

3^{er} Simposio Nacional de Ingenierías Química y Bioquímica aplicadas

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
Auditorio Gral. Emiliano Zapata Salazar, Campus Norte

24 al 26 de septiembre, 2014



Memorias



Universidad Autónoma del
Estado de Morelos



INSTITUTO DE INGENIERÍA Y
TECNOLOGÍA

3^{er} Simposio Nacional de Ingenierías Química y Bioquímica aplicadas

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
Auditorio Gral. Emiliano Zapata Salazar, Campus Norte

24 al 26 de septiembre, 2014

Memorias



CONTENIDO

9 Conferencias Plenarias

- 11 Aplicación de procesos avanzados al tratamiento de aguas residuales industriales
Alberto López López
- 23 Requisitos y retos de los Ingenieros Químicos para ingresar a la industria de la refinación en México
Carlos Gustavo Sánchez Lugo
- 29 Desarrollo de nuevos sistemas π -conjugados con grupos fotoactivos: síntesis y propiedades ópticas
Ernesto Rivera García
- 34 Nanopartículas y coloides ambientales de óxidos de Fe y Mn: Su importancia en la retención y transformación de contaminantes
Mario Villalobos Peñalosa
- 38 Evaluación de la remoción y degradación de hidrocarburos aromáticos por microalgas con metodología bioanalítica de óptima selectividad y detección
Martha Patricia García Camacho

43 Cursos y talleres

- 45 Curso: Fotoquímica molecular
William E. Rodriguez
Rodrigo Morales Cueto
- 47 Curso: Preparación de pigmentos menos agresivos con el medio ambiente
Verónica de la Luz Tlapaya
- 54 Curso de materiales cerámicos
Ma. de Lourdes Chávez García
- 59 Taller de Octave/Matlab
Oscar Peralta
- ### 67 Contribuciones orales
- 69 Nanocomposito del ZnO/ polipirrol fotoactivo en luz visible para la degradación de colorantes
- 73 Cuantificación de solutos compatibles presentes en bacterias halófilas mediante DMFS y ^1H qRMN
- 78 Cinética de la polimerización en emulsión de estireno en presencia de cinco surfactantes de reactivos

- 82 Producción de H₂ y CH₄ en un proceso secuencial a partir de residuos orgánicos minimizando el uso de aguas
- 86 Aprovechamiento de la energía residual de pilas usadas tipo “D”
- 90 Síntesis de nano-hidrogeles mediante polimerización en microemulsión de polímeros biodegradables con aplicación en la agroindustria
- 94 Uso de grasa residual de LICONSA para la producción de biodiesel por método convencional y microondas
- 98 Efecto de la rapidez de la deformación en la dispersión de un nanocompuesto polimérico
- 101 Adsorción y toxicidad de malatión en presencia de nanotubos oxidados
- 105 Caracterización experimental de un transformador térmico por absorción con absorbedor adiabático
- 110 Síntesis de resinas porosas para la remoción de metales pesados de efluentes industriales
- 114 Determinación de residuos de plagicidas organoclorados de peces de la presa Falcón en Tamaulipas, México
- 119 Construcción de un sistema de *cavity ring down spectroscopy* para detección de NO₂
- 123 Degradación de benzo(a)pireno por *Serratia marcescens*, en fase semisólida
- 127 Obtención de densidades del metanol con simulación molecular
- 132 Inmovilización de *Burkholderia sp.* sobre diferentes soportes para la remoción biológica de paratión metílico
- 137 *Carteles*
- 139 Síntesis en emulsión inversa vía RAFT de un copolímero de acrilamida con hexadecil acrilamida
- 143 Resonancia magnética nuclear de proteínas en la UAEM
- 146 Simulación de la reformación de naftas en camas fluidizadas utilizando dinámica de fluidos por computadora
- 149 Análisis de la cepa de *Trichoderma atroviride* que expresa el gen *Lcc* de *Trametes sanguineus*
- 153 Nanocomposito TiO₂/polipirrol fotoactivo con luz visible sintetizado mediante polimerización en heterofase en presencia de diferentes agentes tensoactivos

- 158 Inmovilización de lacasa de *Trametes versicolor* en nanopartículas de oro
- 162 Síntesis de nano-hidrogeles de poliacrilamida mediante polimerización en microemulsión inversa
- 167 Simulación dinámica de un sistema de calentamiento mediante un modelo de parámetros distribuidos
- 171 Determinación del reflujo mínimo de una mezcla binaria no ideal con un método riguroso
- 175 Estudio del potencial de habitabilidad del océano del satélite Europa
- 179 Asignación de Late Embryogenesis Abundant (LEA4-5) por RMN
- 181 Análisis térmico por CFD por un evaporador en arreglo cuadrado aire-agua acoplado a un sistema de refrigeración por absorción
- 185 Control de la microestructura de un copolímero sintetizado a partir de monómeros (acrilonitrilo y acetato de vinilo) con amplia diferencia de reactividades controlando la velocidad de adición
- 190 Modelado y simulación de un reactor a escala piloto para la producción de propilenglicol
- 192 Obtención y análisis de extractos de *Psittacanthus calyculatus* y *Phoradendron tomentosum* con potencial hipoglucemiante e hipotensor
- 196 Biosíntesis de la enzima tanasa en fermentación en medio sólido empleando biorreactor de columna
- 201 Equilibrio líquido-vapor de mezclas de metanol-etanol y etanol-agua en presencia de cloruro de sodio
- 204 Conductividad efectiva de un material 1-3
- 208 Análisis de un modelo cinético catalítico heterogéneo en estado dinámico para el proceso de reformación catalítica de naftas (C7)
- 212 Biosíntesis de nanopartículas de oro usando proteínas de reserva presentes en semilla de *Jatropha curcas*
- 215 Síntesis del derivado 2-(2-fluorofenilamino)-1,4-naftoquinona para su posible utilización como antibacteriano. Pruebas biológicas
- 219 Evaluación de la expresión génica de *Salinibacter ruber* bajo condiciones de estrés salino
- 223 Simulación del proceso semiregenerativo de reformación catalítica de nafta

- 227 Un modelo matemático asintótico para la caracterización de materiales compuestos bajo fenómenos acoplados
- 231 Estudio de la degradación de la poliacrilamida por fotólisis directa
- 235 Análisis normativo de riesgo ambiental a nivel estatal
- 238 Simulación de reactores de polimerización de acrilamida utilizando CFD
- 241 Búsqueda de inhibidores para la formación de fibras amiloides de la proteína 6aR24G
- 243 Búsqueda de modificaciones en la secuencia del gen que codifica para canales de sodio dependientes de voltaje asociado al mecanismo de resistencia a piretroides en *Aedes aegypti* en el estado de Morelos
- 247 Reactividad y cinética de degradación de esteroides con ozono para el tratamiento de agua
- 252 Evaluación de la adaptación de bacterias halófilas en medios enriquecidos con sales de interés astrobiológico
- 257 Caracterización de la resistencia de *Aedes aegypti* a plaguicidas organofosforados
- 259 Degradación y disminución de genotoxicidad del endosulfán por actividad fúngica
- 263 Evaluación de la librería metagenómica en búsqueda de actividades novedosas para degradar compuestos tóxicos aromáticos
- Obtención de etanol a partir del almidón de papa (*Solanum tuberosum*)
- 267 Efecto de los emulsificantes contenidos en los fluidos de perforación base aceite sobre la termodesorción de los recortes de perforación
- 272 Efectos de fracciones del veneno de *Scolopendra polymorpha* sobre músculo esquelético de ratón
- 277

The background is an abstract composition of various shades of green and blue. It features several horizontal bands of semi-transparent dots, some of which are blurred to create a bokeh effect. There are also several thin, flowing lines that sweep across the frame, giving it a sense of movement and depth. The overall aesthetic is clean, modern, and professional.

Conferencias Plenarias

APLICACIÓN DE PROCESOS AVANZADOS AL TRATAMIENTO DE AGUAS RESIDUALES INDUSTRIALES

Alberto López López

Centro de Investigación y Asistencia en Tecnología y Diseño del Estado de Jalisco (CIATEJ); Av. Normalistas 800,
Colinas de la Normal, 44270 Guadalajara Jal., México.

Tel. (33) 33 45 52 00 ext.1650; alopez@ciatej.mx; alopez103@yahoo.com

Este documento está enfocado a presentar los Procesos de Oxidación Avanzada, particularmente aquellos procesos en los que el ozono se encuentra involucrado como oxidante e iniciador de la producción de radicales OH° , pues según los antecedentes de investigación reportados, parecen ser los procesos más viables técnica y económicamente para tratar aguas residuales con alta concentración de materia orgánica recalcitrante. En la primera parte se presenta la problemática del tratamiento de las aguas residuales industriales con materia orgánica recalcitrante. En la segunda parte se presentan los fundamentos de los procesos de oxidación avanzada y finalmente, se presentan casos de estudio en los que se demuestra la eficacia de estos procesos.

1. INTRODUCCIÓN

El agua es tanto un derecho como una responsabilidad, y tiene valor económico, social y ambiental. Cada ciudadano, cada empresa, debe tomar conciencia de que el agua dulce de calidad es un recurso natural, cada vez más escaso tanto a nivel superficial como subterráneo, necesario no sólo para el desarrollo económico, sino imprescindible como soporte de cualquier forma de vida en la naturaleza. No cabe duda de que la industria es motor de crecimiento económico y, por lo tanto, clave del progreso social; sin embargo, regularmente, la necesidad de maximizar el proceso productivo excluye de la planeación el tercer elemento del desarrollo sustentable, la protección del ambiente. El adecuado

tratamiento de aguas residuales industriales y su posterior reutilización para múltiples usos contribuye a un uso racional del agua, protección de los cuerpos de agua y ecosistemas. Sin olvidar que el agua de calidad es una materia prima crítica para la industria (Fernández-Alba et al., 2006).

Las aguas residuales industriales presentan una extensa variedad de compuestos orgánicos, dependiendo del proceso que las genera, éstas pueden contener solventes y aditivos industriales, colorantes naturales y sintéticos, surfactantes, plaguicidas sintéticos, residuos farmacéuticos etc. Muchos de estos compuestos están asociados a problemas ambientales pero sobre todo a problemas de salud pública; varios de estos compuestos son considerados precursores de cáncer y disruptores del sistema endocrino (por sus siglas en inglés EDCs) (WHO, 2012; Barceló y Petrovic, 2008; USEPA, 2003).

Regularmente, los compuestos orgánicos presentes en las aguas residuales industriales son recalcitrantes o de baja biodegradabilidad natural o controlada, debido a la estabilidad de la estructura de estos compuestos por la presencia de halógenos y de dobles enlaces conjugados. Al ser macromoléculas orgánicas, su dimensión dificulta su penetración en las paredes de las células, implicando que la oxidación por vía biológica de estos compuestos sea lenta (Benotti et al., 2009; Kim et al., 2007; Domènech et al., 2001). Estas características de los compuestos

orgánicos representan un problema técnico de tratamiento por vía biológica y de potabilización del agua, ya que implicaría altos tiempos de retención hidráulica o inhibición de la biomasa (Barceló y Petrovic, 2008).

En este sentido, muchos compuestos orgánicos de origen industrial son comúnmente encontrados en los efluentes de las Plantas de Tratamiento de Aguas Residuales (PTAR), pero sobre todo persisten y se encuentran en cuerpos de aguas superficiales (ríos, lagos, arroyos); y en cuerpos de agua que sirven de fuente de abastecimiento de agua a potabilizar, situación que pone en alto riesgo la salud de las poblaciones consumidoras de este líquido. La contaminación de cuerpos de agua representa un problema técnico a nivel de tratamiento y potabilización del agua, dado que los tratamientos convencionales biológicos aerobios, anaerobios, coagulación-floculación, filtración y desinfección con cloro no son capaces de eliminar o degradar los compuestos orgánicos recalcitrantes presentes en las aguas residuales industriales (López-López et al., 2009).

En respuesta a esta problemática de salud pública y ambiental, en lo que se refiere a la necesidad tecnológica para tratar agua con presencia de compuestos orgánicos recalcitrantes, recientes investigaciones se orientan al desarrollo de nuevos procesos de tratamiento para eliminar por oxidación química estos compuestos, denominados procesos de

oxidación avanzada (AOPs por sus siglas en inglés, advanced oxidation processes). Este concepto fue inicialmente introducido por Glaze et al. (1987) para referirse al proceso de acoplamiento de dos o más agentes oxidantes O_3 , $/OH\cdot O_3$, $/H_2O_2$, O_3/Cat , Fe^{2+}/H_2O_2 , H_2O_2/UV , O_3/UV , $O_3/UV/Cat$ (Cat. =Ti(II), Co(II) Fe(II) con la finalidad de generar radicales hidroxilos (OH°), principales causantes de la oxidación completa de compuestos recalcitrantes o no biodegradables (Romero et al., 2014; Barceló y Petrovic, 2008; Coelho et al., 2007; López-López et al., 2007; Beltrán, 2004).

Particularmente, este documento está enfocado a presentar los Procesos de Oxidación Avanzada basados en Ozono (AOP- O_3), en los que se encuentra involucrado el ozono como oxidante e iniciador de la producción de radicales OH° ($O_3/OH\cdot O_3/H_2O_2$, O_3/Cat , O_3/UV), pues según los antecedentes de investigación reportados, parecen ser los procesos más viables técnica y económicamente para tratar aguas residuales con alta concentración de materia orgánica recalcitrante. Además, un AOP- O_3 promete ser uno de los recursos tecnológicos más apropiados para el tratamiento de aguas residuales de origen industrial contaminados con compuestos orgánicos de baja biodegradabilidad tales como: colorantes, compuestos fenólicos, fármacos, detergentes, hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAP), etc. (Coelho et al., 2007; López-López et al., 2007).

2 PROCESOS DE OXIDACIÓN AVANZADA

2.1 Fundamentos de los AOPs

Los procesos de oxidación avanzada (AOP) se definen como “aquellos procesos de oxidación que implican la generación de radicales hidroxilo en cantidad suficiente para interaccionar con los compuestos orgánicos del medio” (Domènech et al, 2001). Se trata de una familia de métodos que utilizan la elevada capacidad oxidante de los radicales OH° y que se diferencian entre sí en la forma en que los generan. Los más comunes utilizan combinaciones de ozono (O_3), peróxido de hidrógeno (H_2O_2), radiación ultravioleta y fotocatalisis. Una consecuencia de la elevada reactividad del agente oxidante es que los AOP se caracterizan también por su baja selectividad; en un proceso de producción puede ser una desventaja, sin embargo es una característica deseable en el caso de la eliminación de contaminantes de aguas residuales.

Una característica común a todos los procesos avanzados de oxidación es su capacidad para tratar efluentes con concentraciones menores a 5 g/L de demanda química de oxígeno. Para mayores concentraciones, el elevado consumo de agente oxidante y la mejora en el balance energético del proceso, hacen preferibles las técnicas de oxidación directa tales como la oxidación húmeda.

Los AOPs son adecuados como **pretratamiento** antes de un tratamiento biológico

para contaminantes resistentes a la biodegradación o como proceso de **postratamiento** para efectuar un pulido de las aguas antes de la descarga a los cuerpos receptores. ¿Cuál es la explicación de la eficiencia de estas técnicas? Los procesos involucrados poseen una mayor factibilidad termodinámica y una velocidad de oxidación importante por la participación de radicales, principalmente el radical hidroxilo, HO•. Esta especie posee propiedades adecuadas para atacar virtualmente a todos los compuestos orgánicos y reaccionar 10^6 - 10^{12} veces más rápido que oxidantes alternativos como el O₃. La Tabla 1 presenta los potenciales de oxidación de distintas especies, muestra que después del flúor, el HO• es la especie química con mayor potencial de oxidación (Domènech et al., 2001).

Tabla 1. Potenciales redox de algunos agentes oxidantes

Especie	E ⁰ (V, 25°C)
Flúor	3,03
Radical hidroxilo	2,80
Ozono	2,07
Peróxido de hidrógeno	1,78
Radical perhidroxilo	1,70
Permanganato	1,68
Dióxido de cloro	1,57
Ácido hipocloroso	1,49
Cloro	1,36
Bromo	1,09
Yodo	0,54

En la Tabla 2 se puede observar la gran diferencia en las constantes de velocidad de reacción de distintos compuestos con el radical hidroxilo y con el ozono. Es importante destacar que para ser eficientes, los AOPs deben generar altas concentraciones de radicales hidroxilo en estado estacionario, por lo tanto, lo más conveniente en oxidación de compuestos orgánicos es hacerlo a través del radical OH^o.

