules* 2003, 36(13):4679-4681.
2. Lowe A.B., McCormick C.L., *Reversible addition-fragmentation chain transfer (RAFT) radical polymerization and the synthesis of water-soluble (co) polymers under homogeneous conditions in organic and aqueous media*, *Prg.Polym.Sci.*, 2007, 32, 283-351.
3. Gregory A., Stenzel M.H., *Complex polymer architectures via RAFT polymerization: From fundamental process ti extending the scope using click chemistry and nature's building blocks*, *Prg.Polym.Sci.*, 2012, 37, 38-105.

Cálculo de propiedades en polímeros por simulación molecular

*A. Valles, *L. Rosales, L. Serrato, L. Farías*

*Maestría en Ciencia y Tecnología Química. Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Autónoma de Coahuila. Blvd. Venustiano Carranza, 25280. Saltillo, Coahuila, México. *lucero_rosales@uadec.edu.mx*

En este trabajo se presentan metodologías y técnicas para calcular propiedades de polímeros por simulación molecular. En la actualidad las técnicas de simulación son de gran ayuda para el estudio de materiales poliméricos, ya que las propiedades de un polímero van ligadas directamente a su estructura. Es decir, que las propiedades de un polímero son consecuencia de la estructura de las macromoléculas que lo constituyen [1], por lo cual un análisis detallado a nivel molecular da a conocer el comportamiento de dicho material [2]. El estudio mediante simulación molecular se enfoca en analizar a nivel atómico aquellos detalles que de manera experimental no sean posibles o sean difíciles de llevar a cabo [1].

Actualmente las técnicas de simulación molecular son muy eficientes y requieren recursos tecnológicos elevados, por lo cual la implementación de una técnica adecuada al estudio de un material es de gran importancia.

Entre las técnicas de simulación molecular para el análisis de materiales poliméricos más utilizadas en las investigaciones recientes son la dinámica molecular y las técnicas *ab initio*, las cuales se apoyan en la mecánica cuántica y calculan de manera rigurosa el movimiento de los átomos en la estructura polimérica. En la figura 1 se puede observar el modelado dinámico de la conformación de menor energía de un polímero, la cual es imposible llegar a observar o analizar de manera experimental.

Con las técnicas mencionadas y llevando a cabo el análisis adecuado se pueden calcular propiedades ópticas, mecánicas y eléctricas [3], por mencionar algunas. Este trabajo presenta una revisión de las técnicas de simulación molecular y análisis estructural para realizar el cálculo de dichas propiedades.

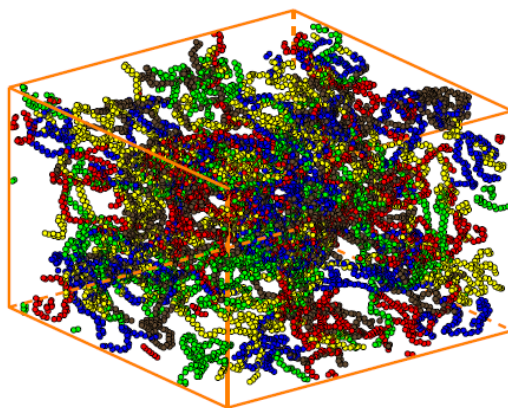


Figura 1. Estructura inicial de la conformación de un polímero por dinámica molecular. [2]

[1]. A. Carlos, M. Sebastián, *Polímeros: Ciencia y Tecnología*, 2003, 13, 250-264.

[2]. S. Prashant, V. Kartik, *Mechanics of Materials*, 2013, 61, 49-59.

[3]. K. Jussi, L. Mikko, P. Tapani, *J. of Molecular Structure: THEOCHEM*, 2006, 189-194

Aproximación a la síntesis de polímeros de naftaleno

Yazmín A. Monroy^a, Karen Montero^a, José R. Villagómez^a, Laura O. Alemán^b

^aUniversidad Autónoma del Estado de Hidalgo. Instituto de Ciencias Básicas e Ingenierías, Área Académica de Química

Carretera Pachuca–Tulancingo Km 4.5 CP.42090 Mineral de la reforma, Hidalgo, Instituto Mexicano del Petróleo, carretera Pachuca-cd. Sahagún km 7.5, Parque industrial Canacintra, Mineral de la Reforma Hidalgo., CP 42186, México.

jrvi@uaeh.edu.mx, laleman@imp.mx, yaz_ara1502@hotmail.com, krn-montero@hotmail.com

El naftaleno es el hidrocarburo bicíclico aromático más importante, por ello es relevante estudiar su reactividad tan compleja, considerando que la aplicación más destacada del naftaleno es la obtención de colorantes, insecticidas, curtientes, decalina y tetralina. A partir del naftaleno se pueden generar polímeros que pueden combinarse con otras moléculas para inducir reacciones que favorecen la obtención de productos fotoluminiscentes.

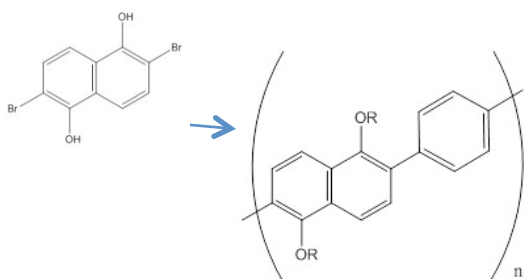


Ilustración 1.- Polimerización del 2,6-Dibromo-1,5-Dihidroxi-naftaleno

Resultados


Para polimerizar el naftaleno es necesario partir del 1,5-Dihidroxi-naftaleno, el cual se somete a la bromación en la posición 2,6 para obtener el 2,6-Dibromo-1,5-Dihidroxi-naftaleno, el procedimiento se llevó a cabo en aproximadamente 5 horas, el rendimiento de reacción fue de 73%, se hizo la caracterización por cromatografía de capa fina y RMN H^1 [1], donde se observaron señales de un sistema AB en 7.6 ppm que determinan la existencia del 2,6-Dibromo-1,5-dihidroxi-naftaleno. El siguiente producto que se logró fue el 1-bromooctano a partir del 1-octeno, mediante una reacción Anti-Markovnikov, con un tiempo de reacción de 4 horas y un rendimiento de 62% [2]. Al producto se le realizaron pruebas de solubilidad y técnicas de caracterización como; cromatografía en capa fina, RMN H^1 y espectrómetro de masas [3]. Para ello fue necesario preparar etóxido de sodio y mezclarlo con los dos productos obtenidos anteriormente, para preparar el 2,6-Dibromo-1,5-Bis(octil)naftaleno, que es el producto que se quiere polimerizar utilizando un catalizador de níquel y ácido 1,4-bencenodiborónico, según una técnica ya reportada. [1]

Conclusión

La síntesis de cada reactivo para iniciar la polimerización se realizó satisfactoriamente, primero al obtener el 2,6-Dibromo-1,5-dihidroxi-naftaleno se tomó en cuenta la solubilidad, en cuanto al 1-bromooctano fue la reactividad y el impedimento estérico generado que favorecería la reacción deseada.

Referencias

- [1]. Jun Ho Kwon, Ji-Young An. «Development of a New Conjugated Polymer Containing » Department of Chemistry and RINS, Gyeongsang National University, Chinju 660-701, Korea: Wiley Online Library, 3 January 2011 in, Vol. DOI: 10.1002/pola.24526.
- [2]. Dong guangbing «Formal Anti-Markovnikov Hydration Via Triple Relay Catalysis.» Science, 2011. 333 45-65.
- [3]. Takeshi Mori, Masashi Kijima. «Synthesis and optical properties of polynaphthalene derivatives.» (ELSEVIER) Optical Materials (27 February 2007).30 (2007) 545–552. »



Implantación de un modelo molecular de átomos unidos para la dinámica molecular de alcanos

Carrasquedo Peñaloza Carlos Arturo^a, Castillo Tejas Jorge^a

^aUniversidad Autónoma de Tlaxcala, Facultad de Ciencias, Básicas, Ingeniería y Tecnología, Calzada Apizaquito S/N, Apizaco, Tlaxcala, México, 90300. karrazk@gmail.com.

RESUMEN

En este trabajo se desarrolla una metodología para la correcta implementación y validación de un modelo molecular de átomos unidos mediante la técnica de dinámica molecular. Este modelo molecular es usado generalmente para moléculas de hidrocarburos, y utiliza cuatro potenciales de interacción: Lennard-Jones, armónico, flexión y torsión. Para la implantación del modelo se desarrolló un programa en lenguaje Fortran, cuyas partes esenciales consisten en subrutinas generadoras de posiciones y asignación de velocidades, aquellas enfocadas al cálculo de las fuerzas entre partículas y/o moléculas, y un integrador. La validación del modelo se desarrollo por etapas, cada una, correspondiente a la codificación de cada potencial con su respectiva validación. La finalidad de implantar el modelo de átomos unidos en etapas está asociada a la generación de un simulador depurado y que permite identificar errores de codificación. Por ejemplo, la primera etapa corresponde a una simulación de equilibrio para un fluido simple modelado con un potencial Lennard-Jones, donde los resultados para energía potencial se presentan en la Tabla 1.

Tabla I. Datos de energía potencial para fluidos simples modelados con potencial Lennard-Jones a distintas condiciones.

Fluido	Número de moléculas	T^*	ρ^*	Este trabajo (Energía potencial)	Otros trabajos (Energía potencial)
Fluido Lennard-Jones	108	0.728	0.8442	-4.420	-4.419±0.0012 ¹
Helio	864	0.2	0.365	-6.587	-6.146±0.014 ²
Metano	864	0.6103	0.8851	-6.476	-6.460±0.059 ²
Neón	864	0.6653	0.8084	-5.919	-5.923±0.017 ²
Nitrógeno	864	0.6469	0.8783	-6.385	-6.383±0.050 ²

Como se lista en la Tabla, la validación del potencial se realiza reproduciendo datos de equilibrio reportados por otros autores para algunos gases y un fluido Lennard-Jones. En todos los casos, la diferencia porcentual entre el dato obtenido en este trabajo y el de literatura es menor a 0.02 %, lo que demuestra la correcta implantación del potencial Lennard-Jones. Consideraciones similares son realizadas para la implantación de los demás potenciales.

Agradecimientos:

Los autores agradecen el financiamiento recibido de la Universidad Autónoma de Tlaxcala, en el Marco del Programa CACyPI-UATx-2013.

Referencias:

- [1] Frenkel D., Berend S. *Understanding Molecular Simulation*. 2002, Academic Press. New York.
- [2] Tchouar N, Benyettou M, Kadour Ould F., *Int. J. Mol. Sci.* 2003, 4, 595-606.



Silver/Silver Bromide/polypyrrole nanoparticles obtained by microemulsion photopolymerization in the presence a cationic surfactant

Victor M. Ovando-Medina^a

^aDepartamento de Ingeniería Química, Coordinación Académica Región Altiplano (COARA), Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Carretera a Cedral KM 5+600, San José de las Trojes, 78700 Matehuala, S.L.P., México

Conductive silver/silver bromide/polypyrrole nanoparticles were obtained by photopolymerization in o/w microemulsions of pyrrole monomer in the presence of silver nitrate as electron acceptor and dopant under UV light irradiation. The microemulsions were prepared using cetyltrimethylammonium bromide (CTAB) as cationic surfactant. The particles were analyzed by scanning electron microscopy (SEM), UV/Vis, FTIR, cyclic voltammetry and X-ray diffraction (XRD). It was observed from SEM (Figure 1) analysis that spherical particles can be obtained by this procedure with relatively narrow particles sizes distributions (PSD) and average particle diameters of the silver cores (D_p) between 39 and 46 nm, which decreases as the surfactant concentration is increased. The conductivities of the resulting materials were between 0.12 and 0.40 S/m. Formation of cores of Ag and AgBr were observed from the XRD analysis, which was ascribed to the reduction of Ag^+ to Ag^0 and to reaction of Ag^+ with the counterion of CTAB surfactant, respectively (Figure 2).

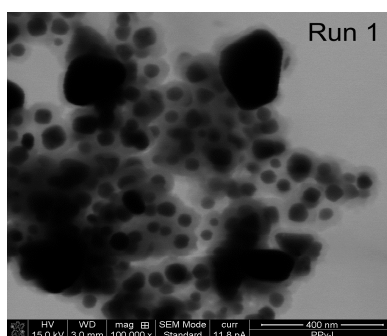


Figure 1 Scanning electron micrographs of Ag/AgBr/PPy nanoparticles obtained at different CTAB concentrations.

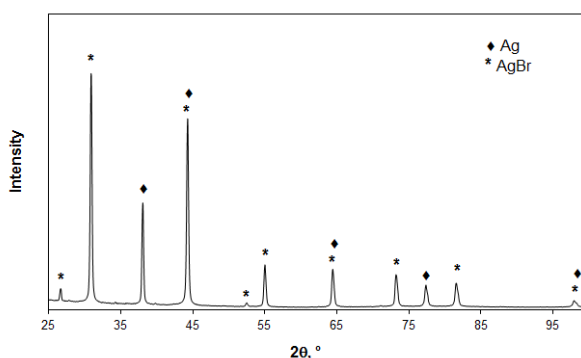



Figure 2. XRD spectrum of nanoparticles corresponding to Run 1.

1. Ovando-Medina VM, Peralta RD, Mendizábal E, Martínez-Gutiérrez H, Lara-Ceniceros T, Ledezma-Rodríguez R *Colloid Polym. Sci.* **2011**, 289:759–765.



Empleo del microscopio electrónico de barrido de ultra alta resolución (HRSEM) del IPN para la adecuada caracterización de materiales poliméricos y biológicos en la escala nanométrica.

H. Martínez Gutiérrez^a, J.A. Andraca Adame^a, C.J. Ramos Torres^a

Centro de Nanociencia y MicroNanotecnología del Instituto Politécnico Nacional, México, D. F., 07738, México
Tel. 57296000 Ext 57521, email: humartinez@ipn.mx

En la última década los centros CONCYT y las universidades estatales de México se han equipado con instrumental científico y tecnológico de alta tecnología. En particular el Centro de Nanociencias y Micro y Nanotecnologías (CNMN) del Instituto Politécnico Nacional cuenta con dos de los microscopios electrónicos de barrido tecnológicamente más avanzados del mundo. Ambos microscopios se complementan y pueden analizar desde muestras biológicas hasta metalúrgicas en la escala micro y nanométrica. Particularmente, en el área de polímeros, se puede analizar partículas sintetizadas por microemulsión o emulsión con tamaños nanométricos, películas poliméricas, materiales híbridos y porosos. Hace una década aproximadamente, los materiales no conductores tenían que recubrirse con una capa de un material conductor para poder analizarlos, sin embargo, con el desarrollo de microscopios electrónicos de barrido de ultra alta resolución podemos hacer observaciones en la escala nanométrica a bajos voltajes de aceleración sin la necesidad de recubrir las muestras no conductoras, abriendo una nueva ventana para el análisis en el campo de las nanociencias y la nanotecnología. Adicionalmente, ahora es posible realizar observaciones y análisis elemental en modo de transmisión con muy buena resolución.



Celulosa recubierta con polipirrol para la remoción de colorante rojo reactivo 120 (azo) de agua

Josué Vizcaino Mercado^a, Victor Manuel Ovando Medina^a, Paola E. Díaz Flores^a

^a Ingeniería Química, Coordinación Académica Región Altiplano (COARA), Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Carretera a Cedral KM 5+600, Ejido San José de las Trojes, Matehuala, S.L.P., MÉXICO.

victor.ovando@uaslp.mx

En este trabajo se realizó el recubrimiento de α -celulosa con polipirrol semiconductor para ser utilizado como compósito adsorbente en la remoción del colorante rojo reactivo 120 presente en soluciones acuosas. La capacidad de remoción de colorantes se determinó mediante ensayos de adsorción en lotes y en columna. Se observó que el material es efectivo en la remoción del colorante rojo reactivo 120 y puede llegar a competir con materiales adsorbentes como los carbones activados comerciales pero el costo de obtención del material aquí desarrollado es mucho más bajo. El recubrimiento de α -celulosa se llevo a cabo en un vaso de precipitados con capacidad de un litro agregando los reactivos en las cantidades descritas en la Tabla 1. Se mezclaron los reactivos α -celulosa, agua y etanol se dejaron con agitación magnética hasta homogeneizar para posteriormente agregar el pirrol y se continuó la agitación durante 20 h; posteriormente se agregó persulfato de potasio (KPs) como agente oxidante y se dejó reaccionar durante 4 h observándose inmediatamente una coloración completamente negra, indicando la formación del polipirrol. El producto resultante se filtró al vacío y se seco en un horno durante 24 hrs a 60°C.

Tabla 1.- Condiciones experimentales empleadas en las polimerizaciones.

α -celulosa, g	Agua, g	Etanol, g	Pirrol, g	KPs, g
25.0	250.0	7.5	6.25	12.5

La adsorción por lotes de colorantes se hizo colocando 0.1g de compósito en 35 mL de solución de colorante de concentración conocida (véase tabla 2) y se dejaron saturar durante 5 días a 25°C y se determinaron sus concentraciones finales. La masa de colorante adsorbida por gramo de compósito se calculó mediante un balance de masa.

Tabla 2.- Condiciones experimentales utilizadas en la adsorción en lotes a 25°C.

Conc. inicial, mg/L	10	40	80	100	200	400	600	800	1000
Masa de compósito, g	0.1030	0.1025	0.1013	0.1018	0.1006	0.1007	0.1015	0.1024	0.1011

Se montó una columna de 20 cm de altura y 1 cm de diámetro interno con una carga de 3.5 g del compósito adsorbente sintetizado y se procedió a pasar una solución de 250, 500 y 1000 mg/L de colorante rojo reactivo 120 con flujo constante por gravedad. Se tomaron muestras a diferentes tiempos a la salida de la columna y se determinó su concentración. La curva de ruptura se halló graficando la concentración normalizada a la salida de la columna vs tiempo. La Figura 1a, muestra la isoterma de adsorción del colorante rojo reactivo 120. En la Figura 1b puede verse que la cantidad de compósito empacado se satura a los 100 minutos para el flujo y concentración (500 mg/L) empleados.

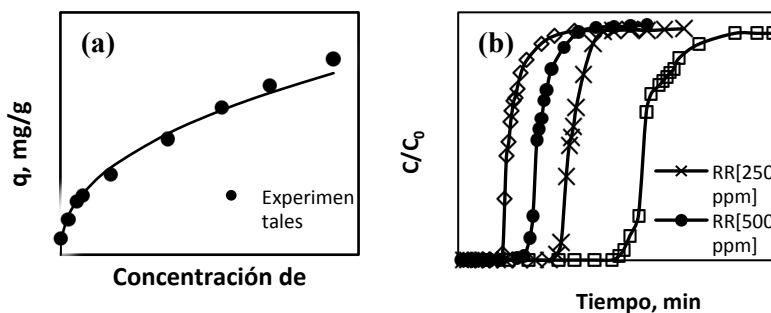


Figura 1.- Isoterma de adsorción para el rojo reactivo 120 (a) y curva de ruptura (b) determinada a partir de los experimentos de adsorción en columna.



Síntesis de nanopartículas de plata mediante el método del poliol

Karla Fabiola Rodríguez Ramírez^a, Adali Oliva Castañeda Facio^{a}, María Maura Téllez Rosas^a, Martha Elena Castañeda Flores^a, Pablo Acuña Vázquez^b*

Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Autónoma de Coahuila^a, Centro de Investigación en Química Aplicada^b

adali.castaneda@uadec.edu.mx

En el presente trabajo se describe la síntesis de nanoalambres de plata (NA-Ag) por el método del poliol empleando una sal metálica (AgNO_3) y Polivinil Pirrolidona (PVP) como agente pasivante en presencia de etilenglicol. Se realizaron varios experimentos con diversas condiciones, como diferente peso molecular del agente pasivante (29 000 y 360 000g/mol) y temperatura de reacción (160 y 170°C), para observar diferencias en la morfología de las nanopartículas. Los resultados obtenidos fueron caracterizados mediante; Espectroscopia de UV-Visible, Espectroscopia de Infrarrojo, Difracción de rayos X, Microscopia Óptica y Microscopia Electrónica de Barrido.

En cuanto a las variables de síntesis, las reacciones realizadas con el PVP de peso molecular de 29 000 gr/mol a 170°C fueron en las que se obtuvieron satisfactoriamente nanopartículas de plata. Las reacciones llevadas a cabo con el PVP de peso molecular de 360 000 a 160°C no mostraron evidencia de crecimiento de nanopartículas, ya que el alto peso molecular provocó un incremento en la viscosidad de la solución, obstaculizando la difusión y disminuyendo las probabilidades de formación de las nanopartículas¹. Este comportamiento fue confirmado al utilizar este mismo peso molecular a 170°C obteniéndose resultados insatisfactorios. Con respecto a la temperatura de reacción, conforme está se incrementa se favorece la formación de nanopartículas, estos resultados coinciden con los obtenidos por Luo et al.²

Los espectros UV-vis presentaron una sola banda simétrica de resonancia de plasmón superficial. La máxima absorbancia UV-vis se ubicó 412 nm en los todos los experimentos. De acuerdo con Jiang et al. la aparición de espectros de absorción simétricos con absorbancia máxima alrededor de 420 nm es debido a la resonancia de partículas de plata.³ Mediante la espectroscopia Infrarrojo se puede deducir que los nanoalambres de plata se encuentran interaccionando con el PVP asumiendo que estas interacciones favorecen en gran medida la estabilidad de los NA-Ag.