Tabla 2. Constantes de velocidad k (L/mol-s) del radical OH^o en comparación con el ozono para algunos compuestos orgánicos

Compuesto	OH ^o (L/mol's)	O3 (L/mol's)
Alquenos clorados	10^9 - 10^{11}	10^{-1} - 10^3
Fenoles	10^9 - 10^{10}	10^3
Aromáticos	10^8 - 10^{10}	1 - 10^2
Cetonas	10^9 - 10^{10}	1
Alcoholes	10^8 - 10^9	10^2 -1
Alcanos	10^6 - 10^9	10^2

2.2 Clasificación de los AOPs

Los AOPs se clasifican en homogéneos y heterogéneos, los primeros tienen como fase única el líquido y pueden ser con o sin aporte de energía externa; por su parte los heterogéneos presentan una fase sólida (el catalizador dentro de la fase líquida). La Tabla 3 presenta la clasificación de los AOP según Fernández-Alba et al. (2006).

Tabla 1. Proceso de oxidación avanzada (Adaptada de Fernández-Alba et al., 2006)

Procesos homogéneos:

a) Sin aporte externo de energía:

- Ozonización en medio alcalino (O_3/OH^-)
- Ozonización con peróxido de hidrógeno (O_3/H_2O_2) y ($O_3/H_2O_2/OH^-$)
- Peróxido de hidrógeno y catalizador (H_2O_2/Fe^{2+})

b) Con aporte externo de energía:

b1) Energía procedente de radiación ultravioleta (UV)

- Ozonización y radiación ultravioleta (O_3/UV)
- Peróxido de hidrógeno y radiación ultravioleta (H_2O_2/UV)
- Ozono, peróxido de hidrógeno y radiación ultravioleta ($O_3/H_2O_2/UV$)
- Foto-Fenton ($Fe^{2+}/H_2O_2/UV$)

b2) Energía procedente de ultrasonidos (US)

- Ozonización y ultrasonidos (O_3/US)
- Peróxido de hidrógeno y ultrasonidos (H_2O_2/US)

b3) Electroquímica

- Oxidación electroquímica
- Oxidación anódica
- Electro-Fenton

Proceso heterogéneos

- Ozonización catalítica ($O_3/Cat.$)
- Ozonización fotocatalítica ($O_3/TiO_2/UV$)
- Fotocatálisis heterogénea ($H_2O_2/TiO_2/UV$)

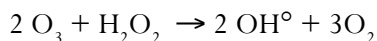
También se clasifica a los AOPs en procesos no fotoquímicos y fotoquímicos, los primeros no utilizan energía externa y los segundos si, esta clasificación se muestra en la Tabla 4.

Tabla 4. Procesos de oxidación avanzada no fotoquímicos y fotoquímicos

Procesos no fotoquímicos	Procesos fotoquímicos
Ozonización en medio alcalino (O_3/OH^-)	Oxidación en agua sub/y supercrítica
Ozonización con peróxido de hidrógeno (O_3/H_2O_2)	Procesos fotoquímicos
Procesos Fenton (Fe^{2+}/H_2O_2) y relacionados	Fotólisis del agua en el ultravioleta de vacío (UVV)
Oxidación electroquímica	UV/ H_2O_2
Radiólisis γ y tratamiento con haces de electrones	UV/ O_3
Plasma no térmico	Foto-Fenton y relacionadas
Descarga electrohidráulica - Ultrasonido	Fotocatálisis heterogénea

2.2.1 Ozonización con peróxido de hidrógeno (O_3/H_2O_2)

La adición de peróxido de hidrógeno combinado con el ozono provoca la iniciación de un ciclo de descomposición que resulta en la formación de un mol de radicales hidroxilo por cada mol de ozono que se descompone (Hoigné, 1982):



La ozonización con peróxido de hidrógeno, al igual que la ozonización alcalina, se basan principalmente en la degradación indirecta por radical OH° . Los resultados indican que el óptimo de operación en la degradación de la materia orgánica tiene lugar para una dosis de peróxido de hidrógeno de entre un tercio y la mitad en peso respecto al ozono y debe ser precisada mediante datos experimentales para cada aplicación en concreto.

Ventajas:

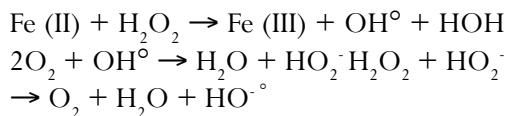
- Eficacia y velocidad de degradación elevadas
- Puede utilizarse para degradar la práctica totalidad de los compuestos
- Tecnología conocida y fácil de automatizar

Desventajas:

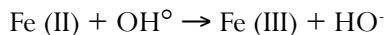
- A las del ozono alcalino se añade el costo del peróxido de hidrógeno

2.2.2 Peróxido de hidrógeno y catalizador ($\text{H}_2\text{O}_2/\text{Fe}^{2+}$)

La interacción entre el peróxido de hidrógeno y las sales de hierro se conoce desde el descubrimiento del reactivo de Fenton por Fenton en 1894. Se trata de un sistema catalítico homogéneo en el cual una sal de hierro, habitualmente FeSO_4 , genera radicales OH° gracias a la interacción del peróxido de hidrógeno con la forma reducida, Fe(II) . El mecanismo es el siguiente:



La interacción con la forma reducida del hierro genera en última instancia radicales hidroxilo, aunque éstos pueden intervenir también en la oxidación directa del hierro:



La regeneración de la forma reducida se produce normalmente mediante la intervención de un compuesto orgánico del medio:



La velocidad de generación de radicales está determinada por la reacción del Fe(II) con el peróxido de hidrógeno, por lo que la concentración de hierro limita la velocidad de oxidación. Típicamente, las relaciones $\text{Fe}:\text{H}_2\text{O}_2$ están en el intervalo de 1-10% ya que para cargas de catalizador menores, la velocidad de reacción es demasiado baja. Otra incidencia relacionada con el sistema Fenton es la posibilidad de que los productos de reacción (ácidos orgánicos) secuestren el hierro sacándolo del ciclo catalítico. El rango de aplicabilidad de la técnica está limitado también por el pH del medio. El pH óptimo se sitúa en el intervalo 3-6 y la pérdida de eficacia en medio básico se relaciona con la transición del hierro de la forma ferrosa hidratada a especies férricas coloidales, bajo las cuales el hierro descom-

pone el peróxido de hidrógeno en oxígeno y agua, pero sin promover la formación de radicales. Algunos desarrollos actuales investigan la posibilidad de extender el rango de pH; pero no existen aplicaciones comerciales para medio básico.

Ventajas:

- Método probado y con amplio desarrollo industrial
- Eficaz como pretratamiento

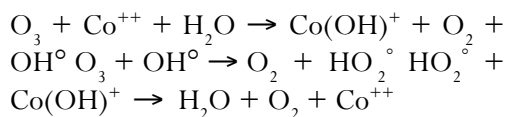
Desventajas:

- Utiliza un catalizador homogéneo
- Se generan lodos de hidróxido de hierro
- El pH del medio debe ser controlado en un intervalo estrecho
- Los ácidos orgánicos pueden secuestrar el hierro

2.2.3 Ozonización catalítica (O₃/Cat)

Este AOP O₃/Cat [donde Cat=CoO₂ y TiO₂] también llamada ozonización catalítica, es actualmente investigada para producir radicales OH° para la degradación de compuestos de baja biodegradabilidad presentes en aguas residuales industriales, tales como plaguicidas, colorantes y compuestos clorados entre otros; Barcelo y Petrovic (2008); Beltrán (2004); Rivas et al., (2003). En este sentido Rivas et al. (2003) han mostrado que la descomposición del ozono en presencia de CoO₂, sigue una cinética de pseudo primer orden con respecto al ozono. Estos autores han establecido también que la generación

de radicales OH°, a partir de la catalización del O₃ por CoO₂ se da en un medio ácido, este mecanismo puede representarse por las reacciones siguientes:



Sin embargo, este mecanismo puede ser inhibido en medios alcalinos; este fenómeno es atribuido a que el Co(OH)₂ a pH>8 es menos soluble, lo cual puede conducirnos a una precipitación de este último, trayendo consigo mismo una disminución del poder catalizador del Co(II).

Ventajas:

- Facilidad de separación de los productos
- Diseño de reactores bien conocido
- Mejora de la economía del ozono respecto de los sistemas homogéneos
- Nuevos materiales catalíticos en desarrollo

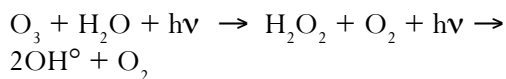
Desventajas:

- Baja solubilidad del ozono, que debe transferirse desde el gas
- Limitaciones a la transferencia de materia en un sistema trifásico

2.2.4 Proceso O₃/UV

Este AOP o fotólisis también ha sido objeto de estudio en los últimos años para la producción de radicales OH°, con el mismo objetivo que los

procesos antes presentados, es decir la oxidación de compuestos no biodegradables. Los primeros resultados publicados han sido alentadores para continuar las investigaciones al respecto. Coelho et al. (2007) y Byung Soo et al. (2005) especialistas de esta línea de investigación, han establecido la reacción siguiente para ilustrar la producción directa de radicales OH°. Sin embargo, es necesario indicar que durante esta reacción se forma, de manera intermediaria, un mol de H₂O₂ por cada mol de O₃ fotólizado a 253,7 nm en solución ácida.



Ventajas:

- Posibilidad de utilización de una fuente de energía limpia
- Se puede combinar con otros procedimientos de oxidación

Desventajas:

- Eficacia reducida si no se utilizan otros reactivos
- Limitaciones a la transferencia de materia

3 APLICACIONES DE LOS PROCESOS DE OXIDACIÓN AVANZADA

3.1 Oxidación de atrazina con O₃/OH° y O₃/H₂O₂

La Figura 1a muestra como la velocidad de degradación de la atrazina se incrementa conforme aumenta el pH. En efecto, podemos observar que a pH ácido, la reducción de la concentración

de atrazina no es mayor del 30% para un tiempo de 3 h. Sin embargo, cuando el pH de la solución se incrementa a 10, la velocidad de oxidación de la atrazina aumenta considerablemente, de tal manera que a la primera hora de oxidación, más del 90% ha sido reducida. Este incremento en la velocidad es atribuido a los radicales OH° generados a partir de la descomposición del ozono a pH básico.

Por otro lado, si al proceso de ozonización se le agrega H₂O₂ en relación 1:1, la velocidad de degradación de la atrazina se incrementa aún más para condiciones de pH ácido y neutro, como lo muestra la Figura 1b. Sin embargo, a pH básico, la velocidad de degradación no se incrementa con respecto al ensayo anterior, por el contrario, pareciera que el proceso de oxidación se desacelera. Esta inhibición del proceso, pudiera deberse a que en cierto momento la concentración de OH° es muy elevada, que se dan otras reacciones paralelas de consumo de ozono y de auto destrucción de radicales OH°. En general, podemos establecer que la degradación de atrazina es por radicales OH° y que puede lograrse con sólo O₃/pH↑ básico, o bien a pH neutro utilizando O₃/H₂O₂ (López-López, 2004).

3.2 Ozonización de colorantes azoicos a diferentes condiciones

La oxidación de colorantes azoicos fue realizada bajo tres diferentes condiciones: i) bajo condiciones de oxidación molecular, O₃, a pH=5 más t-butanol (t-OH) para secuestrar los posi-

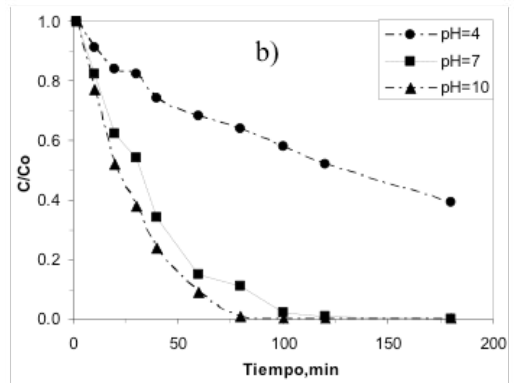
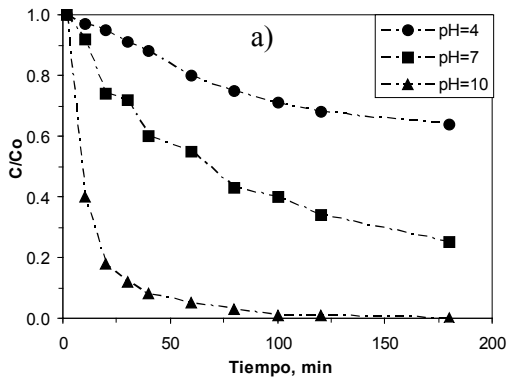


Figura 1. Oxidación de la atrazina a diferentes pH a) con sólo O₃ y b) O₃/H₂O₂

bles radicales que pudieran formarse; ii) bajo condiciones radicales, O₃/H₂O₂ a pH=9; iii) oxidación con O₃ a pH=5 sin t-OH. La Figura 2a muestra que las mejores condiciones para la decoloración de soluciones se da cuando la oxidación se lleva bajo condiciones moleculares, sin embargo bajo estas condiciones no hay reducción significativa del COT, (Figura 2b), es decir la acción molecular del ozono causa simplemente una oxidación parcial del

colorante (ruptura de la doble ligadura N=N causante del color). Por otro lado, se obtiene una buena decoloración bajo condiciones radicales, teniendo además una reducción considerable del COT de aproximadamente 50%, esta reducción es causada por la acción de los OH[•], los cuales atacan simultáneamente y sin preferencia la doble ligadura N=N, así como los subproductos (P) ligados a este doble enlace (López-López et al., 2004; 2007).

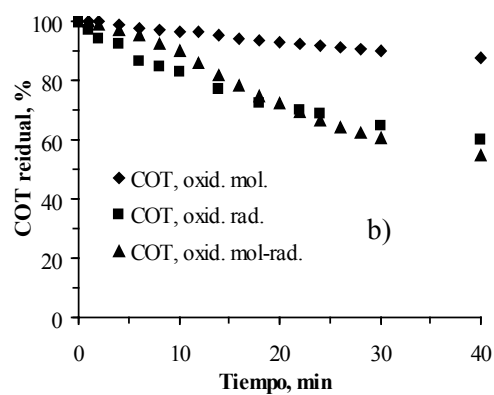
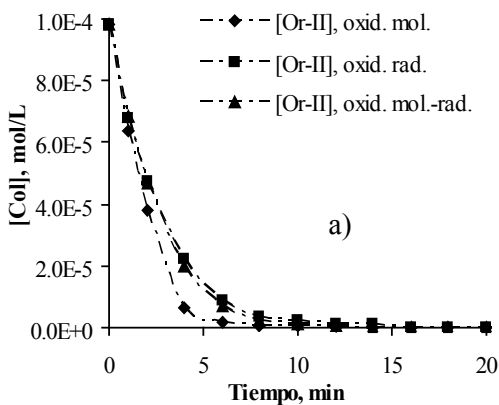


Figura 2. Oxidación de colorante bajo diferentes condiciones: a) Perfiles de oxidación, b) reducción de COT

3.3 Oxidación del Dietil Ftalato por O_3/UV

Byung Soo et al. (2005) utilizaron el AOP O_3/UV a nivel laboratorio para tratar agua proveniente del río Han en Korea de sur, el cual sirve como fuente de abastecimiento de agua potable. Los principales compuestos orgánicos encontrados y que fueron objeto de estudio fue Dietil Ftalato (DEP) y el di-(2-etilhexil) Ftalato (DEHP). La Figura 3 muestra los resultados de la degradación del DEP a $pH=7$, se observa que cuando se aplica sólo la radiación UV se obtiene una degradación del 22% del DEP; cuando se aplica O_3 , la velocidad incrementa considerablemente, más aún cuando se aplica O_3/UV , pues se logra una oxidación total del DEP a 30 min. La buena degradación del DEP obtenida con el sistema O_3/UV en este estudio, es atribuida a la oxidación causada por los radicales OH^\bullet generados por la descomposición del ozono en presencia de UV, mismo fenómeno que se genera cuando se utiliza O_3 un $pH=7$. Resultados similares son obtenidos durante la degradación del DEHP.