Los espectros de difracción de rayos X mostraron el carácter cristalino del material haciéndose evidente por la presencia de los picos de difracción en los planos (111) y (200) a 38.1° y 44.3° (2 θ), respectivamente.

Con respecto a las microscopias: en la óptica las imágenes muestran claramente la evidencia de nanoalambres de plata; Microscopia Electrónica de Barrido (MEB): los resultados determinaron que bajo las condiciones establecidas de síntesis es posible obtener nanoalambres de plata de diámetro en un rango de 600 nm y largo en la escala de micras. Además se evidenció la existencia de diferentes morfologías indicando que las condiciones de síntesis con las que se obtuvieron estas nanopartículas tienen que ser afinadas para obtener un solo tipo de morfología.


En base a estos resultados y como trabajo a futuro se considera afinar la ruta de síntesis para obtener un solo tipo de morfología.

[1] Petica, A., Gravillu S., Lungu M., Buruntea N., *Engineering B*, 2008, 152, 22

[2] Luo, C., Zhang Y., Zeng X., Zeng Y., *Journal of Colloid and Interfaces Science*, 2005, 288, 444-448.

[3] Jiang X., Chen XM., Chen C., Xiong S., Yu A., *Nanoscale Research Letters*, 2011, 6, 32.





Efecto de la velocidad de agitación y temperatura en la síntesis por emulsión inversa de poliacrilamida hidrófobamente modificada.

López Carmona Jaime,

Dra. Shirley Carro Sánchez, Dr. Pedro García Moran

Universidad Autónoma de Tlaxcala. Facultad de Ciencias Básicas, Ingeniería y Tecnología. Calzada Apizaquito S/N.

Apizaco, Tlaxcala. 90300

shir_cs@hotmail.com

La poliacrilamida modificada hidrófobamente tiene diversas aplicaciones, tales como estabilizadores, floculantes y absorbentes en la recuperación terciaria del petróleo, formulaciones de pinturas, cosméticos, alimentos, papel, reductores de arrastre, controladores en liberación de fármacos y agentes biológicos/médicos[1]. Debido a la importancia en su uso se busca comprender las variables que influyen en las propiedades del polímero para obtener aquellas que convengan, para emplear el polímero en las aplicaciones antes mencionadas.

Para las polimerizaciones en emulsión se ha observado que la velocidad de agitación juega un papel muy importante en las propiedades del látex obtenido [2], por lo cual se infiere que esta variable tiene influencia en la síntesis de la poliacrilamida mediante emulsión.


En el presente trabajo se varía la velocidad de agitación y temperatura, en el estudio de la polimerización de poliacrilamida hidrófobamente modificada. El estudio de estos dos factores es importante para poder comprender las propiedades químicas y físicas de la poliacrilamida, tales como el número final de partículas, tamaño de partícula, la viscosidad de soluciones acuosas y PM del polímero. También se estudia el efecto de las concentraciones iniciales de reactivos en el PM del polímero.

La poliacrilamida se sintetiza por una polimerización en emulsión inversa, empleando un solo tipo de monómero hidrófobo. La caracterización se lleva a cabo mediante gravimetría, para la evolución de la conversión, viscosimetría, para conocer el peso molecular promedio y reometría para ver el efecto de las variables antes mencionadas en la estructura del polímero y, por lo tanto, en el comportamiento reológico del polímero.

Se ha encontrado que al aumentar la concentración de surfactante, en la viscosidad, se puede observar un mayor contenido de sólidos, por lo tanto afecta el peso molecular y, por lo tanto, efecto en las propiedades reológicas.

1. M. Rubinstein, A.V. Dobrynin. (1999). Associations leading to formation of reversible networks and gels. *Current Opinion in Colloid & Interface Science*, 4, pp.83-87.
2. E. OZDEGER, E. D. SUDOL, M. S. EL-AASSER, A. KLEIN (1998). Role of Mixing in Copolymerizations of Styrene and n-Butyl Acrylate. *Emulsion Polymers Institute and Department*





Estimación de lazos de inmiscibilidad para una cadena en solución empleando Simulación Monte Carlo

Martín I. Mendieta Lora, Friné López Medina*

Universidad Autónoma de Tlaxcala, Facultad de Ciencias Básicas, Ingeniería y Tecnología. Licenciatura en Ingeniería Química. Calzada Apizaquito s/n, Apizaco, Tlaxcala. 90300, México.

[*frine76@hotmail.com](mailto:frine76@hotmail.com), lopezmedinafrine@gmail.com

RESUMEN

Con la finalidad de analizar el comportamiento de cadenas en solución mediante simulación molecular, se plantea un sistema constituido por una cadena lineal del tipo Lennard-Jones (LJ) inmersa en un disolvente polar descrito por un modelo molecular de 3 sitios LJ con cuadrupolo. El sistema se normalizó en función del tamaño efectivo de una molécula de disolvente y una interacción energética considerada como la contribución energética total del disolvente. Con este sistema se pretende estimar diagramas de fases temperatura-fracción molar (T-x), los cuales se han obtenido en otros trabajos, bajo condiciones similares, y revelan un lazo cerrado de inmiscibilidad (esto es, una temperatura de solución crítica superior, UCST, encima de una temperatura de solución crítica inferior, LCST) a condiciones supercríticas del sistema en solución^{1,2}.

Se ha desarrollado un código computacional que describe las interacciones moleculares existentes en el sistema en solución, empleando técnicas de simulación Monte Carlo en ensamble NPT y la técnica Configurational Bias Monte Carlo para simular el desplazamiento de la cadena. Además, se utiliza una escla de modelamiento de grano grueso, aplicando condiciones de frontera periódicas y condiciones de mínima imagen. Las probabilidades de distribución que se ejecutan son: desplazamiento de moléculas (cadena y disolvente) y fluctuación del volumen de la región de simulación. Se estudia una geometría rectangular de la región de simulación. Se está simulando a un régimen de solución altamente diluida con la finalidad de evitar efectos de interpenetración y anidamiento de cadenas. El modelo molecular que se emplea para la cadena es únicamente LJ, dado que se considera una cadena flexible del tipo LJ. Para el disolvente se emplea el potencial Lennard-Jones para las interacciones repulsivas y el potencial cuadrupolar propuesto para el CO₂ por Möller-Fischer en 1994³, puesto que la estructura molecular del disolvente se compone de 3 sitios Lennard-Jones unidos mediante un enlace rígido y con un cuadrupolo al centro de la molécula, tal descripción es semejante a la molécula del dióxido de carbono.

En la simulación se monitorean propiedades conformacionales de la cadena, tales como distancia punta a punta y radio de giro, además se estima la energía potencial del sistema y opcionalmente la presión del sistema empleando la ecuación del virial para el potencial LJ.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado por la Universidad Autónoma de Tlaxcala, en el marco del Programa CACyPI-UATx-2013, por lo que los autores agradecen tal apoyo.

Referencias Bibliográficas

- [1] Aztatzi Pluma, D. **2011**. Tesis de Maestría en Ciencias en Ingeniería Química. Universidad Autónoma de Tlaxcala, F.C.B.I y T, División de Posgrado. Apizaco, Tlax. México.
- [2] Ortiz-Estrada, C.H.; Luna-Bárceñas, G; Alvarado, J.; González-Alatorre, G.; Sanchez, I.; Castillo-Tejas, J. Manero-Brito, O. Flores Ramírez, N.; y Vásquez García, S. **2009**. *Polymer Chain Collapse in supercritical fluids. 1. Molecular simulation results*. Macromol. Symp. 266-289.
- [3] D. Möller y J. Fischer, **1994** *Determination of an effective intermolecular potential for carbon dioxide using vapour-liquid phase equilibria from NpT + test particle simulations*, Elsevier Science, 100, 35-61.





ÁREA DE PROCESOS

QUÍMICOS
QUÍMICOS





Aplicación en química fina de catalizadores de platino soportado

René G. Rodríguez-Avenida^a, J.A. De Los Reyes^a, T. Viveros^a, J.A. Montoya^b

^aUniversidad A. Metropolitana, Departamento de Ingeniería de Procesos, Av. Rafael Atlixco 186, Col. Vicentina, Iztapalapa México, D.F. 09340; Área de Ingeniería Química, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa (UAM-I), ^bInstituto Mexicano del Petróleo, Programa de Simulación Molecular México, D.F.

rgra@xanum.uam.mx

Resumen

En este trabajo se estudiaron los factores que afectaron la hidrogenación selectiva de citral en fase líquida. Se analizó el comportamiento de catalizadores con 1% en peso de platino soportados en óxidos puros SiO_2 , ZrO_2 y TiO_2 y óxidos mixtos de $\text{SiO}_2\text{-ZrO}_2$ y $\text{SiO}_2\text{-TiO}_2$. La adición de ZrO_2 o TiO_2 al soporte catalítico SiO_2 provocó mejoras en la actividad catalítica del platino, esto se verificó al calcular los valores de actividad inicial y TOF. Las propiedades hidrogenantes de estos materiales están condicionadas por la concentración en peso de los óxidos mixtos. Los catalizadores fueron caracterizados por quimisorción de hidrógeno, adsorción de nitrógeno a 77K y TEM. Los catalizadores de Pt soportados en óxidos mixtos de $\text{SiO}_2\text{-ZrO}_2$ y $\text{SiO}_2\text{-TiO}_2$ con alto porcentaje en peso de SiO_2 , favorecieron la producción de citronelal y citronelol, con una conversión total de la molécula de citral en tiempos menores a 1 h de reacción.

Introducción

Actualmente, los catalizadores metálicos soportados son utilizados en muchos procesos industriales de química fina ("fine chemicals process"), como en el caso de la producción de compuestos de alto valor agregado o intermediarios sintéticos de gran uso en las industrias farmacéutica, de cosméticos, de aditivos, alimentarios y perfumes [1]. Una de las características principales de los procesos de química fina, es que las reacciones se llevan a cabo en fase líquida. La creciente complejidad de las moléculas orgánicas en la industria de química fina, la coexistencia de varios grupos funcionales, y la necesidad de obtener productos con altas quimio-, regio-, e incluso estereoselectividades, son factores a tener en cuenta a la hora de seleccionar un catalizador [2]. En particular, en la hidrogenación selectiva de aldehídos α,β -insaturados se estableció la importancia del soporte en la dispersión final del metal y se estudió el papel de las propiedades superficiales e intrínsecas del soporte. El citral es un aldehído α,β -insaturado, se encuentra en los aceites de los frutos cítricos, es una mezcla de dos aldehídos monoterpénicos isoméricos, geranial y neral. El isómero trans se conoce como geranial o citral A, o bien nombrado según IUPAC como 3,7-dimetil-2-6-octadienal y el isómero cis se conoce como neral o citral o bien nombrado según IUPAC como (Z)-3,7-dimetil-2-6-octadienal.