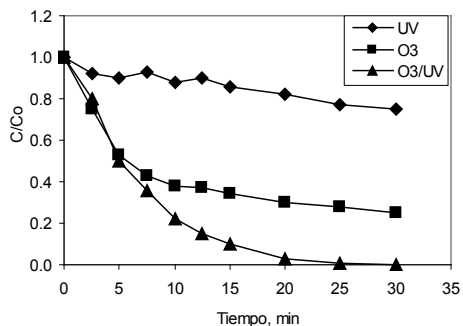


Figura 3. Remoción de DEP por los procesos UV, O_3 y O_3/UV , $[DEP]_0=100\mu M$

4. EVALUACIÓN DE COSTOS

La evaluación de costos en procesos de oxidación avanzada es básicamente una función de la calidad del agua y de las características de los compuestos orgánicos a remover. Otros factores que deben considerarse para la implementación de AOPs son los costos de inversión y operación, así como las eficiencias de remoción que se propongan para el proceso y si el modo de operación del proceso, si es continuo o por lotes. La Figura 4 muestra un ejemplo de los costos de tratamiento de un agua residual industrial aplicando AOPs- O_3 , O_3/H_2O_2 .

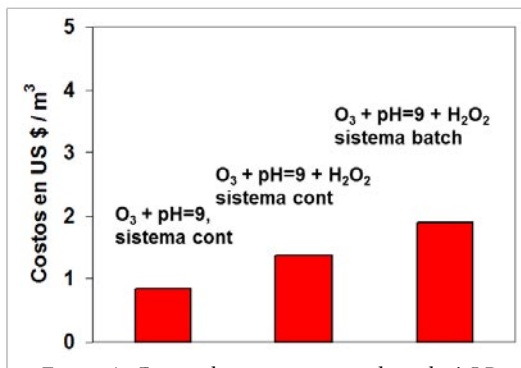


Figura 4. Costos de tratamiento utilizando AOPs (O_3 , O_3/H_2O_2)

4. CONCLUSIONES

Los procesos de oxidación avanzada se presentan como una alternativa para tratar las aguas residuales industriales con materia orgánica recalcitrante. Existe una variedad de procesos avanzados los cuales deben ser evaluados a nivel laboratorio o piloto para obtener los parámetros óptimos de operación

y de diseño con el objetivo de ser implementados a gran escala.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Barceló D., Petrovic M. (2008). *Emerging Contaminants from Industrial and Municipal Waste: Removal Technologies*, Ed. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Berlin.

Beltrán F.J. (2004), *Ozone Reaction Kinetics for Water and Wastewater System*, Ed. CRC PRESS, Unit Kingdom.

Benotti M.J., Trenholm R.A., Vanderford B.J., Holady J.C., Stanford B.D. and Snyder S-A (2009), *Pharmaceuticals and Endocrine Disrupting Compounds in U.S. Drinking Water*, *Environ. Sci. Technol.*, 43(3): 597-603.

Byung Soo O, Yeon Jung J, Young Jin O, Young Sook Y, Joon-Wun K (2006), *Application of ozone, UV and ozone/UV processes to reduce diethyl phthalate and its estrogenic activity*, *Science of The Total Environ*, 367, 2-3:681-693

Coelho A, Méndez-Arriaga F, Sans C, Dezotti M, Esplugas S and Giménez J. (2007), *Comparison of Emerging NSAID Pollutants Degradation in Aqueous Media by O₃, UV-VIS and O₃/UV-VIS Processes*. In *proceedings: World Congress on Ozone and Ultraviolet Technologies*, Los Angeles California USA, pp 1540-1552.

Domènech X., Jardim W.F, Litter M.I. (2001). *Procesos avanzados de oxidación para la eliminación de contaminantes in Eliminación de contaminantes por fotocatalisis heterogénea*, Programa Iberoamericano de Ciencia y Tec-

nología para el desarrollo, CYTED, Editor Blesa M. A. La Plata , Argentina.

Fernández-Alba A., Letón García P., Rosal García R., Dorado Valiño M., Villar Fernández S., Sanz García J.M. (2006). *Informe de vigilancia tecnológica: Tratamientos avanzados de aguas residuales industriales*. CEIM Dirección General de Universidades e Investigación, Universidad de Alcalá, España.

Glaze, W.; Chapin, D. (1987). *The chemistry of water treatment processes involving ozone, hydrogen peroxide and ultraviolet radiation*, *Ozone Sci. & Eng.*, 9 (4), 335-352.

Hoigné J. and Bader H. (1976). *The role of hydroxyl radical reaction in ozonation process in aqueous solution*. *Water Research*, 10, 377-386.

Kim S.D., Cho J., Kim I.S., Vanderford B.J. and Snyder S.A. (2007), *Occurrence and removal of pharmaceuticals and endocrine disruptors in South Korean surface, drinking, and waste waters*, *Water Res*, 41 (5):1013-1021

López-López A., Benbelkacem H., Pic J.-S. and Debellefontaine H. (2004), *Oxidation pathways for ozonation of azo dyes in a semi-batch reactor: a kinetic parameters approach*, *Environmental Technology*, 25, (3), pp. 311-321.

López-López A, Pic J-S, and Debellefontaine H, (2007), *Ozonation of azo dye in a semi-batch reactor: A determination of the molecular and radical contributions*, *Chemosphere*, 66: 2120-2126.

Rivas F.J., Beltran F.J., Carbajo M., Gimeno O.

(2003), Homogeneous Catalyzed Ozone Decomposition in the Presence of Co (II), *Ozone Science & Engineering*, 25, 261-271.

Romero V, González O., Bayarri B., Marco P., Giménez J., Esplugas S. (2014) Performance of different advanced oxidation technologies for the abatement of the beta-blocker metoprolol V. *Catalysis Today* accepted: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cattod.2014.03.060>

United States Environmental Protection Agency (USEPA) (2003). Special Report on Environmental Endocrine Disruption: An Effects Assessment and Analysis, Report No. EPA/630/R-96/012, Washington D.C.

World Health Organization, WHO (2012). State of the Science of Endocrine Disrupting Chemicals Edited by Bergman Å, Heindel J.J., Jobling S., Kidd K.-A. and Zoeller R.-T.

REQUISITOS Y RETOS DE LOS INGENIEROS QUÍMICOS PARA INGRESAR A LA INDUSTRIA DE LA REFINACIÓN EN MÉXICO

Carlos Gustavo Sánchez Lugo

Asesor Independiente
carloslugo022@gmail.com

Introducción

La Industria de la refinación demanda a los profesionistas que deseen participar en ella conocimientos profundos de todas las áreas de la carrera de ingeniería química. Los fundamentos de la carrera como son las leyes de conservación de la materia y de la energía, las operaciones unitarias y la cinética química, son conocimientos que se aplican rutinariamente en la vida diaria del proceso de refinación del petróleo. Sin embargo un ingeniero químico laborando en esta industria debe complementar su experiencia con conocimientos de otras áreas como son la ecología, sistemas de calidad, seguridad industrial, mantenimiento mecánico, generación de vapor y electricidad y manejo de personal.

Al ir escalando puestos hacia el liderazgo administrativo, requerirá de fundamentos de administración y finanzas. La globalización ha obligado a los ingenieros químicos de la refinación a profundizar en el área de la Economía de la Refinación a través del conocimiento de los mercados del petróleo y petrolíferos, precios de transferencia, costo de oportunidad, exportaciones e importaciones, inversiones en proyectos nuevos de refinerías y centros petroquímicos, análisis de nuevas tecnologías así como proyecciones de demandas de gasolinas y gas a través de simuladores de procesos y optimizadores económicos. Es un camino arduo y un gran reto para los nuevos ingenieros químicos el desarrollar todos esos conocimientos y

poder influir en la expansión de la refinación en México.

Economía de la Refinación

La mejor metodología para entender el proceso de la refinación es por medio de la Economía de la Refinación a través de la cual se proyectan los fundamentos físicos y químicos teóricos de la refinación del petróleo hacia el análisis económico de la eficiencia de refinerías existentes, análisis de rendimientos de diferentes tipos de petróleos, distribución de petrolíferos a diferentes puntos de venta, desarrollo de proyectos nuevos, benchmarking de diferentes instalaciones utilizando precios de transferencia y costos de oportunidad entre los diferentes mercados internacionales de petrolíferos.

El campo de la Economía de la Refinación se ha ido desarrollando por las mismas compañías petroleras a lo largo del siglo XX mediante innumerables observaciones de la interacción entre demanda, producción y capacidad instalada de refinación. La Economía de la Refinación ha logrado estandarizar conceptos y reglas, utilizando diferentes tecnologías de estadística, simulación de procesos, optimización de procesos y finanzas, que logran plasmar en herramientas computacionales el comportamiento de las variables de proceso de las plantas químicas de una refinería así como su interrelación con las variables económicas y de mercado. Tal es el caso del optimizador de procesos: Process

Industry Modeling System (PIMS) desarrollado en Estados Unidos por la compañía Aspen Technology (EU) que es el más utilizado en el mundo por las compañías petroleras en las áreas de refinación y petroquímica.

Así mismo para el manejo detallado de las variables de proceso de cada planta de proceso de una refinería se utilizan los Simuladores de Proceso en los que se pueden representar matemáticamente tanto los procesos de separación como los de reacción química. Los más empleados en la industria de refinación y petroquímica son los siguientes. Simuladores de procesos en estado estable: PRO II de la Cía. Simulation Sciences (EU), Chemcad de la Cía. Chemstations (EU) y Aspen PLUS de Aspen Technology (EU); Simulador de procesos dinámico: Speedup de la Cía. Aspen Technology (EU); Simulador para ambos estados, estable y dinámico: HYSYS de la Cía. Hyprotech (Canadá).

La Economía de la Refinación merece un espacio en las Universidades de México y debería dictarse cátedra sobre este tema para los estudiantes que busquen desarrollarse en el campo de la refinación o petroquímica. El tema puede abarcar de 2 a 3 semestres en las carreras normales de ingenieros químicos. Ya que la mayoría de las compañías petroleras en el mundo, incluyendo Pemex, utilizan para la gestión de sus refinerías y petroquímicas los conceptos de la Economía de la Refinación, es de esperarse que los estudiantes de Ingeni-

ería Química que lleven estos conocimientos tengan un desarrollo óptimo cuando se incorporen a trabajos relacionados con la refinación del petróleo.

El Futuro de la Refinación en México y Mercado Laboral para los Ingenieros Químicos.

Las estadísticas muestran que en México egresaron 7,382 Ingenieros Químicos de las Universidades públicas y privadas durante 2013. También muestran que en el año 2013 había 122,513 Ingenieros como población económicamente activa de los cuales 38,592 (31.5%) laboraban en la industria manufacturera. Del total mencionado 33,814 (27.6%) ingenieros laboran en el sector público y 88,699 (72.4%) laboran en el sector privado. También del total 104,749 (85.5%) ingenieros son empleados y 11,394 (9.3%) trabajan por cuenta propia.

El crecimiento de la refinación en México hasta el presente (Septiembre del 2014) ha sido limitado por la falta de inversión en nuevas refinерías. La última refinерía que se construyó en México data de 1979 que fue la de Salina Cruz, Oaxaca. Por lo tanto, la refinación en México no ha representado para los Ingenieros Químicos recién egresados un mercado laboral atractivo. Actualmente en las seis refinерías de México laboran aproximadamente 8,098 ingenieros químicos de los cuales se van sustituyendo conforme terminan su periodo laboral a los 60 años

de edad y a los 30 años de antigüedad. La implantación de los programas de incremento de productividad y eficiencia operativa obligará a que esta plantilla tienda a disminuir con el tiempo.

El mercado laboral en refinación para los 7,382 egresados cada año de Ingeniería Química a partir del 2014 en adelante va a crecer en interés una vez que la reforma energética haya iniciado su implantación. Es de esperarse que ahora si se den las inversiones necesarias para la construcción de las refinерías necesarias para producir los petrolíferos necesarios que la economía mexicana demandará para lograr la suficiencia energética. Dichas inversiones solo se darán en un marco de expansión industrial con crecimientos del Producto Interno Bruto (PIB) muy superiores al promedio de 2% de las últimas décadas.

Las crecientes importaciones de gasolina indican que el país ya requiere de al menos 3 refinерías adicionales de 200 mil barriles por día (MBD) para satisfacer la demanda de gasolina. Con una expansión acelerada entre 2015 y 2030 a un crecimiento promedio de 8.1% del PIB se muestra que el país requeriría al menos 11 refinерías adicionales de 200 MBD, para tener al final del 2030 la cantidad de 20 refinерías y una capacidad de refinación de 4.45 millones de barriles diarios (Fig. 1). Si comparamos estos resultados con los Estados Unidos que tienen 149 refinерías

con una capacidad de proceso de crudo de 19.2 millones de barriles por día todavía nos encontraríamos lejanos a la magnitud de refinación de un país desarrollado.

Se efectúa un benchmarking entre 7 países y México para comparar los tamaños de la economía, las capacidades de refinación y los consumos de energía, teniendo como referente principal a los Estados Unidos y como ejemplo de desarrollo industrial acelerado a las economías de China, La India y Korea del Sur cuya expansión industrial en los últimos lustros ha demostrado que si es posible crecer a tasas de más del 12% del PIB anual. En este análisis se vuelve evidente que es el crecimiento de la industria de la transformación el que impulsa el desarrollo de un país y es el que marca la pauta y la demanda de la energía y por lo tanto de las necesidades de petrolíferos y de la capacidad de refinación. El mercado de petrolíferos se expande de acuerdo al crecimiento de la industria y no al revés como se plantea en muchos países de América Latina, que esperan que la liberación del mercado energético traiga consigo el desarrollo económico de sus países. Especialmente Brasil y México están apostando por este camino, lo cual deben de reconsiderar.

El desarrollo del mercado interno, la sustitución de importaciones, incrementar la inversión en Investigación y Desarrollo Tecnológico, vincular a la industria con las

Universidades e Institutos Tecnológicos, desarrollar la industria pesada y del acero, establecer un estado de derecho pleno y fortalecido, lograr la suficiencia alimentaria, implantar regulaciones estrictas por parte de las instituciones del gobierno y promover la inversión de los empresarios nacionales, han sido parte de la estrategia que China, la India y Korea del Sur han aplicado en sus países lo que les ha permitido la expansión industrial, aumentar los empleos bien remunerados e incorporar a la economía a gran parte de la población marginada. En este camino del progreso, los Ingenieros Químicos tienen un reto monumental y juegan un papel preponderante ya que son los que dirigen la transformación industrial de las materias primas en las diferentes fábricas y empresas de un país. México tiene ahora la oportunidad de iniciar por fin su revolución industrial que se ha ido postergando desde el siglo pasado. Y es al mismo tiempo el momento de los Ingenieros Químicos de tomar las riendas de la industrialización del país.

Conclusiones.

Los requisitos para incorporarse a la industria de la refinación que se les demanda a los ingenieros químicos egresados de las universidades se pueden resumir en dos aspectos: técnicos y administrativos-financieros. Los requisitos técnicos son los comunes a la carrera como son las leyes de conservación de materia y energía, matemáticas avanzadas, operaciones unitarias y cinética química. Los

requisitos administrativos-financieros son los conocimientos básicos de la economía de la refinación referentes a la gestión de la operación de la industria de la refinación y petroquímica, incluyendo distribución y ventas de petrolíferos a través de optimizadores y simuladores de procesos.

Los retos de los ingenieros químicos en México son enormes, ya que se requiere su incorporación e influencia en las empresas públicas y privadas para detonar la expansión industrial que el país necesita, que a su vez impulsará la creación de más empleos bien remunerados, incrementará la demanda de bienes y servicios, incrementará la demanda de energía eléctrica y de petrolíferos, para lo cual se deberán construir nuevas refinerías. Este círculo virtuoso solo podrá lograrse con el trabajo armonioso entre gobierno y empresarios nacionales, Institutos Tecnológicos y Universidades y primordialmente a la gestión de los Ingenieros Químicos.

Referencias

Reportes técnicos

1. Base de Datos de World Bank. <http://data-bank.worldbank.org/data/views/variableSelection/selectvariables.aspx?source=world-development-indicators#>

2. Memória de Labores de Pemex años 1960 a 2013. http://www.pemex.com/acerca/informes_publicaciones/Paginas/memorias_labores.aspx#.VAeUlh_15PTh

3. Anuário Estadístico de Pemex años 1960 a 2013. <http://www.ri.pemex.com/index.cfm?action=content§ionID=134&catID=12202>

4. Refinerías de China. <http://www.infopoint4u.com/Countries/China/oil.htm>

5. List of_Oil_Refineries. http://en.wikipedia.org/wiki/List_of_oil_refineries#Brazil

6. The 10 biggest oil refining countries. <http://www.hydrocarbons-technology.com/features/featurethe-10-biggest-oil-refining-countries/>

7. China – Analysis – U.S. Energy Information Administration. <http://www.eia.gov/countries/cab.cfm?fips=ch>

8. Prospectivas de Petrolíferos 2012 – 2026. Secretaría de Energía. http://sener.gob.mx/res/PE_y_DT/pub/2012/PP_2012_2026.pdf

9. Proyecciones de la Población 2010 – 2050. Secretaría de Gobernación. <http://www.conapo.gob.mx/es/CONAPO/Proyecciones>

10. Estado del Arte y Prospectiva de la Ingeniería en México y el Mundo. Academia de la Ingeniería de México con Patrocinio del CONACYT. 2012.

11. Observatorio Laboral. Comportamiento de las profesiones y ocupaciones en México.

<http://www.observatoriolaboral.gob.mx/swb/es/ola/home>

Libros

1. Petroleum Refining: Technology and Eco-

nomics, Fifth Edition by James H. Gary (Author), Glenn E. Handwerk (Author), Mark J. Kaiser (Author). CRC Press, 2007.

2. Petroleum Refinery Process Economics – by Robert E. Maples (Author), 2000.

Manuales

1. Aspen PIMS Manual. How to build refinery Linear Programming (LP) planning

models in PIMS to generate optimum plans including evaluating alternative crudes, intermediate feedstocks, outside blendstocks, process unites, products, and markets.

Presentaciones

1. Economía de la Refinación by M.Sc. Carlos Gustavo Sánchez Lugo, 2002.

2. Oil Refinery – Processes by Sahyog Shishodia, Dalhousie University, 2003.

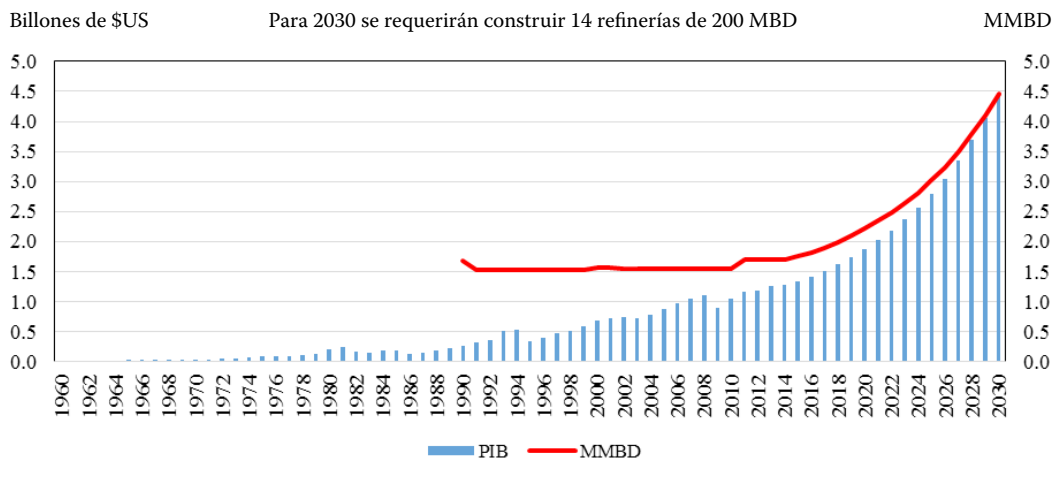


Figura 1. Incremento de la Capacidad de Refinación con el Incremento del PIB entre 2014 y 2030

DESARROLLO DE NUEVOS SISTEMAS π -CONJUGADOS CON GRUPOS FOTOACTIVOS: SÍNTESIS Y PROPIEDADES ÓPTICAS

Ernesto Rivera García

Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México.

riverage@unam.mx

Introducción

La transferencia de energía es un proceso de desactivación no radiativo de la fluorescencia, que básicamente consiste en la transferencia de energía fotoinducida de una molécula excitada (donadora) a una molécula en el estado basal (aceptora). La transferencia de energía puede proceder por dos mecanismos: Dexter y Förster. En el primero debe existir una interacción electrónica fuerte entre la molécula donadora y la molécula aceptora, es por esto que también se le conoce como interacción a través del enlace y tiene una dependencia muy fuerte con la distancia, por lo que generalmente sucede cuando las moléculas se encuentran a una distancia no

mayor de 10\AA . En el mecanismo de Förster, también conocido como mecanismo a través del dipolo, es necesario que exista una superposición adecuada del espectro de emisión del donador y el espectro de absorción del aceptador. La transferencia de energía (Figura 1) por el mecanismo de Förster ocurre a distancias donador-aceptador entre 10 y 100\AA .¹⁻²

[Figura 1]

La velocidad de transferencia de energía se puede calcular mediante la siguiente ecuación:

$$k_{\text{ET}} = k_{\text{D}} \left[\frac{R_0}{R} \right]^6 = \frac{1}{\tau_{\text{D}}^0} \left[\frac{R_0}{R} \right]^6$$

Donde K_{ET} es la constante de velocidad, K_D constante del donador, R_0 es el Radio de Förster de la molécula, R la distancia entre los grupos donador y aceptor y τ_D el tiempo de vida media en el estado excitado del grupo donador. Por otro lado, el Radio de Förster se puede calcular mediante la siguiente expresión:

$$R_0 = [2.8 \times 10^{17} \kappa^2 Q_D \epsilon_A J(\lambda)]^{1/6}$$

Donde Q_D es el rendimiento cuántico del donador, ϵ_A es el coeficiente de extinción del aceptor y $J(\lambda)$ es el área de traslape entre el espectro de emisión del donador y el espectro de absorción del aceptor.

Dado que en nuestro caso usamos como grupo donador el pireno y como grupo aceptor la porfirina, el traslape espectral está garantizado. En la Figura 2, se puede apreciar que el espectro de emisión del pireno y el espectro de absorción de la porfirina se sobrepone por lo que se puede dar el fenómeno de transferencia de energía.

[Figura 2]

Metodología

La metodología experimental para la síntesis de los compuestos dendríticos que contienen unidades de pireno y porfirina, así como el estudio de sus propiedades ópticas se describen en las referencias 3-5.

Resultados

En un trabajo anterior llevamos a cabo la síntesis de sistemas dendríticos con los pares donador-aceptor pireno-fulereno³ y pireno-porfirina.⁴⁻⁵ En la Figura 3 mostramos las estructuras de la primera serie de porfirinas dendronizadas sintetizadas por nuestro grupo donde incorporamos dendrones tipo Fréchet de primera y segunda generación a un núcleo de porfirina vía un espaciador flexible de butirato.⁴

[Figura 3]

Al realizar los estudios de propiedades ópticas y fotofísicas, encontramos que en estos sistemas la transferencia de energía (FRET) ocurría más rápidamente que la formación de excímeros intramoleculares pireno-pireno con una eficiencia cercana al 100%. En el espectro de fluorescencia de estos sistemas aparte de las bandas características debidas a los cromóforos pireno y porfirina se observó una banda de emisión adicional de la porfirina a 661 nm debido a su desactivación vía fluorescencia después del proceso FRET.⁴ Se observó que la velocidad y la eficiencia en la transferencia de energía disminuyen con el aumento en la generación del dendrón, por lo que se preparó una nueva serie de porfirinas dendronizadas con dendrones tipo Fréchet de primera generación con grupos pireno y un núcleo de porfirina. La estructura de estos compuestos se muestra en la Figura 4.⁵

[Figura 4]

Se encontró que en estos compuestos dendríticos la transferencia de energía tiene lugar exclusivamente de los grupos pireno periféricos hacia el núcleo de porfirina. Además, el número de pirenos presentes en la molécula no afectó el proceso de transferencia de energía FRET. No obstante, la eficiencia FRET puede modularse ajustando el número de enlaces o la distancia entre los grupos donador (pireno) y aceptor (porfirina). Este fenómeno fue más evidente en la segunda serie de porfirinas dendronizadas, Por-(Py2G1) x, donde había una distancia más corta de 18.2 Å, entre los grupos pireno y porfirina. En la primera serie de porfirinas dendronizadas (Figura 3) donde se usó un espaciador de butanoato con 4 carbonos había una distancia de 30.2 Å entre el pireno y la porfirina para el compuesto de primera generación, y una distancia de 34.9 Å para el de segunda. El efecto más importante observado en la metalación de las porfirinas con Zn fue una disminución drástica en el tiempo de vida media de 11.9 a 2.1 ns.⁵

Por otro lado, sintetizamos y caracterizamos una nueva serie de sistemas que contienen los grupos pireno-fulereno C₆₀A (PyFC₁₂, PyFPy, Py₂FC₁₂ and PyFN).³ La síntesis y las estructuras de estos compuestos se muestran en la Figura 5. Las propiedades ópticas de estos compuestos se estudiaron mediante espectroscopia de absorción y fluorescencia. Los sistemas se diseñaron de esta manera

debido a que las unidades de pireno actúan como moléculas captadoras de luz y son capaces de dar emisión de “monómero” (PyFC₁₂) o emisión de excímero (PyFPy, Py₂FC₁₂ and PyFN). Los espectros de fluorescencia de estos compuestos mostraron un decremento significativo de las emisiones de monómero y excímero de los grupos pireno, sin la aparición de una nueva banda adicional por parte del fullereno C₆₀. El apagamiento “quenching” de la fluorescencia del pireno fue prácticamente cuantitativo, en el rango de 96-99% dependiendo de la arquitectura de la molécula, lo cual es un indicio de que ocurre una transferencia de energía de las especies pireno excitadas al fullereno C₆₀.³

[Figura 5]

Conclusiones

Se sintetizaron y caracterizaron 3 nuevas series de moléculas dendríticas para transferencia de energía, dos con el par donador-aceptor pireno-porfirina y una con el par pireno-fulereno. En el caso de los compuestos dendríticos con el par pireno-porfirina se obtuvieron eficiencias de transferencia de energía cercanas al 100% y se observó una emisión final del grupo porfirina a 661 nm. En el caso de los compuestos dendríticos con el par pireno-fulereno especialmente Py2FC12 and PyFPy se observó un apagamiento total de la fluorescencia con una eficiencia de transferencia de energía entre el 96-99%

Referencias

- 1.- Joseph R. Lakowicz, *Principles of Fluorescence Spectroscopy*, Kluwer Academic, Second Edition
- 2.- A. Adronov and J. M. J. Fréchet, *Chem. Commun.*, 2000, 1701–1710
- 3.- G. Zaragoza-Galán, J. Ortiz-Palacios, B. X. Valderrama, A. A. Camacho-Dávila, D. Chávez-Flores, V.H. Ramos-Sánchez, E. Rivera. *Molecules* 2014, 19, 352-366.
- 4.- G. Zaragoza-Galán, M. Fowler, J. Duhamel, R. Rein, N. Solladié, E. Rivera. *Langmuir* 2012, 28, 11195-11205.
- 5.- G. Zaragoza-Galán, M. Fowler, R. Rein, N. Solladié, J. Duhamel, E. Rivera. *J. Phys. Chem. C* 2014, 118(16), 8280-8294.

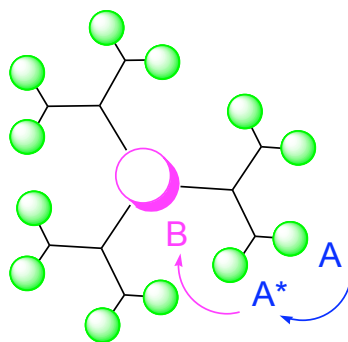
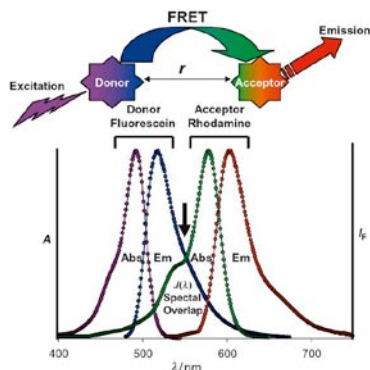


Figura 1. Transferencia de energía entre una molécula donadora (fluoresceína) y una aceptora (rhodamina)

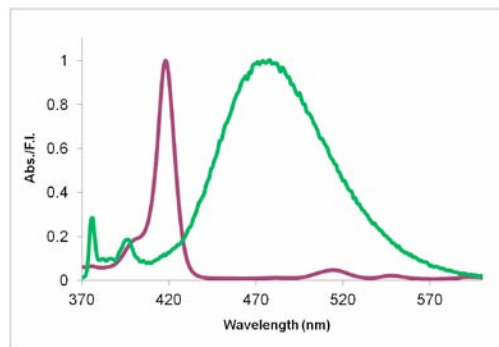


Figura 2. Traslape espectral entre el espectro de emisión del pireno (verde) y el espectro de absorción de la porfirina (violeta).

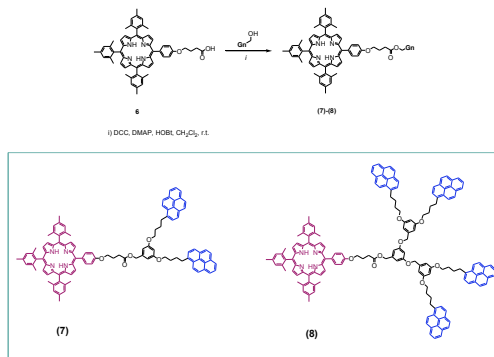


Figura 3. Porphirinas dendronizadas de primera (Py₂-TMEG1) y segunda generación (Py₄-TMEG2)

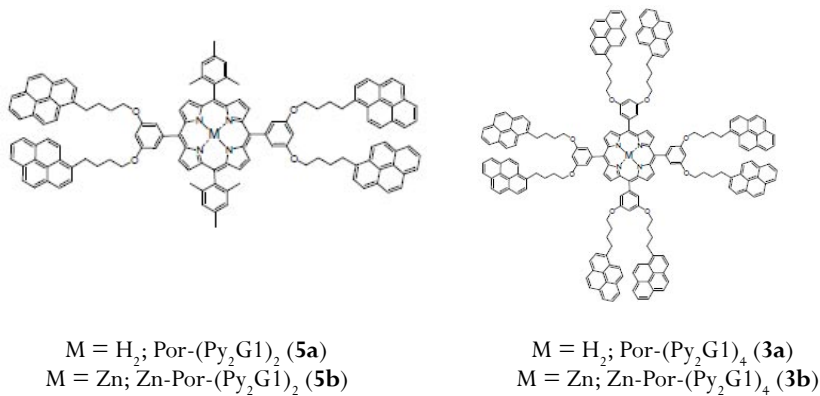


Figura 4. Compuestos dendríticos con un núcleo de porfirina central y grupos pireno en la periferia.

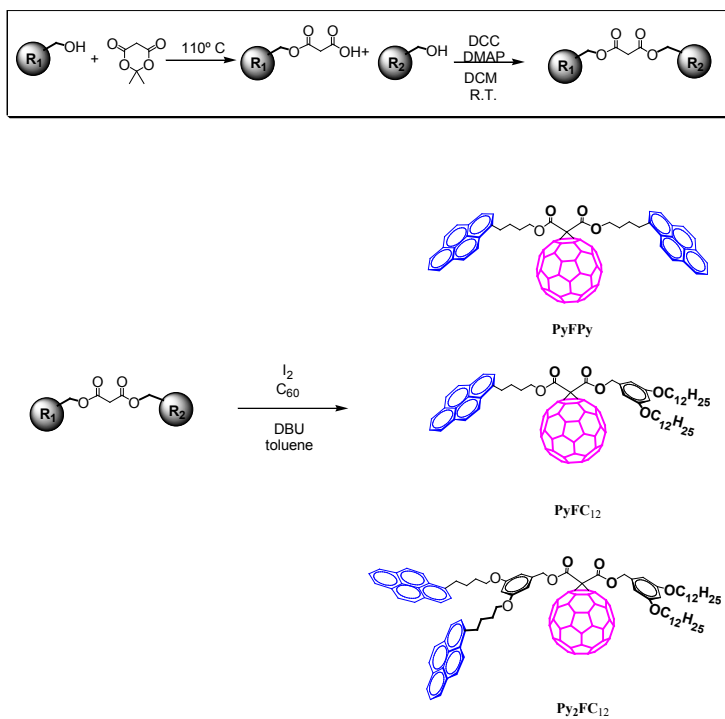


Figura 5. Compuestos dendríticos que contienen el par donador-aceptor pireno-fulereno.