Resultados

Se obtuvieron catalizadores con alta actividad y selectivos en la hidrogenación de citral empleando los sistemas $\text{Pt/SiO}_2\text{-ZrO}_2$ y $\text{Pt/SiO}_2\text{-TiO}_2$. La reacción fue afectada por el tamaño de partícula, lo cual facilitó una rápida formación de citronelal y posterior obtención de citronelol. Los óxidos mixtos que se usaron como soportes para catalizadores de Pt, mostraron ser materiales con buenas características texturales. El efecto de la incorporación de ZrO_2 y TiO_2 sobre SiO_2 provocó una disminución en el área superficial de los soportes y los catalizadores. Los resultados de análisis termogravimétricos y de difracción de rayos X corroboraron la incorporación de los cationes Zr^{+4} y Ti^{+4} a la red tridimensional de SiO_2 . Los difractogramas de rayos X mostraron óxidos mixtos amorfos y para el caso de los catalizadores se obtuvieron materiales amorfos en donde no se encontraron picos correspondientes al platino.

Referencias

- [1] Bauer K., Garbe D., Surburg H., (2001). Common Fragrance and Flavor Materials: Preparation and uses. Fourth, completely revised edition, Wiley-VCH, Germany.
- [2] Lashdaf M., Krause A.O.I., Lindblad M., Tiitta M., Venäläinen., (2003). Appl. Catal. A: Gen. 241, 65.





Análisis de factores para la obtención de látices con distribución controlada en una polimerización en emulsión de estireno

Hernández, Sonia, Carro, Shirley^b

^aUniversidad Autónoma de Tlaxcala FCBIyT, ^bUniversidad Autónoma de Tlaxcala FCBIyT

ainos_1260@hotmail.com

El producto de las polimerizaciones en emulsión es el látex y su aplicación final depende de sus propiedades reológicas, ópticas y adhesión. Tales propiedades pueden ser controladas a través de la distribución de tamaño de partícula, DTP. De ahí, es que el control de la DTP es de gran interés tanto en el medio académico como en el industrial [Botelho y Bittencourt, 2008 y Farías, 2009].


La amplitud de las DTPs, polidispersa (tamaños de partícula diferentes) o monodispersa (tamaños de partícula similares), depende a su vez de factores como: la temperatura de reacción, las concentraciones de reactivos (agua, monómero, emulsificante e iniciador), la velocidad de agitación, el diseño del agitador, la posición de éste con respecto a la base del reactor, la geometría del equipo de reacción, etc. Generalmente, el control de tamaño de partícula y su distribución se ha logrado mediante procesos en varias etapas [Barrett, 1975 y Dong y col., 2010]. En esta investigación se pretende analizar los factores que influyen en el tamaño de partícula y su distribución para controlar la DTP en una sola etapa.

Para lograr el objetivo se varió la velocidad de agitación, concentración de emulsificante, concentración de iniciador y tipo de emulsificante. Para las polimerizaciones se utilizaron: agua desionizada como medio dispersante, estireno como monómero, persulfato de potasio, KPS, como iniciador, y como emulsificantes Di-n-hexil sulfosuccinato de sodio, MA-80, y Dodecil sulfato de sodio, SDS. Las concentraciones que se usaron por cada litro de agua fueron de 500g de monómero, 1.25 y 4.3 g de iniciador y de emulsificante 1.5 y 7 veces la CMC. Las polimerizaciones se realizaron en un reactor batch sin mamparas con una capacidad de 1 litro. La mezcla de reacción fue de 500 g. Las temperaturas de reacción que se utilizaron fueron de 50 °C para el emulsificante de SDS y 70 °C para MA-80. La DTP se obtuvo mediante dispersión de luz. El índice de polidispersidad, I, y coeficiente de variación, % σ ; se calcularon a partir de los datos experimentales.

Se encontró que el factor de menor influencia en la polidispersidad es la agitación y el de mayor influencia la concentración de emulsificante. Por ejemplo, si se buscan DTPs estrechas la mejor combinación es la siguiente: emulsificante MA-80, alta concentración de iniciador y de emulsificante. Esto es gracias a que el emulsificante de MA-80 posee una cadena de longitud hidrófoba de 16 carbonos, que permite una alta eficiencia de micelas y solubilización de monómero. La alta concentración de iniciador ayuda a que las partículas crezcan uniformemente y, por último, la alta concentración de surfactante estabiliza las partículas para que crecen uniformemente por la alta concentración de iniciador.

1. Botelho, C. R. y Bittencourt, E. [2008]. *Emulsión con sustitución de los apes*. Revista Iberoamericana de Polímeros. Vol. 9 (6). Págs. (512-525). Campinas. SP. Brasil.
2. Farías, L. [2009]. Tesis doctoral: Estudio de los factores determinantes de la distribución de tamaño de partícula en la polimerización en emulsión y su aplicación en la síntesis de partículas nanométricas núcleo – coraza. CIQA. Saltillo, Coah.
3. Barret, K. E. J. [1975]. *Dispersion Polymerization in Organic Media*. Wiley. London.
4. Dong, Y. S.; Hyeong-Seok, L.; Ho, G. J, y Jung, W. Y. [2010]. *Controlling Size and Distribution for Nano-sized Polystyrene Spheres*. Chem. Soc. Vol. 31. No. 5. Págs. (1345-1348). Corea.





Modelamiento del equilibrio de adsorción de cadmio con nanotubos de carbono: efecto de materia orgánica disuelta

Vladimir E. Parra-Elizondo^a, Lilia E. Serrato Villegas^a, Nancy V. Pérez-Aguilar^a

^aCuerpo Académico de Ingeniería Química, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Coahuila, Blvd. Venustiano Carranza sin número, CP. 25240. Saltillo, Coahuila, México

Email del autor para correspondencia: nancyperez@uadec.edu.mx

La demanda de agua para consumo humano, así como las actividades productivas se mantiene en constante aumento, por ello es importante investigar los procesos que permitan mejorar su calidad, al eliminar diversos contaminantes que pudiera contener, por ejemplo, metales tóxicos. En los últimos años, la presencia de sustancias tóxicas en el agua se ha incrementado a niveles que ponen de manifiesto los efectos nocivos a la salud humana y el medio ambiente. Uno de los tratamientos más utilizados para la eliminación de especies tóxicas en el agua es la adsorción, que consiste en la retención de partículas tóxicas sobre la superficie de un material adsorbente. Con el desarrollo de nuevos materiales carbonosos de escala nanométrica aparecen nuevos adsorbentes con mejor desempeño, como los nanotubos de carbono, de los que se ha probado tiene mayor capacidad de adsorción de cationes en solución [1-2].

Los datos de un experimento de adsorción se analizan utilizando diferentes modelos matemáticos, para describir la distribución del adsorbato en el líquido y en el adsorbente cuando se alcanza el equilibrio. Los diferentes modelos consideran la homogeneidad o heterogeneidad de los grupos en la superficie de los adsorbentes y las posibles interacciones entre las especies adsorbidas. Los modelos más frecuentemente utilizados son el de Langmuir, el de Freundlich, y el modelo de Sips, que es una combinación de estos dos [3]. La ecuación del modelo de Sips es:

$$q_e = \frac{K_s C_e^n}{(1 + Q_{\max} K_s C_e^n)} \quad (\text{Ecuación 1})$$

Donde: q_e es la capacidad de adsorción en el equilibrio en unidades (mg de adsorbato/ g adsorbente); C_e : es la concentración en el equilibrio del adsorbato (mg/L); K_s , n y Q_{\max} son las constantes empíricas del sistema. Pero si en un sistema coexisten varias especies en solución, por ejemplo, iones metálicos y materia orgánica disuelta, es necesario utilizar modelos en los que se consideren las características de estas especies. Tres modelos recomendados por la EPA son el modelo gaussiano para materia orgánica disuelta (Gaussian DOM model), el modelo húmico de Estocolmo (Stockholm humic model, SHM), y el modelo NICCA-Donnan. En este trabajo se investigó el equilibrio de adsorción de cadmio sobre nanotubos de carbono oxidados, y se evaluó el efecto de materia orgánica disuelta (MOD) en el equilibrio de adsorción. Las isothermas de adsorción se modelaron con los modelos de Langmuir, de Freundlich y de Sips. El modelo que ajustó mejor a los datos experimentales fue el de Sips, que reportó una Q_{\max} de 29.75 mg/g a pH 6 y 25°C. Por otro lado, al analizar el efecto de la MOD se estableció que la capacidad de adsorción de cadmio disminuyó desde 11.86 mg/g a 6.47 mg/g a pH 5 y 25°C. Los datos de adsorción bajo estas condiciones se analizaron con el modelo gaussiano y el modelo de Estocolmo, entre los que se observó un ajuste similar de los datos experimentales.

[1] Li, Y.H., Ding, J. Competitive adsorption of Pb²⁺, Cu²⁺ and Cd²⁺ ions from aqueous solutions by multiwalled carbon nanotubes. *Carbon*. **2003**, 41: 2787-2792.

[2] Lu, C.L.C., Rao, G.P. Comparisons of sorbent cost for the removal of Ni²⁺ from aqueous solution by carbon nanotubes and granular activated carbon. *J Haz Mater*. **2008**, 151: 239–24.

[3] Sips, R. (1948). Combined form of Langmuir and Freundlich equations. *J Chem Phys*. **1948**, 16: 490–495.

[4] Lu, C., Su, F. (2007). Adsorption of natural organic matter by carbon nanotubes. *Sep Purif Tech*. **2007**, 58: 113-121.





Simulación Dinámica en un Tanque Horizontal de Calentamiento

H. Mejía^a, V. Cruz^a, A. Castro^a, C. Amador^a

^aUniversidad Autónoma de Tlaxcala, Calzada Apizaquito s/n, Apizaco, Tlaxcala, México.
angelc0302@hotmail.com

En el presente estudio se realiza el modelado y la Simulación Dinámica de un tanque horizontal de calentamiento. El modelo se desarrolló a partir de balance de masa, energía y consideraciones geométricas. La simulación de sistemas en una computadora ofrece un método para analizar el comportamiento de un sistema [1].

Aunque los sistemas varían en sus características y complejidades, la síntesis de información de modelos, es la ciencia de la computación constituyen un útil método para aprender sobre esas características y complejidades e imponerles una estructura.