NANOPARTÍCULAS Y COLOIDES AMBIENTALES DE ÓXIDOS DE Fe Y Mn: SU IMPORTANCIA EN LA RETENCIÓN Y TRANSFORMACIÓN DE CONTAMINANTES

Mario Villalobos Peñalosa

Departamento de Geoquímica, Instituto de Geología, UNAM

mariov@geologia.unam.mx

Introducción

La Geoquímica Ambiental es una disciplina que investiga el comportamiento de los contaminantes en el ambiente, para determinar su movilidad, transporte y destino, y en última instancia proponer métodos de control o de remediación. Dentro de esta disciplina, la investigación a escala microscópica y molecular es fundamental pues los fenómenos que ocurren en las superficies de las partículas minerales ambientales más pequeñas (coloides y nanopartículas) determinan en gran medida el comportamiento macroscópico, y en escala de campo de las especies contaminantes que se encuentran en concentraciones traza. En las interfaces entre las superficies minerales y la solución acuosa se ubican la mayoría

de las reacciones químicas que controlan la composición del ambiente, incluyendo la composición de aguas naturales.

El área de Geoquímica Ambiental Molecular tiene poco desarrollo en México y no corresponde a las áreas tradicionales de Geoquímica Ambiental puesto que su escala no es de campo, sino microscópica. Es un área de carácter bastante teórico en la que se investigan las interacciones fundamentales entre contaminantes y los componentes reactivos del ambiente, aplicables a cualquier sistema natural, independientemente de su ubicación geográfica.

Dentro de los conceptos elementales que se manejan en esta área se encuentra la relación

logarítmica lineal inversa entre el tamaño de una partícula y su área superficial específica (ASE= área por unidad de masa o volumen). La ecuación tiene un origen geométrico y físico y es válida para partículas de la misma forma geométrica (y densidad):

$$\text{Log ASE [m}^2/\text{g]} = \text{Log } k/\delta - \text{Log } r$$

donde k es una constante adimensional relacionada con la forma geométrica (equivalente a 3 para muchas formas muy simétricas como una esfera o un cubo), δ es la densidad del sólido en g/m^3 y r es una medida de tamaño, como el radio en m .

En esta presentación se ofrecerán algunos ejemplos de las investigaciones que se llevan a cabo en el Grupo de Bio-Geoquímica Ambiental del Instituto de Geología de la UNAM. Éstas corresponden a un enfoque llamado de “bottom-up”, en el que se considera que el estudio fundamental de los procesos microscópicos permite escalar hacia arriba y predecir los fenómenos macroscópicos y en escalas de campo. La información fundamental que se adquiere además permite diseñar métodos óptimos de control o de remediación de sistemas contaminados.

Ejemplo (1): Unificación termodinámica del comportamiento superficial de oxihidróxidos de Fe(III). (1,2).

Se trabaja con el comportamiento de adsorción del mineral goetita (α -FeOOH), que es uno

de los óxidos más estables y abundantes en el ambiente; y del nanomineral ferrihidrita [$\text{Fe}_5\text{O}_3(\text{OH})_9$], que es el mineral de Fe(III) que precipita primero durante la formación de estos óxidos. La goetita muestra una reactividad superficial que depende del tamaño de sus partículas cuando los datos de adsorción se normalizan por área, pero lo hace de una forma anómala puesto que las de mayor tamaño son más reactivas que las de menor tamaño, siendo el valor de corte en el que comienza esta mayor reactividad en áreas superficiales específicas (ASEs) de alrededor de $80 \text{ m}^2/\text{g}$. Aquellas de menores tamaños ($\text{ASE} > 80 \text{ m}^2/\text{g}$) se comportan idealmente y los datos de adsorción por área son “congruentes”, es decir se enciman, independientemente del tamaño específico de la partícula. En cambio las de mayor tamaño son progresivamente más reactivas, y esto no es un artefacto de la medición de área. Esto crea un problema termodinámico importante porque para describir las reacciones de adsorción de éstas últimas goetitas, es necesario emplear constantes de afinidad que varían considerablemente. Por ejemplo, para la adsorción del oxianión arseniato, As(V), que presenta una afinidad muy alta por óxidos de Fe(III), las constantes varían hasta en cuatro órdenes de magnitud. Se presentará un modelo unificado en el cual se explica dicho aumento de reactividad a través de la presencia de una mayor contribución de caras cristalinas más reactivas [$\{010\}$ y $\{210\}$] en las goetitas no-ideales en comparación con las ideales. Dichas caras poseen densidades de sitios reactivos

(sitios/nm²) considerablemente mayores que las caras de las goetitas ideales. Se demostrará el éxito de este modelo presentando series de datos de adsorción de As(V) sobre goetitas, utilizando constantes de afinidad muy similares, con variaciones de menos de una orden de magnitud. Asimismo, el comportamiento de la ferrihidrita se pudo describir considerando una reactividad similar a la cara más reactiva de la goetita, y constantes de afinidad muy similares con ésta, en efecto unificando el comportamiento de ambos minerales de óxidos de Fe(III).

Ejemplo (2): Competencia entre el mecanismo de adsorción de As(V) a oxihidróxidos de Fe(III) y el de precipitación como arseniatos de metales pesados, que controlan la movilidad del As(V). (3,4)

El As(V) tiene una afinidad muy alta por las superficies de óxidos de Fe(III), sin embargo también muestra una insolubilidad extrema como arseniatos en presencia de metales pesados, con constantes de producto de solubilidad por ejemplo para plomo(II) del orden de 10⁻⁶⁰ e incluso 10⁻⁸⁰. Por lo tanto, estos arseniatos se han encontrado en suelos contaminados con residuos minero-metalúrgicos en los cuales las altas concentraciones de arsénico están acompañadas también de altas concentraciones de metales pesados como Pb(II), Cu(II), y Zn(II). Hemos determinado por medio de datos experimentales en el laboratorio y sobre todo

a través de modelación termodinámica, las condiciones geoquímicas en las que prevalece el mecanismo de adsorción y aquellas en las que prevalece el de precipitación, así como en las que ambos mecanismos contribuyen de forma similar para controlar la movilidad acuosa del As(V) en presencia únicamente de Pb(II) y goetita. En resumen, las condiciones que promueven predominio de adsorción son: bajas proporciones de As/Fe, altas de As/Pb, concentraciones altas de sulfato a pH bajo, y especialmente goetitas de tamaño de partícula grande, y ausencia de cloruro. Las condiciones opuestas favorecen la precipitación, y éstos son más prevalentes de lo esperado, en condiciones de As/Fe relativamente bajas, en presencia de cloruro, o en presencia de goetitas de tamaño de partícula pequeño.

Ejemplo (3): Influencia del tamaño de partícula de óxidos de manganeso laminares tipo birnesita en su comportamiento de adsorción y de oxidación. (5-7).

Las birnesitas son óxidos de Mn (IV/III) que poseen una alta reactividad por su pequeño tamaño de partícula y su estructura laminar interna que tiene una gran capacidad de sorción de cationes. Se ha estudiado la influencia del tamaño de partícula y de la estructura de birnesitas sintéticas de relevancia ambiental en la oxidación de As(III) a As(V). Dicho proceso es favorable para disminuir la movilidad del arsénico acuoso, puesto que el As(III) se encuentra como especie neutra hasta valores de

pH de 9 $[\text{As}(\text{OH})_3]$, y por ello se adsorbe poco a superficies minerales. El As(V) se encuentra como oxianiones mono y bi-protonados y por tanto se puede adsorber o precipitar con mayor facilidad. Se mostrará el mecanismo de oxidación heterogénea del As(III) en presencia de birnesitas y las condiciones geoquímicas que favorecen dicha oxidación. Asimismo se investigaron las reacciones de adsorción y de oxidación de 4 hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAPs) de bajo peso molecular, que son compuesto orgánicos persistentes (COPs) en el ambiente, y se encontraron los factores y condiciones que promueven la adsorción solamente, o adicionalmente su oxidación en presencia de birnesitas.

Ejemplo (4): Reducción de Cr(VI) utilizando magnetitas sintéticas y naturales. (8).

La reducción química del Cr(VI) a Cr(III) es un proceso altamente deseado puesto que el primero es muy móvil en fase acuosa y el segundo muy insoluble a pH normales en el ambiente. La magnetita (Fe_3O_4) es un mineral que contiene Fe(III) y Fe(II) en su estructura, y por éste último tiene capacidad reductora potencial. Sin embargo, esta capacidad se ve mermada porque la superficie, sobre la cual reaccionan las especies a reducirse, rápidamente se agota de Fe(II) y crea una capa de óxido de Fe(III) (maghemita) que evita que el Fe(II) interno siga reaccionando. Sin embargo, mostramos una investigación en la que utilizamos partículas de Fe(0) metálico

en muy pequeñas concentraciones, y que por sí solas no son capaces de reducir al Cr(VI), pero que en combinación con la magnetita potencian considerablemente su capacidad reductora, y por tanto sugieren una aplicación eficiente para control y remediación de ambientes contaminados con este metal tóxico en su forma hexavalente.

Referencias

1. Villalobos, M., Cheney, M.A., Alcaraz-Cienfuegos, J. J. *Colloid Interface Sci.* 336, 412-422 (2009).
2. Salazar-Camacho, C., Villalobos, M. *Geochim. Cosmochim. Acta* 74, 2257-2280 (2010).
3. Villalobos, M., García-Payne, D.G., López-Zepeda, J.L., Cenicerros-Gómez, A.E., Gutiérrez-Ruiz, M.E. *Aquatic Geochem.* 16(2), 225-250 (2010).
4. Vaca-Escobar, K., Villalobos, M., Cenicerros-Gómez, A.E. *Appl. Geochem.* 27(11), 2251-2259 (2012).
5. Lafferty, B. J., Ginder-Vogel, M., Zhu, M., Livi, K. J. T., Sparks, D.L. *Environ. Sci. Technol.* 44, 8467-8472 (2010).
6. Villalobos, M., Escobar-Quiroz, I.N., Salazar-Camacho, C. *Geochim. Cosmochim. Acta* 125, 564-581 (2014).
7. Villalobos, M., Carrillo-Cárdenas, M., Gibson, R., López-Santiago, N.R., Morales, J. *Environ. Chem.* 11(3) 279-288 (2014).
8. Villacís-García, M., Villalobos, M., Gutiérrez-Ruiz, M. *J. Haz. Mater.* En prensa.

EVALUACIÓN DE LA REMOCIÓN Y DEGRADACIÓN DE HIDROCARBUROS AROMÁTICOS POR MICROALGAS CON METODOLOGÍA BIOANALÍTICA DE ÓPTIMA SELECTIVIDAD Y DETECCIÓN

Martha Patricia García Camacho

Facultad de Química, Departamento de Química Analítica, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM).

e-mail: pgcllas@unam.mx

Introducción

Los hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAPs) son contaminantes orgánicos que contienen dos o más anillos bencénicos fusionados y están ampliamente distribuidos en el ambiente. Muchos de éstos compuestos son tóxicos, mutagénicos y cancerígenos (1). La remediación de sitios contaminados por estos compuestos puede realizarse exitosamente por la vía biológica con el uso de microorganismos como las bacterias, hongos y microalgas (2). Las microalgas verdes han demostrado un enorme potencial como removedoras de contaminantes (3); se sabe que pueden biodegradar y bioacumular HAPs ligeros y el benzo(a)pireno (BaP) de cinco anillos (4). Sin embargo, los estudios de degradación

de HAPs por microalgas son escasos comparados con los que involucran bacterias y hongos, por lo que no se conocen las rutas de degradación completas (5). Al respecto se ha reportado que la degradación del BaP por *Selenastrum capricornutum*, una microalga verde, conduce a la formación de dihidrodioles (4,5-; 7,8-, 9,10- y 11,12-B(a)P), lo que sugiere la vía metabólica de las desoxigenasas (6). Notablemente, estos estudios parecen estar incompletos ya que no se han evaluado en detalle la secuencia de la aparición y desaparición de los metabolitos con respecto al tiempo de exposición, las tasas de remoción, la influencia de parámetros como la cantidad de contaminante expuesto, cantidades de microorganismos, la temperatura etc. Para

lo anterior, se requiere de metodología bio-analítica de óptima selectividad y altamente sensible para la determinación de trazas de los contaminantes y sus productos de degradación en los cultivos de las microalgas, considerados como muestras biológicas de gran complejidad. En este trabajo se describen estas metodologías analíticas utilizadas, basadas en técnicas de extracción con adsorbentes y la cromatografía de líquidos de alta resolución (CLAR), así como algunas de sus aplicaciones en estudios de remoción y degradación de algunos HAPs en medios de cultivo con microalgas.

Métodos

Método por extracción en fase sólida (SPE por sus siglas en inglés)

El método para la extracción para los HAPs y sus metabolitos en el medio líquido consistió en aplicar 15 mL de muestra con 20% de isopropanol a un cartucho empacado con 300 mg de sílice C18 previamente acondicionada con metanol y agua. La secuencia de elución fué: a. 5 mL de agua; b. 4 mL de mezcla acetoniitrilo:agua 10:90 v/v; c. 3 mL de mezcla acetoniitrilo:agua 55:45 v/v, en donde se recuperan los metabolitos (extracto 1) y d. 4 mL de acetoniitrilo en donde se recuperan los HAPs (extracto 2).

Método por dispersión de matriz en fase sólida (MSPD por sus siglas en inglés)

El método para la extracción de los HAP's de las microalgas consistió en macerar en

un mortero de ágata 5 mg de biomasa seca con 100 mg de sílice C18 (preacondicionada con metanol y secada al vacío) hasta obtener una pasta homogénea, la cual se empacó en un cartucho. La secuencia de elución fué: a. 10 mL de agua; b. 10 mL de una mezcla de acetoniitrilo-agua 10:90 (v/v); c. 5 mL de una mezcla de acetoniitrilo-agua 20:80 (v/v), d. 1.5 mL de una mezcla de acetoniitrilo-agua 40:60 (v/v), en donde se recuperan los metabolitos (extracto 1) y e. 0.5 mL de una mezcla de acetoniitrilo-agua 90:10 (v/v), donde se recuperan los HAP's (extracto 2).

Preconcentración y análisis

Los extractos 2 se inyectaron directamente al cromatógrafo de líquidos con una columna C18 de 15 x 0.45 cm d.i y 5 μ m dp. Las fases móviles estuvieron constituidas por mezclas metanol-agua manejadas en modo isocrático y en diferentes gradientes con flujo de 1 mL/min. Los extractos 1 se preconcentraron y analizaron por medio del montaje del sistema SPE-CLAR mostrado en la figura 1. La detección fue efectuada por espectrofotometría UV a 264 nm para los HAPs y por fluorescencia a $\lambda_{ex} = 263$ nm y $\lambda_{em} = 430$ nm para los metabolitos. Los métodos presentaron porcentajes de recobro > 90%, $r^2 > 99$ (0.1-100 μ g/L y 1-1000 ng/L para HAPs y metabolitos respectivamente) y límites de detección (LOD) de 0.1- 0.5 μ g/L y 1 - 0.6 ng/L. La reproducibilidad fue < 9%.

Bioensayos de exposición

Se realizaron exposiciones de los cultivos con 1×10^6 células/mL de *S. capricornutum* en medio Bristol con proteosa-peptona 0.5 g/L por triplicado a diferentes concentraciones de HAPs (5 a 266 $\mu\text{g L}^{-1}$) y temperaturas (20 a 30 °C), los cuales fueron mantenidos en agitación constante e iluminados en intervalos de luz/oscuridad de 8 hrs con luz amarilla y natural. Los tiempos de exposición variaron de 0.75 a 48 hrs. Se emplearon controles de microalgas sin BaP (blanco) y de medio de crecimiento con BaP (Medio).