El modelo está basado en: balance de masa basado en la ley de la conservación de la materia [2], balance de energía basado en la primera ley de la termodinámica [2] y una expresión desarrollada a partir de la ecuación de la circunferencia para el cálculo del volumen [3]. El tanque en estudio es un tubo bridado hecho de acero inoxidable de 0.1 m de diámetro y una longitud de 0.5 m, el cual está representado por las siguientes ecuaciones (1), (2) y (3) :

1.
$$V = \left[\frac{2h-D}{2} \sqrt{Dh-h^2} + \frac{D^2}{4} \operatorname{sen}^{-1} \left(\frac{2h-D}{D} \right) + \frac{\pi D^2}{8} \right] L$$
2.
$$\frac{d}{dt}(\rho V) = F_{in} \rho_{in} - F_{out} \rho_{out}$$
3.
$$\frac{d}{dt}(\rho V H) = F_{in} \rho_{in} H_{in} - F_{out} \rho_{out} H_{out} + Q$$

En donde ρ es la densidad, Q el flujo de calor, F es el flujo volumétrico, V representa el volumen, H es la entalpía, h el nivel de agua en el tanque y D el diámetro del tanque.

El modelo fue resuelto numéricamente empleando el método de Runge Kutta de cuarto orden. Se implementó un código computacional en lenguaje C, para posteriormente importarlo como una Librería Dinámica (DLL del inglés Dynamic Link Library) a la interfaz gráfica de Labview.

El problema de validar modelos de simulación es difícil, ya que implica un sinnúmero de complejidades de tipo práctico y teórico [1].

[1] Fishman; (1978)

[2] David M. Himmelblau; Principios Básicos y Cálculos de la Ingeniería Química, 6^a ed, Prentice Hall. (1997)

[3] Lehmann; *Geometría Analítica*, 1^a ed, Limusa. (1980)





Efecto del Cloruro de Sodio en el Equilibrio Líquido Vapor del sistema Etanol-Agua.

R. Coello-Torres, F. Pérez-Villaseñor, A. Castro-Aguero

Universidad Autónoma de Tlaxcala, Calzada Apizaquito s/n, Apizaco, Tlaxcala, Mexico.

fervilla68@hotmail.com

En éste estudio se analiza de manera experimental el efecto del cloruro de sodio (NaCl) en el Equilibrio Líquido Vapor (ELV) del sistema Etanol-Agua. El ELV es de gran importancia en las operaciones de separación y también para el diseño de los equipos de proceso empleados en la industria. Generalmente los sistemas con que se trabaja en la industria, son mezclas de dos o más componentes, por lo que es necesario estimar sus propiedades en condiciones de equilibrio[1]. El ELV puede encontrarse en sistemas ideales y no ideales, estos últimos son los de mayor interés para la Ingeniería Química [2].

Los sistemas no ideales llegan a presentar azeótropos, cuando esto sucede no se pueden separar los líquidos, por lo que se vuelve un problema importante. El uso de agentes másicos de separación, particularmente electrolitos, es una práctica empleada para remover o desplazar azeótropos. Por lo tanto se analiza el efecto del cloruro de sodio. El ELV de un sistema constituido por dos componentes volátiles y miscibles como lo son el etanol y el agua, puede sufrir modificaciones por la adición de una sal.

En éste trabajo se estudian dos sistemas:1) Etanol-Agua, 2) Etanol-Agua-Cloruro de Sodio. El ELV se lleva a cabo a presión constante (isobárico). El dispositivo experimental empleado es una modificación del destilador Othmer. Este dispositivo consiste en un ebullómetro (Matraz) conectado a un condensador con refrigerante, el cual a su vez se conecta a un segundo refrigerante. El medio de calentamiento para el ebullómetro es através de una manta de calentamiento. El diseño del dispositivo permite mantener en reflujo al sistema. Para el desarrollo del estudio se fijan fracciones másicas (0.1,0.2.....0.9) de cada componente de los sistemas, se preparan las soluciones y posteriormente se procede a realizar la experimentación mediante el sistema antes descrito.


La medición de temperatura se lleva a cabo con un sensor de temperatura (RTD, del inglés: resistance temperature detector), los datos de temperatura se van adquiriendo a una computadora mediante NI cDAQ® de National Instruments® con el software LabView®. Cuando el sistema alcanza el equilibrio, se procede a tomar la muestra de la fase vapor para su análisis posterior. La determinación de la composición de cada componente presente en la fase vapor, se lleva a cabo por la técnica de refractometría, para la cual previamente se realizó una curva de calibración del sistema Etanol-Agua.

Para la estimación de la composición de la fase líquida se recurre a cálculos de punto de rocío y así conocer cada composición. Se emplea un modelo termodinámico para reproducir los sistemas estudiados experimentalmente. El modelo empleado para la solución es el UNIFAC.

[1] Scenna N. y col. 1999. Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos.

[2] Lainfiesta, D. 2006. *Estimación de las constantes de Margules y Van Laar para sistemas binarios por correlación lineal*. Facultad de Ingeniería-Universidad Rafael Landívar. Vol.1. No.3. pp. 1-13. Guatemala.





Desarrollo de un modelo de parámetros distribuidos para la transferencia de calor en un calentador: comparación entre la solución numérica y los resultados experimentales.

V. Cruz^a, A. Castro^a, A. Ortiz^a, H. Mejía^a, C. Amador^a

^aUniversidad Autónoma de Tlaxcala, Calzada Apizaquito s/n, Apizaco, Tlaxcala, México.
angelc0302@hotmail.com

Se desarrolló un modelo de parámetros distribuidos para un calentador de etilenglicol, utilizando la ley de conservación de energía[1]. El modelo representa a un sistema físico, que consiste en un tubo de acero inoxidable de 4" bridado, el cual está embobinado con resistencias eléctricas. El fluido funciona como medio de calentamiento de un reactor de polimerización. El modelo se emplea para representar los perfiles de temperatura en estado estacionario y no estacionario. Un número importante de procesos industriales son "distribuidos" espacialmente, de modo que su comportamiento depende tanto de la posición espacial como del tiempo[4]. Generalmente, los modelos resultantes toman la forma de ecuaciones diferenciales parciales y son derivados de balances fundamentales de momento, masa y energía[4].

En el modelo desarrollado sólo se considera transferencia de calor en dirección axial y radial. Es necesario resaltar que axialmente se considera transferencia por convección, mientras que radialmente se considera transferencia por conducción. El procedimiento para llegar a la expresión que describe cualitativa y cuantitativamente la transferencia de calor, consta de los siguientes pasos: i) se establece una envoltura de material del sistema en estudio, ii) se escribe una expresión para la envoltura de material a partir de la ecuación de balance y se hace que el espesor de la envoltura tienda a cero, iii) se obtiene la expresión final para la distribución de energía y iv) se establecen las condiciones límite o de frontera. Para proceder a la solución numérica de la ecuación resultante, fue necesario realizar la discretización de las derivadas espaciales. El medio más directo de discretización es mediante la sustitución de las derivadas por expresiones equivalentes en diferencias finitas[3]. Para el estado estacionario, el modelo se resuelve mediante un método implícito, que ofrece mayor convergencia y estabilidad que un método explícito[2]. Puesto que en el desarrollo del modelo se considera que las propiedades físicas del fluido no son constantes, se implementa el método Newton-Raphson para estimar la temperatura a partir de la entalpía en cada nodo de la malla establecida. El perfil de velocidad se considera de forma parabólica y dependiente de r [1].

Para la solución del problema transiente la ecuación se discretiza para las derivadas espaciales. La derivada con respecto al tiempo se mantiene y se emplea el método de líneas para obtener la solución dinámica. Al igual que para el problema en estado estacionario, se emplea el método de Newton-Raphson para calcular la temperatura. Asimismo, se analiza el efecto que produce el tamaño de malla sobre el error que se obtiene en la solución de la ecuación de energía. Esto permite seleccionar una malla apropiada que asegure la convergencia, genere mínima desviación de los resultados del modelo y establezca un tiempo de simulación adecuado. El código de solución compilado en lenguaje c, se implementa en el software Labview® para la comparación directa entre el valor de la temperatura que se genera con el modelo y el valor experimental que se obtiene mediante la medición de temperatura a través de un RTD con hardware de adquisición de datos de National Instruments®.


[1] Bird, R.B., W.E. Stewart y E.N. Lightfoot; *Fenómenos de Transporte*, 2^{da} ed, Limusa Wiley- Mex. (2011).

[2] Carnahan, B., H.A. Luther y J.O. Wilkes; *Applied Numerical Methods*, John Wiley & Sons Inc.-USA (1969)

[3] Fletcher, C.A.J.; *Computational Techniques for Fluid Dynamics 1- Fundamental and General Techniques*, 2^{da} ed, Springer Verlag-Germany (1991).

[4] Ray, W.H.; *Advanced Process Control*, Butterworths-USA (1989).





Nanocompuestos a base de polímeros dispersos y nanofibras de carbono con propiedades mecánicas, ópticas y eléctricas.

Carlos Andrés Covarrubias Gordillo¹, Lorena Farías Cepeda^{1}, Ernesto Hernández² Hernández, Nancy Verónica Pérez Aguilar¹*

¹ *Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Coahuila, Blvd. V. Carranza S/N Col. República Oriente. Saltillo. Coahuila. CP 25280, México. E-mail: lorenafarias@uadec.edu.mx, covarrubiasg@hotmail.com*


² *Centro de investigación en Química Aplicada. Departamento de Materiales Avanzados. Blvd. Enrique Reyna Hermosillo No.140 C.P.25250 Saltillo, Coahuila México. E-mail: ehernandez@ciqa.mx*

En la actualidad las nanofibras de carbono (NFC) y otras nanopartículas a base de grafeno se añaden a matrices poliméricas como agentes de refuerzo, esto con el fin de generar un aumento en las propiedades mecánicas y eléctricas, entre otras, del nanocompuesto final [1-3]. Debido a que las nanofibras de carbono cuentan con la capacidad de establecer redes conductoras a bajas concentraciones, generando además acabados superficiales de mayor calidad a comparación de otras nanoestructuras de carbono [4]. De esta manera es posible fabricar materiales capaces de conducir o dispersar cargas eléctricas para aplicaciones como lo son: depósitos de combustible, polímeros con capacidad de apantallamiento electromagnético, polímeros con mayor tenacidad, etc [5, 6]. Una forma amigable con el medio ambiente de obtención de nanocompuestos es la tecnología látex, es decir se obtiene un polímero mediante polimerización en emulsión para después ser mezclado con el relleno y así formar el nanocompuesto al evaporar el agua del látex.