Resultados

Los HAPs fueron monitoreados en los diferentes tiempos de exposición en la biomasa y en el medio de crecimiento líquido. Se observó que la desaparición del medio de los HAPs estudiados (fenantreno, antraceno, pireno, benzo(a)antraceno, benzo(b)fluoranteno, benzo(k)fluoranteno, benzo(a)pireno, dibenzo(a,h)antraceno) se efectuó de manera muy rápida en los cultivos, lográndose a las 6 hrs porcentajes de remoción altos que fluctuaron entre el 60 y 90% dependiendo del compuesto; la temperatura de mayor remoción fue de 30 °C. La remoción no se vió afectada a causa de los diferentes tipos de iluminación. Por otra parte, entre las 0.75 y 3 hrs de exposición se encontró en la biomasa un aumento gradual de la recuperación de los HAPs, para después decaer lentamente hasta llegar a concentraciones muy bajas cercanas a los límites de detección de los métodos, entre

las 24 y 48 hrs. Este comportamiento sugiere que la remoción se efectúa primeramente por retención de los contaminantes en las células y posteriormente por biodegradación. La aparición de los metabolitos fue estudiada para el benzo(a)pireno, encontrándose que el 4,5-OH BaP es uno de los primeros metabolitos en formarse porque se encontró presente desde las 0.72 hrs con una concentración máxima en el medio entre las 3 y las 6 hrs de exposición, decayendo después rápidamente. El 7,8-OH BaP apareció a los mismos tiempos que el 4,5-OH BaP y otro dihidrodiol aún no identificado, al parecer es el 11,12-OH BaP. Entre las 3 y 6 hrs de exposición empezó a aparecer el 9,10-OH BaP, el cuál fue aumentando lentamente su concentración hasta el tiempo de 48 hrs que fue el máximo que se monitoreó. El aumento en la concentración de exposición al BaP provocó una leve disminución en las velocidades de remoción y en el tiempo de aparición de los metabolitos.

Conclusiones

Con el apoyo de metodología bioanalítica fiable de óptima selectividad y sensibilidad se logró evaluar la remoción de algunos de los hidrocarburos aromáticos policíclicos en medios de cultivos de microalgas, corroborándose la degradación por la presencia de metabolitos. Esta herramienta analítica permitirá efectuar investigación más específica para caracterizar la degradación de los HAPs en medio acuoso y asentar las condiciones para futuros estudios de bioremediación.

Agradecimientos

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología CONACYT por el proyecto de Ciencia Básica 166389 y a la Dirección General de Asuntos del Personal Académico (DGAPA-UNAM) por el proyecto PAPIIT IT203214-3

Referencias

- 1) Stellman, J.M., McCan, M. 1998. *Hidrocarburos poliaromáticos*. En: *Enciclopedia de Salud y Seguridad en el Trabajo*. 3ª edición. Madrid: Organización Internacional del Trabajo. Ministerio de Trabajo y Asuntos Sociales - Subdirección General de Publicaciones. pp. 310-9
- 2) Haritash, A.K., Kaushik, C.P. *Journal of Hazardous Materials*. 169,1-15 (2009)
- 3) Ghasemi, Y., Rasoul-Amini, S., Fotooh-Abadi, E. *Journal of Phycology*. 47, 969-980 (2011)
- 4) Semple, K.T., Cain, R.B., Schmidt, S. *FEMS Microbiology Letters*, 170, 291-300 (1999)
- 5) Juhasz, A.L., Naidu, R. *International Biodeterioration & Biodegradation* 45, 57-88 (2000)
- 6) Warshawsky, D., Cody, T., Radike, M. *Chemico-Biological Interactions* 97,131-148, (1995).

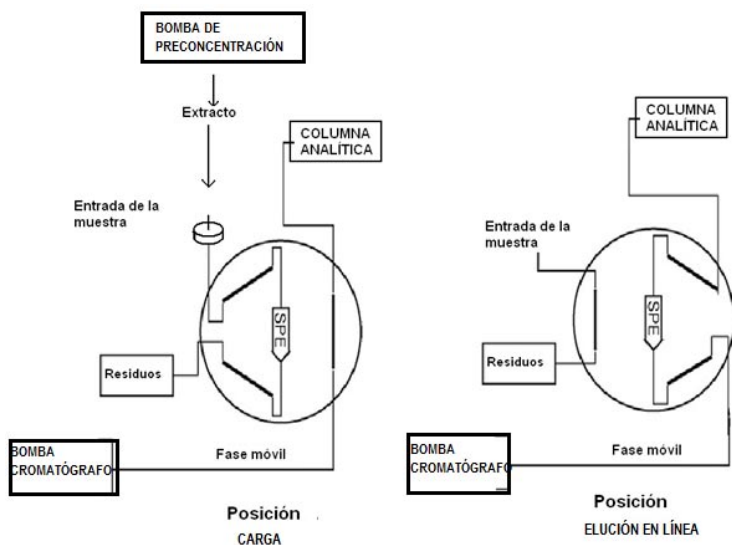


Figura 1. Montaje en línea

The background is a vibrant, abstract composition of various shades of green and blue. It features several layers of semi-transparent, overlapping shapes and patterns. On the right side, there are large, flowing, ribbon-like forms that curve downwards. In the center and left, there are intricate patterns of thin, curved lines that resemble stylized waves or organic structures. Horizontal bands of small, semi-transparent dots are visible, particularly in the middle and lower sections. The overall effect is one of dynamic movement and modern, clean design.

Cursos y talleres

TALLER DE FOTOQUÍMICA MOLECULAR

Dr. William Ernesto Rodríguez Córdoba¹, Dr. Rodrigo Morales Cueto²

¹Universidad Nacional de Colombia sede Medellín

Email: werodriguezc@unal.edu.co

²Centro de Investigaciones Químicas, UAEM

Email: rmcueto@uaem.mx

Contenido y organización

El objetivo principal de este taller es que los estudiantes adquieran conocimientos, tanto desde el punto de vista fundamental como aplicada, en el área de fotoquímica molecular. El plan de estudios desarrollado en este taller cubrirá una variedad de temas relacionados con la fotoquímica y fotofísica tomados de la literatura actual y se hará especial énfasis en el área de la fotoquímica orgánica. El contenido del taller incluye los siguientes tópicos:

I. Conceptos fundamentales de la fotofísica/fotoquímica molecular y técnicas experimentales

El curso comienza con una revisión de los conceptos fundamentales de absorción, emisión, excitación y de los procesos fotofísicos y fotoquímicos. Se realizará la descripción de las técnicas experimentales del estado estacionario: absorción, emisión y excitación.

II. Fotofísica de moléculas en solución y transferencia de energía

En esta sección se estudiarán los fundamentos de las propiedades fotofísicas de moléculas en disolución y se hará especial énfasis en el estudio de los mecanismos de transferencia de energía tipo Förster y Dexter.

III. Espectroscopia ultrarrápida – Transferencia de energía y de electrones en sistemas orgánicos

Las técnicas de espectroscopia con resolución temporal permiten obtener información acerca de la dinámica de los procesos fotoinducidos tanto en las moléculas como en diferentes materiales. En esta sección nos enfocaremos en las técnicas de fluorescencia por medio de suma de frecuencias y absorción transitoria. Por último se presentarán algunas publicaciones enfocadas en el estudio de los procesos fotoinducidos de transferencia de energía y de electrones en diferentes sistemas modelos.

IV. Modelado Molecular de los procesos fotoquímicos

Se discute la aplicación de la teoría del funcional de la densidad dependiente del tiempo TD-DFT en el estudio de procesos fotoinducidos en sistemas moleculares. Se presentarán ejemplos de su aplicación en el estudio de reacciones fotocromáticas, las cuales involucran reacciones de transferencia intramolecular de protones y de isomerización.

Referencias

- (1) Turro, N. J.; Ramamurthy, V.; Scaiano, J. C. *Modern molecular photochemistry of organic molecules*; University Science Books: Sausalito, Calif., 2010.
- (2) Turro, N. J.; Scaiano, J. C.; Ramamurthy, V. *Principles of molecular photochemistry: an introduction*; University Science Books: Sausalito, CA, 2009.
- (3) Valeur, B. *Molecular fluorescence: principles and applications*; Wiley-VCH: Weinheim; New York, 2002.
- (4) Parson, W. W.; *Modern optical spectroscopy with examples from biophysics and biochemistry*, Springer: Berlin; New York, 2007.
- (5) Speiser, S. *Chem. Rev. (Washington, D. C.) Photophysics and Mechanisms of Intramolecular Electronic Energy Transfer in Bichromophoric Molecular Systems: Solution and Supersonic Jet Studies* 1996, 96, 1953.
- (6) Berera, R. Van Grondelle, R. T. M. Kennis, J. *Ultrafast transient absorption spectroscopy: principles and application to photosynthetic systems*, *Photosynth Res* (2009) 101:105–118

PREPARACION DE PIGMENTOS MENOS AGRESIVOS CON EL MEDIO AMBIENTE

Verónica De la Luz Tlapaya, Héctor Beltrán Mir, Eloísa Cordoncillo
Cordoncillo*

Universitat Jaume I, Departamento de Química Inorgánica y Orgánica,
Avda. Sos Baynat s/n, 12071 Castellón, España
cordonci@uji.es

Introducción

Actualmente existe interés en desarrollar nuevos materiales inorgánicos de color amarillo para sustituir pigmentos industriales que están elaborados a base de metales tóxicos peligrosos para la salud humana y el medio ambiente. La mayoría de los pigmentos cerámicos utilizados en la industria cerámica se basa en metales pesados y de transición como iones cromóforos [1]. Las fuertes regulaciones ambientales adoptadas por la unión europea han aumentado el desarrollo de nuevas composiciones de pigmentos inorgánicos más respetuosos con el medio ambiente, es decir, sin elementos tóxicos como Pb, Hg, Cd, Sb, As, Co, Cr, Ni, etc.

El desarrollo de nuevos sólidos con interesantes aplicaciones de color es un tema atractivo para la investigación y la industria; especialmente materiales donde se produce la sustitución de iones de transición por iones lantánidos. El uso de iones lantánidos está creciendo debido a su conocida baja toxicidad y las propiedades ópticas únicas que lo presentan como un material prometedor en una amplia gama de aplicaciones, que incluye pigmentos inorgánicos para esmaltes cerámicos, láseres, [2].

Por lo tanto, la sustitución de elementos tóxicos por iones lantánidos representa una forma alternativa y exitosa de preparar materiales coloreados más benignos con el medio

ambiente. Los materiales de óxido de itrio dopados con iones lantánidos han atraído un interés considerable, debido a sus importantes propiedades ópticas, tales como su excelente eficiencia luminiscente, la pureza del color y la estabilidad química y térmica [3]. Entre los iones lantánidos, los materiales de Y_2O_3 dopado con Tb han sido ampliamente estudiados debido a sus importantes propiedades luminiscentes cuando se prepara en forma de nanopartículas [4].

En este trabajo se reportan las síntesis de Y_2O_3 dopado con Tb y codopado con M^{2+} (Ca y/o Zn) mediante una modificación del método Pechini para obtener nuevos pigmentos amarillos. Con el fin de generar pigmentos alternativos amigables con el medio ambiente y sin elementos cromóforos tóxicos. Se realizó la caracterización de los materiales mediante difracción de rayos-X en polvo (DRX), coordenadas cromáticas CIE Lab* y espectroscopia Ultravioleta-Visible (UV-Vis). A fin de obtener la mejor coloración del pigmento y el tamaño de partícula pequeño, también se evaluó la temperatura de síntesis y la concentración de dopantes.

Métodos

Las muestras se prepararon por un procedimiento modificado del método Pechini [5] usando como precursores: $Y(OOCCH_3)_3 \cdot 4H_2O$ (99.9%, Strem Chemicals), $Ba(OOCCH_3)_2 \cdot H_2O$ (98%, Sigma-Aldrich), $Ca(OOCCH_3)_2 \cdot H_2O$ (98%, Sigma-Aldrich), $Zn(OOCCH_3)_2$

(98%, Sigma-Aldrich) y $TbCl_3$ (99.9%, Strem Chemicals). Fueron utilizados como disolventes, agua destilada y el metanol absoluto (Scharlab, 99.9%). Un esquema de la preparación general de las muestras se observa en la figura 1.

FIGURA 1

El precursor de itrio se disolvió en agua y metanol con una proporción 1:1.4:25 de $Y(OOCCH_3)_3 : H_2O : CH_3OH$, entonces se agregó $Ba(OOCCH_3)_2 \cdot H_2O$, $Ca(OOCCH_3)_2 \cdot H_2O$ ó $Zn(OOCCH_3)_2$ y finalmente se añadió $TbCl_3$, la mezcla se agito durante 20 min. Esta mezcla se transfirió a un matraz y se calentó a reflujo ($60^\circ C$) durante 48 horas. La solución resultante se enfrió hasta temperatura ambiente y a continuación, se adicióno el ácido cítrico (relación molar 1:1, metal:ácido cítrico). Se formo un gel y se seco a temperatura ambiente. Finalmente, el polvo se calcino a diferentes temperaturas, $1000^\circ C$ y $1300^\circ C$.

Resultados

Estudio preliminar

Se realizó un estudio preliminar para determinar las condiciones óptimas de trabajo (temperatura, tiempo de reacción y composición) en el que las composiciones que figuran en la tabla 1, mostraron un buen color amarillo después de la calcinación. También se evaluó la estabilidad química y el color final de los sólidos preparados en un

esmalte. Las composiciones para este estudio preliminar se seleccionaron con base en el estudio de Kumini y colaboradores [6], en el que prepararon Y_2BaZnO_5 dopado con Tb que producen materiales de color amarillo. Se propusieron tres composiciones: una solución sólida con una composición a base de Y_2O_3 dopado con Tb con la fórmula $Y_{2-x}Tb_xO_3$ ($x = 0.14$) como referencia y dos composiciones más (YTB y YTC) en las cuales Tb ($x = 0.14$) y se utilizaron pequeñas cantidades de Ba o Ca como codopantes. Las muestras fueron calcinadas a $1000^\circ C$ por 2 horas y $1300^\circ C$ durante 6 horas. La velocidad de calentamiento fue $10^\circ C/min$. Después del tratamiento térmico el sólido se molió y se tamizó con un tamiz de malla 0.06mm.

TABLA I

Estudio composicional

Con base en los resultados del estudio preliminar, donde se doparon muestras de Y_2O_3 con Ca y Tb, estos sólidos presentaron una coloración amarilla más intensa por lo que se prepararon diferentes composiciones con Ca. La siguiente fórmula fue propuesta para introducir diferentes cantidades de Ca como dopante: $Y_{1.86-x}Ca_xTb_{0.14}O_{3-x/2}$. Por otro lado, se prepararon diferentes composiciones de $Y_{1.86}Tb_{0.14}O_3$ codopado con Zn y Ca. Se introdujo Zn basado en un estudio de Kumini y colaboradores [6]. El efecto de la concentración de Ca y Zn en el color del pigmento se estudio por medio de seis composiciones

basadas en $Y_{1.86-x}M_xTb_{0.14}O_{3-x/2}$ ($M = Ca$ y/o Zn) donde $x = 0.06, 0.32$ y 0.64 , los cuales son indicados en la tabla II. Este estudio composicional se llevo a cabo para explorar cual era la concentración de iones dopantes más idónea para conseguir la mejor coloración, con el propósito de disminuir la cantidad de itrio debido a que este reactivo es caro.

TABLA II

El análisis de rayos-X de los sólidos calcinados a $1300^\circ C$ muestra que se obtuvo una sola fase cristalina para todas las composiciones como se observa en la figura 2. Los picos de los patrones de difracción fueron asignados a Y_2O_3 (JCPDS 41-1105), lo que podría sugerir la formación de soluciones sólidas para las tres composiciones estudiadas. Los picos de difracción se agudizan con el aumento de la temperatura de calcinación. No hubo evidencia de fases secundarias, si hubiera pequeñas cantidades de Tb_2O_3 , CaO o BaO fuera de la red de Y_2O_3 serian demasiado pequeñas para ser detectadas por el equipo de rayos-X.