Mediante polimerización en emulsión se sintetizaron partículas con morfología núcleo – coraza, para usarse como la matriz polimérica. El polímero del núcleo es poliestireno y se obtuvieron mediante polimerización en emulsión *ab-incipio*. Se sintetizaron tres tamaños de partícula diferentes donde se varió la concentración de tensoactivo utilizada (17, 7.5 y 4 g/L). Los tamaños de partícula obtenidos fueron 77, 222, y 290 nm. Los núcleos fueron recubiertos por una coraza del copolímero compuesto por los polímeros poli metil metacrilato y poli butil acrilato mediante una polimerización en emulsión sembrada. Adyacentemente se modificaron superficialmente NFC mediante un plasma de ácido acrílico [7] con el fin de hacer las más afines a la matriz polimérica obtenida con anterioridad.

A los nanocompuestos obtenidos se le estudiaron las propiedades mecánicas, eléctricas y ópticas al variar la contracción de NFC en la matriz polimérica.

Referencias

- [1] M. Moniruzzaman, K. Winey, *Macromolecules* **2006**, 39, 5194.
 - [2] C. Merino, G. Ruiz, P. Soto, A. Melgar, I. Gobernado, N. Villarreal, J. Gómez, *Materiales compuestos Vol. II* **2004**, 2, 215.
 - [3] T. Wu, E. Chen, *Composites Science and Technology* **2007**, 68, 2254.
 - [4] L. Lorraine, J. Grunlan, J. Sun, W. Gerberich, *Colloids and Surfaces A: Physico chem. Eng Aspects* **2007**, 311, 48.
 - [5] M. Nuria, *Fabricación y caracterización de materiales compuestos de matriz metálica reforzados con nanofibras de carbono* **2010**, Tesis de doctorado.
 - [6] A. Arenillas, S. Cuervo, A. Domínguez, J. Menéndez, F. Rubiera, J. Parra, C. Merino, J. Pis, *Thermochimica Acta* **2004**, 423, 99.
 - [7] E. Hernández, A. Ponce, M. Ávalos, M. Neira, L. Ramos, *X Congreso nacional de microscopía–Morelia*, **2010**, 10.
- 

Cálculo del flujo de calor en un molde de acero.

Lucero Rosales Marines, José Julián Ledezma Sánchez
Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Coahuila,
Blvd. Venustiano Carranza y José Cárdenas S/N, Saltillo, Coahuila, C.P. 25280.
Email: julian_26@live.com.mx

La industria del acero es una de las más importantes tanto a nivel nacional como internacional. El acero, como materia prima, es el material estructural más importante en el mundo, el cual pasa por una serie de procesos para poder ser empleado en una amplia variedad de productos como varillas, vigas, piezas para la industria automotriz, entre otros ^[1]. El país cuenta con acereras con procesos que cumplen con los estándares de calidad a nivel mundial.

Uno de los principales problemas en las compañías del metal fundido es lograr establecer un rango óptimo de operación que permita la obtención del producto de buena calidad; por ejemplo, se ha visto que si la extracción del calor no es uniforme, el planchón tiende a agrietarse ^[2]. Este agrietamiento en el lingote genera pérdidas económicas y de tiempo en las industrias, así como un mayor consumo de materias primas e insumos energéticos, que a su vez afectan al ecosistema. En base a lo anterior, el objetivo de este trabajo consiste en calcular el flujo de calor que existe en una de las primeras etapas del procesamiento del acero (que es a la salida del molde del planchón), en función de la cantidad de agua de enfriamiento. Estos cálculos

permitirán tener un mejor control del flujo de calor que a su vez serán de ayuda para establecer un rango de parámetros óptimos en función del flujo calorífico.

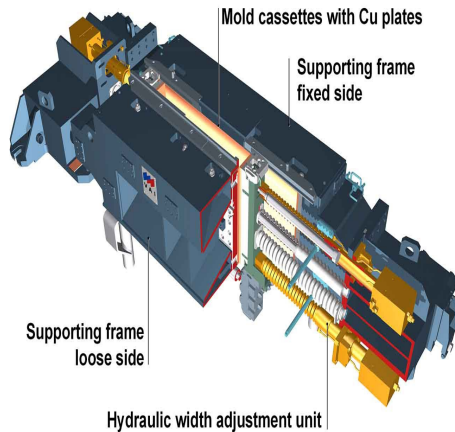


Figura 1


Para poder llegar al establecimiento el rango de operación óptima es necesario conocer el mecanismo de enfriamiento del acero en esta parte del proceso. El calor en estos moldes de vaciado de acero líquido es extraído por una serie de conductores de agua que circula a gran velocidad [figura 1], estos cajones actúan como extractores de calor que liberan paulatinamente el calor del acero líquido conforme este avanza convirtiéndose poco a poco en acero sólido. La transferencia de calor se lleva a cabo en varias etapas, en donde las principales son las siguientes dos: la

primera es la transferencia por conducción entre el acero líquido y la pared del enfriador; la segunda etapa es una transferencia por convección entre la pared del enfriador y el fluido refrigerante en tránsito, que en este caso es agua. Para ello es necesario resolver las ecuaciones de flujo para cada una de las transferencias de calor considerando parámetros necesarios como el número Nusselt o el Reynolds ^[3] por mencionar un ejemplo.

[1] Lorenzo Martínez Gómez, "La fuerza y la debilidad del acero, 5ª semana de divulgación científica de la Universidad Autónoma de Aguascalientes, noviembre 2012, Aguascalientes Ags.

[2] C. Cicutt, Rev. Met. 1997, Vol 33, No 5, 333-344.

[3] R.B. Bird, W.E. Stewart, E.N. Lightfoot, "Fenomenos de transporte", segunda edición, Editorial Reverté, 1992



“Simulación y control del proceso de reformación catalítica de naftas”

Montiel J. Osvaldo^a, Castro A. Ángel^a.

^aUniversidad Autónoma de Tlaxcala

Email del autor para correspondencia: osvaldo_1805@hotmail.com

La reformación catalítica es un proceso químico empleado para convertir las naftas del petróleo, particularmente las naftas pesadas que salen de la destilación del crudo se convierten de gasolina con bajo número de octanos a gasolina con un alto número de octanos, por lo que se le llama reformado.

Además de producir reformado, la reformación catalítica es también una fuente primaria de aromáticos usados en la industria petroquímica (BTX: benceno, tolueno y xileno). Para analizar y optimizar el proceso de reformación, se desarrolla un control multivariable no lineal restringido y una estrategia de optimización para manipular las restricciones. En el presente trabajo, se desarrolla solo la simulación dinámica del proceso de reformación catalítica que será usado en la aplicación del control no lineal multivariable sobre la sección de reacción para la temperatura de entrada al reactor.

El modelo empleado [1] se desarrolló basándose en el esquema cinético de Smith [2]. El controlador no lineal multivariable restringido, controla la “weighted average inlet temperature (WAIT)”, el cual opera respecto a las restricciones de temperatura del calentador. El mismo modelo es usado para la optimización y el control, minimizando los errores del modelado debido al desajuste proceso/modelo.

[1] D. Iranshahi, E. Pourazadi, K. Paymooni, A. M. Bahmanpour, M. R. Rahimpour, A. Shariati, Modeling of an axial flow, spherical packed-bed reactor for naphtha reforming process in the presence of the catalyst deactivation. *International Journal of Hydrogen Energy*, **2010**, 35, 12784-12799.

[2] R. B. Smith, Kinetic analysis of naphtha reforming with platinum catalyst. *Chem. Eng. Prog.* **1959**, 55(6), 76-80.





“Interconexión de Módulos para el Cálculos en Destilacion y Evaporacion con Interfaces Gráficas para un Laboratorio Virtual de Operaciones Unitarias”

Calderon B.M.P., Osorio M. A., Sánchez B.L.A., Sánchez B.I., Vicente M.J., Hernández A.E.

Universidad Veracruzana, Facultad de Ciencias Químicas, Prolongación Oriente 6 No. 1009, CP 94340, Orizaba Ver., México. Tel./Fax (01 272) 72 4 01 20
pau.calderon@hotmail.com

La destilación es la operación unitaria más significativa en la industria ya que su objetivo principal es separar una mezcla de varios componentes aprovechando sus distintas volatilidades. La factibilidad de separación de mezclas por destilación depende del hecho de que las composiciones de las dos fases, líquida y vapor, sean diferentes en el equilibrio. [1]

En la actualidad se hallan diversos programas computacionales para apoyar procesos de enseñanza y aprendizaje en Ciencias de la Ingeniería. Sin embargo, los que se ofrecen, son realizados en su mayoría, por empresas especializadas en software específico de acuerdo al tipo de industria, y casi todos proporcionan información sobre los aciertos y errores de los usuarios. Por lo cual es preciso analizar críticamente los motivos, las oportunidades, los mecanismos y los desafíos que entraña el desarrollo de *laboratorios virtuales*. [2]

En este trabajo se elaboró un Laboratorio Virtual como herramienta computacional para permitir la reflexión y el aprendizaje de los conceptos básicos en Operaciones Unitarias, principalmente en destilación y evaporación. Así mismo, las interfaces tienen la suficiente flexibilidad para permitir que los estudiantes desarrollen distintas soluciones para los problemas planteados. La construcción de aplicaciones con Visual Basic 6.0 es simple, basta crear los controles en el formulario con ayuda de la caja de herramientas y del *mouse*, establecer sus propiedades con ayuda de la ventana de propiedades y programar el código que realice las acciones en respuesta a los eventos que defina el usuario [3]. El trabajo muestra que una vez que la interconexión se ha realizado entre los módulos de cálculo y la interfaz gráfica de usuario principal se pueden manejar los diferentes métodos de destilación binaria y/o multicomponente en forma paralela, para realizar estudios comparativos ó para evaluar ejercicios desarrollados en forma analítica. Los diferentes módulos de cálculo en evaporación y destilación se realizaron en un trabajo previo utilizando un lenguaje de programación en código abierto como phyton 2.6 [4;5;6].

Palabras claves: Destilación, Visual Basic 6.0, Laboratorio Virtual, evaporación.

Referencias Bibliográficas

- [1] McCabe W. L., Smith J., Harriott P. H., Operaciones Unitarias en Ingeniería Química. McGraw-Hill Inc, México. 1991. 1^{ra} Edic., p.p. 484.
- [2] Charles D., Holland, Computer Methods for Solving Dynamic Separation Problems. McGraw-Hill, U.S.A, 1983. p. 52.
- [3] Sánchez M., García J.M., Gómez A.F y Martínez H., Experiencias, Recursos y otros Trabajos de Diseño y Aplicación Educativa de un Programa de Simulación para el aprendizaje de Técnicas Experimentales con Sistemas de Adquisición de Datos, Rev. Eur. Enseñ. Divul. Cien., 2006, Vol. 3, No. 2, pp. 251-267.
- [4] Beristaín L. J., Tesis de Licenciatura en Ingeniería Química, Universidad Veracruzana, México, 2009.
- [5] Luna T. M., Tesis de Licenciatura en Ingeniería Química, Universidad Veracruzana, México, 2009.
- [6] Martínez G. A., Atempa R. P., Tesis de Licenciatura en Ingeniería Química, Universidad Veracruzana, México, 2009.





Desarrollo de modelos cinéticos para el Proceso de reformación catalítica de naftas.

López-Sánchez E.^a, Ortiz-Arroyo A.^b

^{a,b}Universidad Autónoma de Tlaxcala
elvira.lopezs@gmail.com

Uno de los procesos clave en refinación de petróleo e industrias petroquímicas es la reformación catalítica de naftas. Este proceso es ampliamente utilizado para convertir los hidrocarburos de bajo octanaje (parafinas y naftenos) de la nafta en componentes de gasolinas de alto octanaje (aromáticos) [1]. La nafta es una fracción de petróleo, por lo general constituye 15-30% del petróleo crudo en peso, y hierve entre 30°C y 200°C. Esta mezcla compleja consiste en moléculas de hidrocarburos con 5-12 átomos de carbono, incluyendo principalmente parafinas, olefinas, naftenos y aromáticos. Existen otros componentes tales como azufre, nitrógeno, oxígeno, agua, sal y metales que contienen constituyentes como: vanadio, níquel y sodio [2].

El mejoramiento en la calidad el octanaje se obtiene mediante la formación y la concentración de hidrocarburos aromáticos como resultado de una variedad de reacciones. La simulación del proceso de reformación necesita información relativa de la cinética de reacción así como de la transferencia de calor y de masa entre la fase gaseosa y la superficie del catalizador.

Debido a que las particulares cinéticas de este proceso son complejas por las reacciones que se generan, se desarrollaron dos Modelo Cinéticos de diferente complejidad cada uno, propuestos por Smith (1959) y Rodríguez&Ancheyta (2011), siendo el primero el más sencillo ya que idealiza las naftas en tres componentes principales: parafinas, naftenos y aromáticos; con un promedio de propiedades en cada grupo. Lo que significa que dentro de una clase de hidrocarburos no se hace distinción sobre la base del número de átomos de carbono [3]. Sin embargo el segundo, si hace distinción sobre el número de carbonos, y se toman en cuenta los compuestos que se generen de cada grupo [4].

Los modelos consisten en tres en reactores en serie que predicen los perfiles de concentración de reactivos y productos, perfiles de temperatura en cada uno de los reactores y el octanaje. Para éstos se tomaron en cuenta datos de alimentación de planta. Numéricamente se integran simultáneamente un sistema de ecuaciones por componente y un balance de energía para cada reactor.

Ambos modelos predicen satisfactoriamente perfiles de concentración y temperatura, sin embargo el modelo más complejo muestra la composición a detalle de parafinas, naftenos y aromáticos al extender el número de reacciones y de componentes.


[1] Gyngazova, M., V. Kravtsov, A., D. Ivanchina, E., & V. Korolenko, M. Chemical Engineering Journal. 2011, 176-177,134-143.

[2] Rahimpour M., Iranshahi D., Pourazadi E. Fuel. 2012, 97, 109-118.

[3] Bommanna D., Srivastava R.D. Canadian Journal of chemical engineering. 1989, 67, 405-411.

[4] Rodriguez A., Ancheyta J. Fuel. 2011, 90, 3492-3508





Simulación del proceso de reformación de naftas usando reactores CSTR isotérmicos en serie. Estimación de parámetros cinéticos del proceso.

D.Barajas^a, A.Ortiz^a

^aUniversidad Autónoma de Tlaxcala, Calzada Apizaquito s/n, Apizaco, Tlaxcala, México.
aortiz2000@hotmail.com

^aAfiliación del primer Autor, ^bAfiliación del segundo Autor (Times New Roman, 9 pt, interlineado sencillo, centrado)

Email del autor para correspondencia: Times New Roman, 9 pt, italica, centrado

La nafta es la fracción del petróleo con una temperatura de ebullición entre 30 ° C y 200 °C, y constituye típicamente 15-30% en peso del petróleo crudo. La Nafta como materia prima es una mezcla compleja compuesta de hidrocarburos aromáticos, olefinas e isómeros. Dicha mezcla es demasiado compleja como para considerar un modelo cinético detallado tomando en cuenta todos los componentes y sus reacciones [1].

El uso de modelos matemáticos de simulación es de gran utilidad para poder optimizar las condiciones de operación, estudiar el efecto de las variables del proceso y del tipo de carga en los productos y como consecuencia, permiten incrementar la eficiencia del proceso [2].

Desde los años 50's, varios métodos se han propuesto para encontrar familias de compuestos que representen las reacciones de reformación catalítica. En este sentido, el primer intento significativo y exitoso para modelar un sistema de reformación fue hecho por Smith en 1959. En este modelo se considera que la nafta consta únicamente de tres familias básicas; parafinas, naftenos y aromáticos que engloban una gran cantidad de compuestos relacionados por su estructura y reactividad.

En este trabajo se utiliza el modelo de Smith para la obtención de parámetros cinéticos en la reformación catalítica de naftas. Todos los parámetros cinéticos se obtienen inicialmente a partir de datos de la literatura.


El cálculo de los parámetros cinéticos para la reformación de naftas se lleva a cabo en un reactor continuo perfectamente agitado en estado estacionario y no isotérmico, incluyéndose las ecuaciones cinéticas de cada familia al igual que las ecuaciones de diseño para el reactor mencionado.

Posteriormente se estiman parámetros cinéticos por optimización con datos experimentales de la literatura y de planta, y se comparan con parámetros reportados en la literatura.

[1]D. Iranshahi, E. Pourazadi, K. Paymooni, A.M. Bahmanpour, M.R. Rahimpour*, A. Shariati (2010). Modeling of an axial flow, spherical packed-bed reactor for naphtha reforming process in the presence of the catalyst deactivation. ELSEVIER, 12784.

[2]J. Ancheyta (1993), Modeling and Simulation of Catalytic Reactors for Petroleum Refining. WILEY, 126.





Simulación de la polimerización radical de estireno en tanques agitados utilizando dinámica de fluidos computacional

García-Temoltzin M.^a, Ortiz-Arroyo A.^b,
^{a, b}Universidad Autónoma de Tlaxcala
jirarem_cnr@hotmail.com

La polimerización en emulsión ha tenido un gran desarrollo en los últimos 40 años. La diversificación de sus productos y sus amplias posibilidades de aplicación (adhesivos, pinturas, recubrimientos de papel, textiles, etc.) han aumentado considerablemente su demanda y de esa forma obliga a usar reactores de mayor volumen para su fabricación, así como la búsqueda de técnicas alternativas de producción.


La mayoría de los estudios de polimerización se llevan a cabo mediante experimentación a nivel laboratorio, sin embargo una opción económica para la industria es la experimentación utilizando modelos computacionales confiables que incluyan la mayoría de los fenómenos hidrodinámicos, fisicoquímicos, cinéticos y térmicos que suceden en los reactores. Estos modelos, una vez validados, proporcionan información que difícilmente se puede obtener con mediciones de laboratorio y permiten obtener datos en menor tiempo y costo.

Un parámetro importante para las polimerizaciones es la hidrodinámica del reactor, ya que influyen en el rompimiento y coalescencia de las micelas de polímero que se forman, por lo tanto es fundamental conocer la hidrodinámica de los reactores para relacionarla con el tamaño de la partícula. Para que un polímero tenga una calidad/precio aceptable en la industria es necesario que las partículas formadas durante la reacción tengan la menor dispersión de tamaño posible.

En éste trabajo se desarrollan simulaciones utilizando un programa de cálculo CFD que resuelve las ecuaciones de flujo, de transferencia de calor y de transporte de especies a diferentes condiciones, variando la velocidad de agitación, la altura del agitador, la presencia (o no) de mamparas, entre otros. Incluyendo, en una primera aproximación únicamente la polimerización radical de estireno, pero excluyendo el efecto gel.

Se presentan relaciones entre el tamaño de partícula y la turbulencia, la presencia de volúmenes muertos, y otros parámetros geométricos y de flujo del reactor de polimerización.





Cálculo de la relación de reflujo mínimo aplicando un procedimiento matemático basado en el método de Ponchon-Savarit

Elsa Hynmar Fernández-Martínez^a, Ángel Castro-Agüero^a, Nelly Ramírez-Corona^b

^a Facultad de Ciencias Básicas Ingeniería y Tecnología, Universidad Autónoma de Tlaxcala, Calzada Apizaquito S/N, Apizaco, Tlaxcala, 90300, México.

^b Departamento de Ingeniería Química, Alimentos y Ambiental, Universidad de las Américas Puebla, Ex hacienda Sta. Catarina Mártir, Cholula, Puebla, 72820, México.
elshymar@yahoo.com.mx

El diseño conceptual de columnas de destilación permite el cálculo directo de relación de reflujo mínimo y evita cálculos de prueba y error empleados en un simulador comercial. El reflujo mínimo se puede calcular por métodos gráficos, los cuales se aplican generalmente a las mezclas binarias; mediante el uso de métodos cortos, pero considerando ciertas simplificaciones, tales como flujos internos constantes e igualdad de volatilidades relativas de los componentes a través de la columna, o bien mediante métodos rigurosos que implican un procedimiento iterativo.

Para mezclas binarias, la determinación de la relación de reflujo mínimo como variable de diseño, se puede llevar a cabo mediante el método de Ponchon-Savarit (Henley y Seader, 1999), tanto para mezclas ideales como no-ideales. Los balances de materia y energía, así como el equilibrio líquido-vapor del sistema se integran en un diagrama de Entalpía-Composición. Reyes y colaboradores (2000) reportaron la extensión de este método para mezclas ternarias, considerando la generación de un espacio vectorial empleando una solución iterativa para el cálculo de la relación de reflujo mínimo de tres mezclas a diferentes condiciones de operación; dichos autores compararon sus resultados con los obtenidos mediante diferentes métodos cortos y un método riguroso, obteniéndose valores más aproximados a los calculados con métodos rigurosos.

Este trabajo propone un procedimiento matemático para sistemas multicomponentes ideales y no-ideales basado en los conceptos del método de Ponchon-Savarit calculándose el valor del reflujo mínimo de forma directa y sencilla, sin embargo es posible determinar otras variables de diseño tanto en columnas convencionales como complejas. En el estudio se deben considerar algunas especificaciones, tales como la composición de la corriente de alimentación, recuperaciones de los componentes clave, así como el flujo de destilado; la condición térmica de la alimentación es como líquido saturado. El equilibrio líquido-vapor se determinó mediante la ley de Raoult para el caso ideal y la ley de Raoult modificada con el modelo de Wilson se utilizó para la mezcla no ideal.