FIGURA 2

Se determinaron los parámetros de red (a , para la fase cúbica) de las soluciones sólidas y se muestran en la figura 3. La fase principal exhibe la estructura cúbica bixbyita (grupo espacial $Ia3$, No. 206) con un parámetro de red de 10.604 \AA . Los resultados indicaron que hay cambios en el parámetro de red, el

cual cambia con el tamaño de cada catión. Esto indica que el radio iónico mayor que Y^{3+} (104 pm), por ejemplo, Tb^{3+} (106.3 pm), Ca^{2+} (114 pm) o Ba^{2+} (149 pm) [7] aumentan el parámetro de red (fig.3), esta variación sugiere que Tb, Ba y Ca se incorporaron en la estructura de Y_2O_3 . También es una evidencia de que se formó una solución sólida.

FIGURA 3

Las soluciones sólidas CZ006 y CZ032, son las que presentaron la mejor coordenada b^* (amarillo) comparable con el valor obtenido en el pigmento amarillo usado en la industria ($Pr-ZrSiO_4$), tabla III. Se obtuvo una buena estabilidad química y térmica después del esmaltado como se puede observar en la tabla IV y las cantidades de itrio se reducen utilizando iones Ca y Zn.

TABLA III Y TABLA IV

En la figura 4 se observa la difracción de rayos-X (fig.4a) y los espectros de UV-Vis (fig.4b) de las muestras CZ006, CZ032 y CZ064. La fig. 4a, permite apreciar que las muestras CZ006 y CZ032 presentan una sola fase, mientras que CZ064 presenta pequeños picos que corresponden a fases secundarias de CaO y ZnO. El UV-Vis, fig. 4b, muestra bandas de absorción similar debidas a procesos de transferencia de carga y la intensidad es parecida en las muestras CZ006, CZ032 y decrece en CZ064 posiblemente debido a la

saturación para incorporar cationes Ca y Zn a la fase cristalina de Y_2O_3 .

FIGURA 4

Por lo que, el bajo valor de a^* y el alto valor de b^* del pigmento CZ032 lo convierten en un candidato potencial para su utilización como pigmento inorgánico amarillo no tóxico (figura 5a,b).

FIGURA 5

Conclusiones

Se prepararon nuevos pigmentos amarillos inorgánicos por una modificación del método Pechini con la fórmula general: $Y_{1.86-x}M_xTb_{0.14}O_{3-x/2}$ ($M = Ca$ y/o Zn) en el intervalo de composición $0.06 < x < 0.64$.

Se encontró que el límite de la solución sólida $Y_{1.86-x}M_xTb_{0.14}O_{3-x/2}$ para la composición cuando $X=0.32$ cuando se usaron Ca, Zn o una mezcla de ellos como dopantes.

Se obtuvieron buenas coordenadas cromáticas amarillas (coordenada b^*), con valores similares a los observados en pigmentos amarillos industriales.

El color amarillo se mantuvo después de la aplicación de esmaltes. Por lo que, estas composiciones podrían ser buenos candidatos para ser aplicados en la cerámica o las impresoras de inyección de tinta como pigmentos amarillos.

Agradecimientos

Por el financiamiento, agradecemos a “Bancaja-Universitat Jaume I”- proyecto No. P1 1B2011-25 (HB, EC).VDL agradece el contrato de investigación otorgado por el Ministerio de Ciencia e Innovación de España.

Referencias

- [1] Duffus J.H., *Pure and Applied Chemistry* 2002; 74: 793-807.
- [2] a) Sotiriou G.A., Schneider M., Pratsinis S.E.; *J. Phys. Chem. C* 2011; 115:1084-1089. b) García A., Llusar M., Calbo J., Tena M.A., Monrós G., *Green Chem.* 2001; 3: 238-242
- [3] a) Wakefield G., Holland E., Dobson P. J., Hutchison J. L., *Adv. Mater.* 2001; 13[20]:1557-1560. b) Chandra S., Deepak F. L., Gruber J. B., Sardar D. K., *J. Phys. Chem. C.* 2010; 114:874-880.
- [4] a) Goldburt E.T., Kulkarni B., Bhargava R.N., Taylor J., Libera M., *J. Lumin.* 1997; 72-74:190-192. b) Wakefield G., Keron H.A., Dobson P.J., Hutchison J.L., *J. Phys. Chem. Solids* 1999; 60:503-508
- [5] Pechini M.P., US Patent, US 3330697, 6, 1967.
- [6] Kumini S., Fujihara S., *J. Electrochem. Soc.* 2010; 157[5]:J175-J180.
- [7] Shanon R.D., *Acta Crystallogr.* 1976; A32:751-767.

Tabla I. Composiciones preparadas para el estudio preliminar

Referencia	Composición
YT	$Y_{1.86}Tb_{0.14}O_3$
YTB	$Y_{1.8}Tb_{0.14}Ba_{0.06}O_{2.97}$
YTC	$Y_{1.8}Tb_{0.14}Ca_{0.06}O_{2.97}$

Tabla II. Composiciones preparadas. La referencia se muestra entre paréntesis.

Composición		
Tendencia I	Tendencia II	Tendencia III
$Y_{1.8}Tb_{0.14}Ca_{0.06}O_{2.97}$ (YTC)		$Y_{1.8}Tb_{0.14}Ca_{0.03}Zn_{0.03}O_{2.97}$ (CZ006)
$Y_{1.54}Tb_{0.14}Ca_{0.32}O_{2.84}$ (C032)	$Y_{1.54}Tb_{0.14}Zn_{0.32}O_{2.84}$ (Z032)	$Y_{1.54}Tb_{0.14}Ca_{0.16}Zn_{0.16}O_{2.84}$ (CZ032)
$Y_{1.22}Tb_{0.14}Ca_{0.64}O_{2.68}$ (C064)		$Y_{1.22}Tb_{0.14}Ca_{0.32}Zn_{0.32}O_{2.68}$ (C064)

Tabla III. Parámetros CIE Lab* de las muestras después del proceso de calcinación a 1300°C por 6 hrs.

Ref.	L*	a*	b*
YTC	89.71	2.20	44.79
C032	84.29	6.58	48.89
C064	84.87	6.58	45.05
Z032	82.71	8.24	37.15
CZ006	82.76	9.72	57.04
CZ032	82.11	8.77	55.41
CZ064	84.66	7.73	47.47
Pr-ZrSiO ₄	83.93	1.26	62.62

Tabla IV. Parámetros CIE Lab* de las muestras después del esmaltado.

Ref.	L*	a*	b*
C032	83.39	-0.56	40.58
C064	84.14	-1.77	37.05
CZ006	82.33	0.69	47.86
CZ032	79.42	2.04	55.10
CZ064	80.35	1.17	44.55
Pr-ZrSiO ₄	81.50	-1.60	45.30

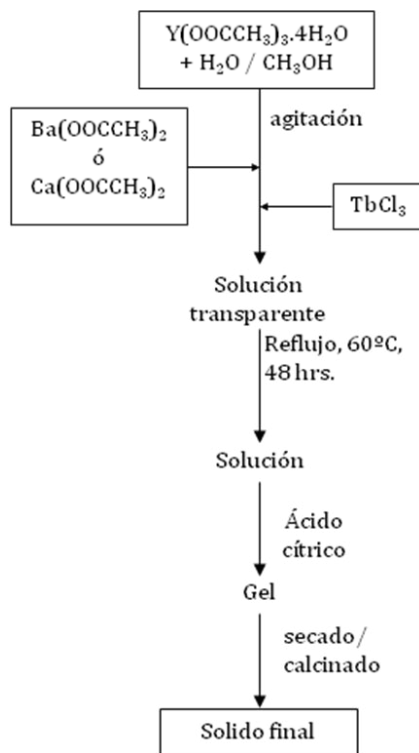


Figura 1. Esquema del procedimiento de síntesis.

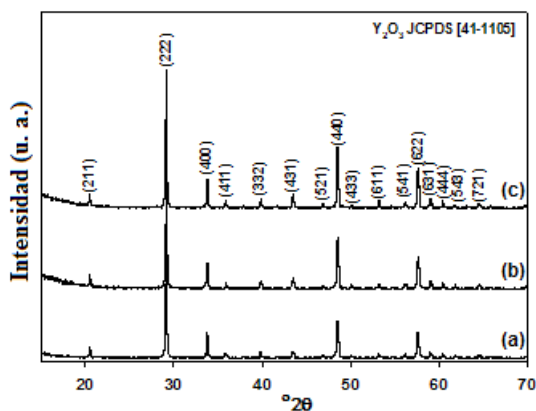


Figura 2. Patrón de difracción de rayos-X para las muestras: a) $Y_{1.86}Tb_{0.14}O_3$, b) $Y_{1.8}Tb_{0.14}Ca_{0.06}O_{2.97}$ y c) $Y_{1.8}Tb_{0.14}Ba_{0.06}O_{2.97}$ calcinadas a 1300°C por 6h.

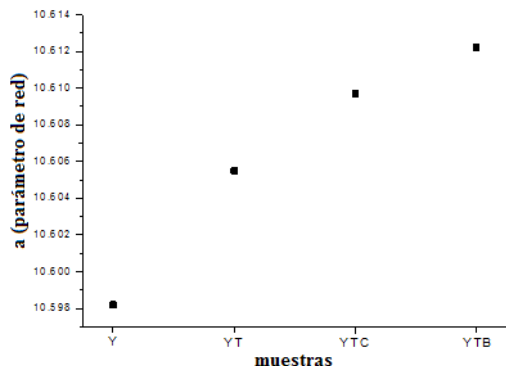


Figura 3. Variación de los parámetros de red de la solución sólida $Y_2O_3:Tb$ y (Ca o Ba).

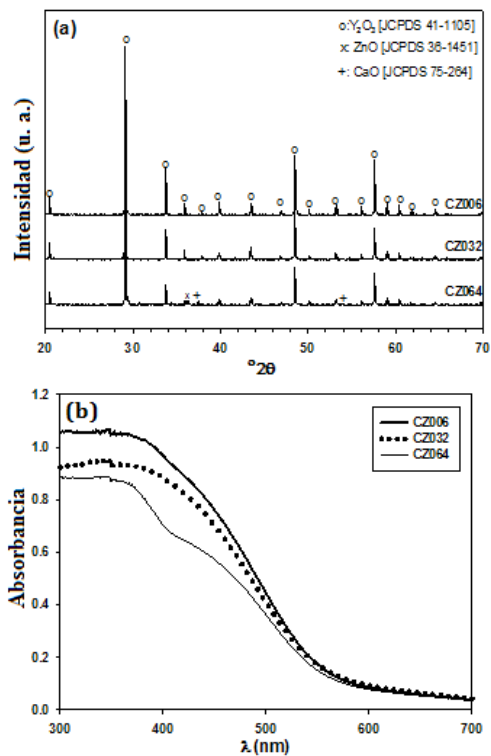


Figura 4. a) difracción de rayos-X y b) espectros UV-Vis de las muestras CZ006, CZ032, y CZ064.

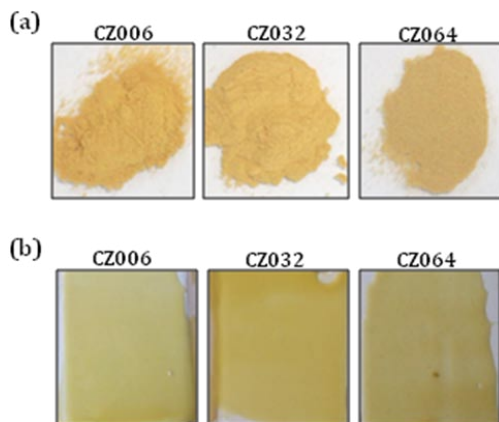


Figura 5. Fotografías de los polvos CZ006, CZ032 y CZ064 (a) calcinados a $1300^{\circ}C$; (b) las mismas muestras aplicadas sobre una baldosa de cerámica.

MATERIALES CERÁMICOS

María de Lourdes Chávez García

Facultad de Química, UNAM

Av. Universidad 3000, Universidad Nacional Autónoma de México, 04510 D. F., México

marilu@unam.mx

Introducción

Los cerámicos son uno de los materiales más influyentes en la civilización humana. Su impacto socioeconómico es importante, así como lo ha sido a través de la historia. Algunos de los avances tecnológicos en los materiales cerámicos es el crecimiento en las comunicaciones inalámbricas, las cuales no hubiera sido posible sin la miniaturización permitida por los filtros de microondas y los resonadores de los óxidos cerámicos. Los cerámicos piezoeléctricos forman parte de los microscopios de tipo túnel y de fuerza atómica; en la tecnología del ultrasonido médico; en las cámaras de enfoque automático, y en el sistema de corrección de visión del Telescopio Hubble. La velocidad exponencial en la comercialización de las baterías

recargables en base al litio. La reparación, la reconstrucción y el reemplazamiento de los tejidos duros del cuerpo, como son los huesos y los dientes, son posibles debido al desarrollo de los biocerámicos. Además de las aplicaciones tradicionales en la alfarería, la construcción, los utensilios de cocina, los recubrimientos, la cerámica doméstica y sanitaria, los refractarios, los vidrios, entre otros. La versatilidad que presentan los materiales cerámicos se debe a que poseen propiedades y características que no se obtienen con ningún otro material.

Es difícil dar una definición de cerámicos, una, amplia es la consideración de que son sólidos inorgánicos no metálicos, los cuales proveen del intervalo más grande de

funciones que cualquier otro material. Se sintetizan en forma de vidrios, policristales, cristales solos, películas delgadas y en forma nanométrica. Se utilizan solos o se integran con metales, polímeros o con otro cerámico, lo cual produce materiales compuestos o compositos. Su impacto comercial es alto, es una industria multibillonaria. Las ventas mundiales se distribuyen anualmente, en un aproximado del 55% en la producción del vidrio, el 17% los cerámicos avanzados; el 20% la cerámica doméstica y sanitaria y recubrimientos; el 7% los refractarios y 2% la cerámica estructural.

Debido a la importancia científica y tecnológica de los materiales cerámicos la investigación se expande en la electrónica; la construcción; en las ingenierías: química, mecánica y aeroespacial; en las tecnologías del medio ambiente; en los biocerámicos; en la física de la materia condensada, y en la química del estado sólido, entre otras.

Este taller de Materiales Cerámicos representa un intento para capturar el interés de los jóvenes estudiantes de las diferentes disciplinas. El estudio de los materiales cerámicos usa principios básicos de la química y la física para comprender el diseño de un material nuevo o la modificación de uno existente a nivel atómico, y su proceso en formas útiles. Así es como se desarrollan el exterior de los recubrimientos, los cátodos para las celdas de combustible y los paneles

solares, los vidrios bioactivos que ayudan en la cura de cáncer en humanos, las prótesis flexibles para atletas paralímpicos o lentes de visión nocturna para pilotos. Los cerámicos se usan en la industria minera, aeroespacial, la medicina, de refinamiento, la alimenticia, de empaques, electrónica, química, transmisión de electricidad y guías de transmisión de ondas de luz y muchas otras.

Descripción

En el taller de Materiales Cerámicos se describirán los temas siguientes:

Las características que definen a los Materiales Cerámicos, algunas de las cuales los considera sólidos inorgánicos, tanto cristalinos como amorfos. Constituidos por elementos metálicos y no metálicos, o de elementos no metálicos o de un elemento no metálico. Los enlaces mixtos: iónicos y/o covalentes; a veces metálicos. Las resistencias elevadas a la temperatura, mecánicas y químicas. Químicamente inertes y ligeros.

Las clasificaciones diversas para los Materiales Cerámicos, entre las que se encuentran la de los cerámicos tradicionales (arcillas, sílice, feldspatos,), y los cerámicos avanzados, especiales, tecnológicos o de ingeniería (óxidos de aluminio, zirconio, titanio; carburos y nitruros de silicio de boro entre otros). La clasificación en función de su enlace si son iónicas (formadas por un metal y un no-metal, por unión electrostática); covalentes

(formadas por dos no metales, por medio de la unión compartida de electrones entre átomos vecinos), o de enlace mixto. Con respecto a su estructura si son cristalinas (cristal simple y policristalinas) y/o amorfas (vítreas). La clasificación por la aplicación que presentan los cerámicos en vidrios, arcilla cocida, abrasivos, refractarios, cementos, pigmentos, y cerámicos avanzados.