Se obtuvo la relación de reflujo mínimo para una mezcla equimolar de n-pentano-n-hexano-n-heptano en una columna de destilación convencional presentando una diferencia del 10% con respecto al valor obtenido con la ecuación de Underwood. Las composiciones del destilado se calcularon utilizando el método propuesto considerando las especificaciones y la división del componente intermedio fue de 29,5% en la parte superior de la columna, considerada como la separación preferida. Los resultados de la relación de reflujo mínimo utilizando el procedimiento matemático propuesto para mezclas no-ideales se acercan más a las simulaciones rigurosas que los valores obtenidos con los métodos aproximados debido a los supuestos que considera el método de Ponchon-Savarit.

[1] Henley, E. J. And Seader, J. D., *Operaciones de separación por etapas de equilibrio en ingeniería química*. 1990, segunda edición, Editorial Reverté, España.

[2] Reyes, J.A., Gómez, A. and Marcilla, A., *Graphical Concepts to Orient the Minimum Reflux Ratio Calculation on Ternary Mixtures Distillation*. 2000, Ind. Eng. Chem. Res., 39, 3912-3919.





Controlador de Modelo Interno No Lineal Para Sistemas Reacción-Separación-Reciclo

Yessica López^a, Javier R. Morales^a, Misael González^a y Ángel Castro^b

(a) Universidad Politécnica de Tlaxcala, Av. Universidad No. 1, San Pedro Xalcaltzinco, Tlaxcala, México

(b) Facultad de Ciencias Básicas, Ingeniería y Tecnología, Universidad Autónoma de Tlaxcala, Calzada Apizaquito s/n, Tlaxcala, México

e-mail: misael.gonzalez@uptlax.edu.mx

El funcionamiento típico de una planta química cuenta con procesos de Reacción-Separación-Reciclo (RSR), que reingresan al sistema de reacción los reactivos que no reaccionaron. Los RSR presentan el fenómeno "bola de nieve": cuando hay un cambio en la corriente de alimentación, conduce a aumentos significativos en el flujo de la corriente de reciclo, ocasionando aumentos de los costos de operación a causa del aumento de las necesidades energéticas en los sistemas de destilación [1]. Todo esto cuando se utiliza una estructura de control convencional, la cual consiste en controlar el nivel del reactor, el nivel del tanque de reflujo, la composición de destilado, la composición de fondos y el nivel del ebullidor manipulando el flujo de efluente, flujo de destilado, reflujo, vapor del ebullidor y flujo de fondos, respectivamente.

Es por ello que investigadores se han dedicado al estudio de la dinámica inducida por la corriente de reciclo cambiando la estructura de control. Se ha determinado que mantener el nivel del reactor en su máximo, optimiza el rendimiento económico, además, se encontró que el flujo de destilado debe permanecer constante para disminuir el efecto "bola de nieve", sin embargo, esto solo funciona con pequeñas perturbaciones en la corriente de alimentación [2]. Por otra parte, se han hecho esfuerzos por omitir el efecto del tiempo muerto en este tipo de sistemas modificando las condiciones y/o estructura de control [3]. También se ha tratado este problema con el uso de esquemas balanceados de control, que ajustan el nivel de reactor y el flujo de la corriente de reciclo para disminuir el efecto de las perturbaciones en la corriente de entrada [4]. Otros esquemas usan controladores del efluente del reactor y el flujo de alimentación permitiendo que el nivel de reactor pueda variar y minimice la inestabilidad cuando se presentan perturbaciones en la composición de la alimentación.

Todos estos estudios modificaron las estructuras de control convencional utilizando controladores lineales, lo cual incrementa los costos de instrumentación de la planta. El Controlador de Modelo Interno No Lineal (NLIMC), es robusto a la presencia de perturbaciones y errores de modelado. En un RSR, un cambio en flujo entrada es considerado una perturbación y esta modifica de manera significativa las condiciones de operación, lo se contempla en el modelado de unidades de proceso no acopladas. El uso de estos modelos no garantiza estabilidad cuando los procesos son acoplados. Debido a lo anterior el NLIMC es una estrategia que puede ser atractiva para este tipo de procesos. En el presente trabajo se considera un sistema RSR con una reacción en fase líquida isotérmica elemental de primer orden $A \rightarrow B$, y una columna de destilación con flujos molares internos y volatilidad relativa constantes. El sistema acopla las corrientes de los materiales sin considerar los efectos térmicos. Se utiliza una estructura de control convencional implementando un Controlador de Modelo Interno No Lineal, con el objetivo de minimizar el efecto "bola de nieve". Se encuentra que el comportamiento dinámico de sistema RSR mejora en comparación al uso de controladores PID.

[1] Luyben. W.L., *Ind. Eng. Chem. Res.* **1994**, *33*, 299-305.

[2] Larsson. T., Govatsmark. M. S., Skogestad. S. y Yu. C. C., *Ind. Eng. Chem. Res.* **2003**, *42*

[3] Balasubramanian. P., Kosuri. M. R., Pushpavanam. S., y Kienle. A., *Ind. Eng. Chem. Res.* **2003**, *42*, 3758-3764.

[4] Sagale. A. A. y Pushpavanam. S., *Ind. Eng. Chem. Res.* **2002**, *41*, 2005-2012.





Simulación monte Carlo de presiones de vapor del etilenglicolcon

*Huerta Ramos, A. Elías Domínguez, E. Reyes Pérez
adri_ceny04@hotmail.com*

Se calcula la presión de vapor del Etilenglicol implementando el método de Harismiadis y col. (1996), utilizando la técnica de simulación Monte Carlo en el ensamble de Gibbs (NVT). Se realizaron simulaciones en el intervalo de temperatura de 307.65 a 700 K, con y sin contribución de largo alcance en interacciones LJ.

Se determinaron las propiedades: densidad de líquido y vapor y la presión de vapor. Los resultados obtenidos se comparan con datos presentados en literatura (Smith y col., 1986).

Los resultados en densidad de la fase líquida son sobreestimados respecto a los datos de literatura, con un error de predicción promedio de 10.80. En la fase vapor los resultados son sobreestimados a temperaturas inferiores a 550 K, con un error de predicción promedio de 34.53, sin considerar la contribución de largo alcance en interacciones LJ.

Considerando esta contribución, los errores se reducen principalmente en la fase vapor, con un error de desviación promedio de 21.98 y de 10.57 para la fase líquida. Los resultados estimados de presión de vapor tienen un comportamiento similar a los datos reportados por Smith y col. (1986), con un error de desviación promedio (sin contribución de largo alcance) de 3.96 y de 2.77 considerando la contribución de largo alcance en interacciones LJ.

Disponer de datos de presión de vapor permite predecir la posible vía de eliminación del compuesto en la atmósfera. A 307.65 K, se obtuvo un valor de presión de vapor simulado de 0.02893 bar, con el cual, se obtiene la distribución gas/sólido empleando el modelo teórico de Junge (1977). Se obtuvo una distribución gas/sólido de 8.7×10^{-7} , es decir, que el 99.99 % del Etilenglicol está presente en la atmósfera en fase gas y la posible vía de eliminación es por reacción con el radical OH, NO₃ y O₃.

1. Harismiadis, V., Vorholz., Panagiotopoulos A. 1996. Efficient Pressure Estimation in Molecular Simulations Without Evaluating the Virial. School of Chemical Engineering, Cornell University, Ithaca, New York. 14853-5201.
2. Smith, B., Srivastava, R. 1986. Thermodynamic Data for Pure Compounds: Part A: Hydrocarbons and Ketones. Elsevier. New York.
3. Junge, C. E. 1977, Basic considerations about trace constituents in the atmosphere as related to the fate of global pollutants. Fate of Pollutants in Air and Water Environments. I. H. Suffett. Wiley, New York. Part I.





Recuperación como factor de diseño en una columna Petlyuk

Olguín Angeles, José Daniel*; Castro Agüero, Ángel. Facultad de Ciencias Básicas Ingeniería y Tecnología, Universidad Autónoma de Tlaxcala. Calzada Apizaquito, Apizaco, Tlaxcala, México.

*jdanieloa@gmail.com

Se han realizado una gran cantidad de trabajos con la finalidad de mejorar la eficiencia energética en los sistemas de destilación, dentro de los que destaca como estrategia prometedora el uso de acoplamiento térmico, como el propuesto por Petlyuk y col. en 1965, en los cuales la transferencia de calor se realiza por intercambio directo de flujos másicos entre dos columnas. Sin embargo, aunque estas configuraciones que pueden alcanzar importantes ahorros, tanto en consumo energético como en capital, no han sido implementadas ampliamente a nivel industrial (Márquez-Muñoz 2005).

Las columnas Petlyuk se pueden diseñar con la metodología de Ponchon-Savarit modificada para tres componentes. En este caso específico de estudio, la columna Petlyuk se separó en tres partes, la primera es el pre-fraccionador, la segunda es la parte por arriba de la extracción lateral de la columna principal y la tercera en la parte por debajo de la extracción lateral en la misma.

Se hizo un estudio seleccionando las recuperaciones en el domo del pre-fraccionador, la sección dos y tres, para determinar la combinación óptima para el diseño del sistema Petlyuk, en base a los criterios que a nosotros nos interesen más, como lo pueden ser el reflujo mínimo o la cantidad de energía requerida en el condensador o re-hervidor o la pureza del componente a separar. Para esto, en este trabajo se hizo un barrido desde la recuperación mínima (f_{MIN}), hasta la recuperación máxima posible (f_{MAX}) en los domos de las secciones.

En los resultados obtenidos es visible el efecto de retro-mezcla que existe en la zona de separación preferida. Se elaboró una tabla con los resultados obtenidos y las gráficas correspondientes para observar los beneficios y desventajas de seleccionar una recuperación u otra, también se observó que para las secciones dos y tres trabajar en la zona de separación preferida, implica que el grado de separación que se puede alcanzar es bajo.

Bibliografía

Márquez-Muñoz, J. A., Segovia-Hernández, J. G. y Hernández, S. (2005). Propiedades de Control de Esquemas de Destilación Alternativos a las Secuencias Térmicamente Acopladas con Columnas Laterales para la Separación de mezclas Ternarias, *Revista Mexicana de Ingeniería Química*, Vol. 4, 231-240.

Petlyuk, F. B.; Platonov, V. M.; Slavinsk. D. M. (1965). Thermodynamically Optimal Method For Separating Multicomponent Mixtures. *International Chemical Engineering*, **5**, (3), 555.