Las estructuras y los defectos en los materiales cerámicos, algunas de las estructuras que se adoptan son típicas como es la de: NaCl, blenda (ZnS) y fluorita (CaF₂). La mayoría de los cerámicos tienen estructuras cristalinas complicadas y variadas, dentro de las cuales se destacan: la estructura perovskita, CaTiO₃, en donde el Ca²⁺ y O²⁻ forman una celda cúbica centrada en caras y el Ti⁴⁺ se sitúa en el centro de la celda en coordinación seis con O²⁻. La estructura del corindón, Al₂O₃, con estructura hexagonal compacta de O²⁻ y dos tercios de los sitios octaédricos ocupada por Al³⁺, formando una celda unidad con 12 Al³⁺ y 18 O²⁻; la que es la base del zafiro y el rubí, éste último en aplicaciones en dispositivos Laser. La estructura de la espinela, MgAl₂O₄, en donde 32 O²⁻ forman el retículo cúbico centrado en las caras y los cationes ocupan las posiciones tetraédricas y octaédricas o una combinación, dependiendo del tipo de espinela en particular. La estructura del grafito es hexagonal compacta en comparación a la disposición cúbica del diamante.

Los defectos en particular los puntuales juegan un papel importante en la determinación de las propiedades de la conducción, la luz y el color. Las cuales impactan la industria de los catalizadores, los semiconductores, los electrolitos sólidos, la superconductividad y la de los pigmentos cerámicos, entre otras muchas. Para lo cual se describirán el tipo de defectos, cómo se forman y cómo influyen en las propiedades de los cerámicos.

Las propiedades de los Materiales Cerámicos, dentro de las que se encuentran: las mecánicas, los cerámicos son duros y tiene resistencia a la compresión alta; su tenacidad es baja debido a su enlace iónico-covalente, lo que limita sus aplicaciones. Esta fragilidad se intensifica por la presencia de imperfecciones. No suelen presentar propiedades magnéticas en general, algunas cerámicas con estas propiedades son las ferritas y los granates, o cerámicos ferrimagnéticos. En donde los diferentes iones tienen momentos magnéticos distintos, y al aplicar un campo magnético se produce una imantación neta. En cuanto a sus propiedades eléctricas en la mayoría de los cerámicos tienen resistencia dieléctrica alta, aún así presentan un abanico de propiedades eléctricas, como son la conducción de iones, las semiconductoras, la conducción metálica y las de superconducción. Algunos de ellos presentan facilidad de polarizarse. En cuanto a sus propiedades térmicas, la mayoría de los cerámicos tienen conductividad térmica baja debido a sus enlaces. La diferencia de energía

entre las bandas de covalencia y la de conducción es grande como para que se exciten los electrones hacia la banda de conducción, por lo que son buenos aislantes térmicos.

El equilibrio de fases para los materiales cerámicos se encuentra representado por los diagramas de fases, que son los mapas que describen las fases presentes en función de las variables termodinámicas, en condiciones de equilibrio. Se usan en los procesos o síntesis de cerámicos y en la industria cerámica para comprender y controlar los fenómenos implicados en la producción de la industria avanzada y el desarrollo de los materiales.

La caracterización de los materiales cerámicos depende del tipo de información que se necesita obtener. Si la muestra es un cristal sencillo, policristalina o amorfa. De cuánto material se requiere para el análisis. Y si la técnica es destructiva o no. Las técnicas de batalla son la difracción de rayos-x de polvos, los análisis térmicos y las microscopías. En función de las propiedades se utilizan otras técnicas.

Los procesos cerámicos o de síntesis, de los materiales cerámicos, describen los métodos para producir partículas de determinada forma, química, y tamaño. Desde el método tradicional, de estado sólido o cerámico; las mecanoquímicas; las técnicas por vía húmeda o química *dulce* de co-precipitación, hidrotermales y sol-gel; las de fase vapor, y los métodos de combustión de geles entre

otros muchos. En particular se hablará de la obtención de los vitro cerámicos, los que presentan una microestructura fina producida por la cristalización controlada (desvitrificación) de un vidrio.

Las aplicaciones de los materiales cerámicos son variadas. En particular se presenta la síntesis de geopolímeros por activación alcalina de metacaolinita y residuos sólidos, y la síntesis de pigmentos por el método de combustión de geles. Finalmente se mencionan las técnicas de modelación molecular.

Conclusiones

Los seres humanos hemos encontrado aplicaciones para los cerámicos por más de 30,000 años. Cada día una aplicación nueva se descubre. La industria global de los cerámicos cuenta con un valor mayor a los diez trillones de dólares. A pesar de la variedad de compuestos que existe, las técnicas de procesamiento, la diversidad de propiedades conocidas y las aplicaciones de los materiales cerámicos, en nuestro país está la necesidad de la investigación básica, para encontrar nuevos compuestos con propiedades específicas mejoradas, y aumentar el conocimiento del procesamiento en la fabricación para la producción de cerámicos. Por lo que el estudio de los materiales cerámicos proporciona oportunidades de trabajo en base al conocimiento, habilidades y comprensión en áreas que incluyen el estudio, la modificación y el diseño de cerámicos diversos.

References

C.B. Carter, M.G. Norton, *Ceramic Materials. Science and Engineering* (Springer Science+Business Media New York, ed. 2, 2013) [second edition].

A.R West, *Solid State Chemistry and its Applications* (John Wiley and Sons, Ltd, ed. 2, 2014) [second edition].

TALLER DE OCTAVE/MATLAB

Oscar Peralta Rosales

Instituto de Materiales, UNAM

MATLAB® (Matrix Laboratory) es un software desarrollado por MathWorks que ha contado con varias modificaciones desde la primera versión hasta la 6, la cual incluye herramientas (*toolboxes*) con funciones trigonométricas, estadísticas, financieras, etc.

MATLAB® es un software especializado de programación matemática idóneo para la investigación científica y para diversas aplicaciones, pues es un lenguaje de alto nivel para la computación técnica, ya que integra cálculos de computación, visualización y programación en un medio ambiente de fácil uso, donde los problemas y las soluciones se expresan con una notación matemática familiar. MATLAB frecuentemente emplea matrices, ya que es el

lenguaje de programación que utiliza como un híbrido entre lenguaje C y la orientación en matrices.

Las últimas versiones de MATLAB dependen de una serie de subprogramas preestablecidos denominados *toolbox*, los cuales varían dependiendo de su uso y abarcan tópicos como los financieros, estadísticos, bases de datos, procesamiento de señales y los modelos GARCH para las series de tiempo. MATLAB es el software idóneo cuando se estudia y se trabaja con análisis numérico y métodos numéricos y cálculo diferencial e integral y sus aplicaciones pueden suponer varios usos cuando se quiere estudiar áreas de la matemática en un sentido numérico

no analítico, como funciones desde su perspectiva gráfica.

En estadística y probabilidad la utilización de MATLAB es impresionante debido al toolbox de estadística. En ésta área es posible estudiar toda la faceta estadística de un problema común, desde el planteamiento del problema hasta el modelaje y el pronóstico. Se pueden hacer estudios completos de análisis de regresión contando toda la faceta de verificación de errores. Se pueden plantear y simular todos o la mayoría de los modelos estocásticos como las cadenas de Markov, los procesos Poisson, movimientos Brownianos, etcétera.

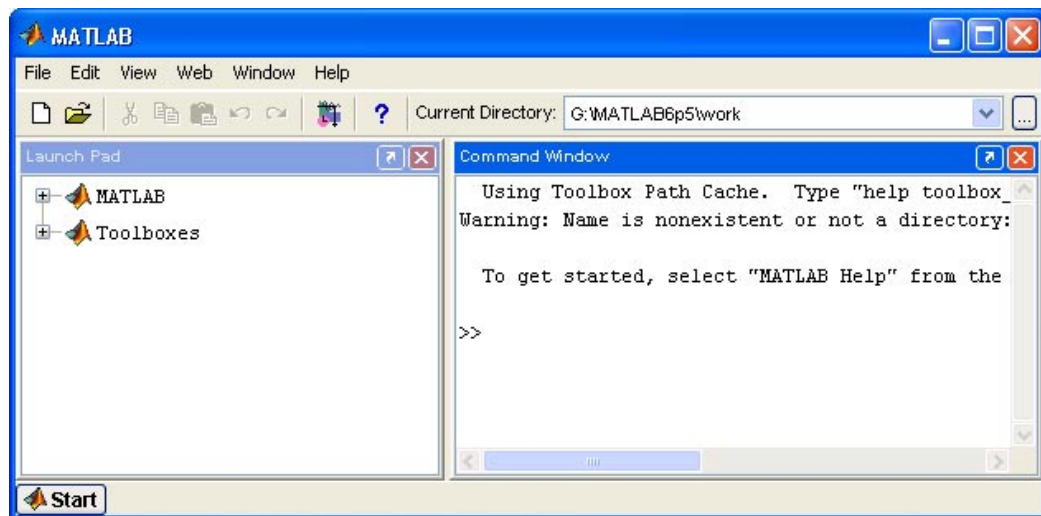
Debido a sus múltiples aplicaciones, MATLAB es un software que se emplea con frecuencia

en muchos ámbitos, en especial porque puede recurrir a otros paquetes para obtener datos o funciones, como:

Tabla 1 Programa que pueden interactuar con Matlab

Programa	Función / aplicación
Excel	base de datos
Económica	base de datos financieros
SPSS	estadística
Statistica	estadística
Gauss	econometría
Maple y	matemáticas analíticas
Matemática	
MetaStock	finanzas
Eviews	econometría

Lo primero que aparece al activar Matlab para Windows es la pantalla de visualización del programa.

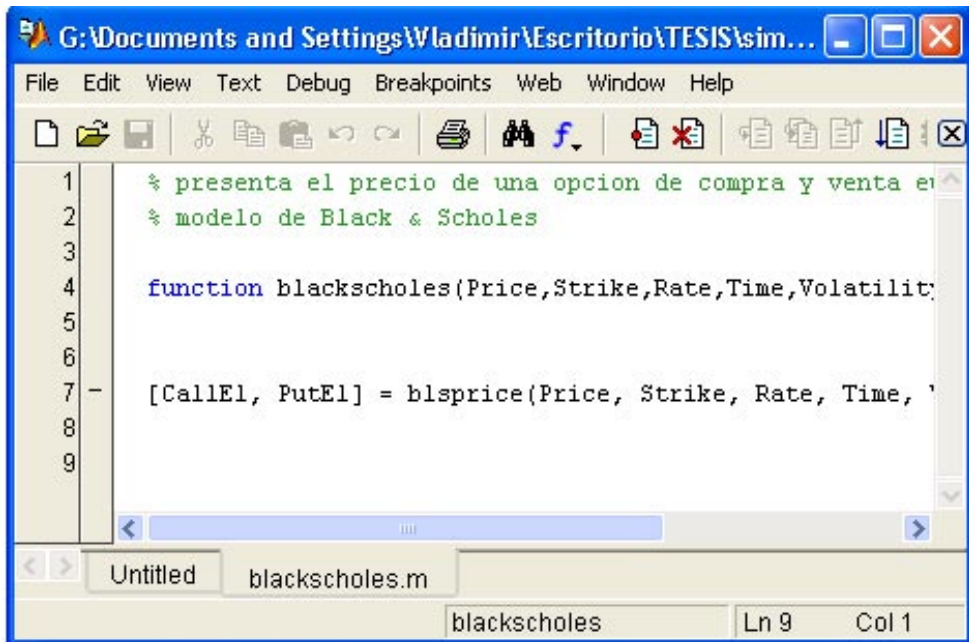


El *Launch Pad* es donde se presentan los *Toolboxes* y los demos que contiene MATLAB. La cantidad de herramientas y demostraciones puede cambiar según la versión. En éste lugar también se encuentra la ayuda para las herramientas. El *CommandWindow* es donde se ejecutan los programas y se presentan los resultados de los programas.

La línea de comandos tiene las mismas funciones que en otros programas de Windows. *Current*

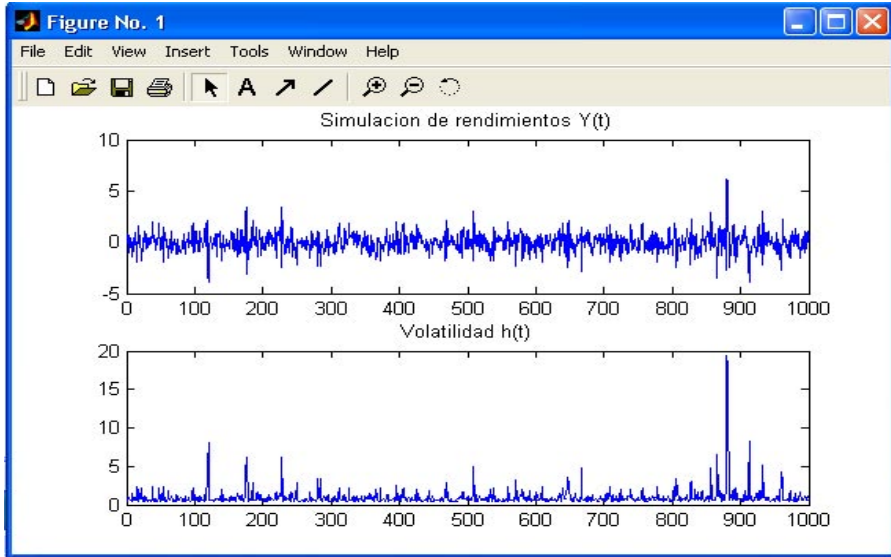
directory hace mención al directorio que MATLAB utiliza y una de las dificultades técnicas es que cuando se ejecuta un programa, todas las partes del programa deberán estar guardadas en un mismo directorio. Todos estos datos deberán estar guardados en el mismo directorio en el cual el programa principal está guardado.

Los programas en Matlab se llaman funciones (function) y se pueden escribir en una ventana aparte (M-File).



La parte superior indica el directorio donde corre el programa, en este caso es: G:\DocumentandSettings\Vladimir\Escritorio\

TESIS\Simulations. De igual forma hay una tercera visualización diferente que es la que se refiere a cualquier gráfica desplegada.



Funciones básicas

Lo único que se tiene que hacer para crear un programa en MATLAB es escribir *function* y el nombre del programa. Si está bien escrito *function* se escribirá automáticamente en azul.

Los comentarios que no se procesen en el programa deben llevar el signo % que se escribe automáticamente en verde.

Declaración de funciones

El signo >> se escribe automáticamente en el *prompt* de MATLAB (entiéndase por *prompt* la ventana de comandos). Antes que nada recuérdese que cada una de las funciones de MATLAB está orientada a ser parte de matrices. Es decir,

>> x = 1; el vector x (de dimensión 1x1) se le asigna el valor 1.

En MATLAB se escribe “;” (punto y coma) como indicación de que no se quiere desplegar este resultado. Es decir:

```
>> x = 1
x =
    1
>> x = 1;
```

1 MATLAB despliega
MATLAB no despliega nada

El signo ‘ es una indicación para que MATLAB calcule la transpuesta de una matriz. Para todos aquellos lectores que no estén familiarizados con los términos matriciales, una operación transpuesta significa que los

renglones de una matriz serán intercambiados por las columnas de la misma.

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 5 & 6 & 7 & 8 \\ 9 & 10 & 11 & 12 \\ 13 & 14 & 15 & 16 \end{pmatrix}^t = \begin{pmatrix} 1 & 5 & 9 & 13 \\ 2 & 6 & 10 & 14 \\ 3 & 7 & 11 & 15 \\ 4 & 8 & 12 & 16 \end{pmatrix}$$

```
>> x = [1,2,3,4;5,6,7,8;9,10,11,12;13,14,15,16];
```

```
>> x'
x =
     1     5     9    13
     2     6    10    14
     3     7    11    15
     4     8    12    16
```

Las siguientes funciones se pueden ejemplificar con la matriz

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}$$

```
>> x=(1,2;3,4);
% definición de la matriz x
>> y = x(2,1)          % la función y se
define como la entrada (2,1) de la matriz x
y =
     3
```

Se debe entender que en (a,b) “a” representa al renglón y “b” a las columnas. En el ejemplo a = 2 y b =1.

```
>> z = x(2,2)          >> z = x(1,1)
z =
     4                  z =
     1
```

```
>> A = x(:,1) % la función A se define
como todo el vector perteneciente a la %primera
columna.
```

```
A =
     1
     5
     9
```

```
>> B = x(1,:) % la función B se define
como todo el vector perteneciente al %primer
renglón.
```

```
B =
     1     2
```

Es fácil suponer que pasa con >> C = x(:,2) y >>D=x(2,:)

Dos funciones útiles al programar son la dimensión de vectores y matrices. Si se necesita conocer los datos de la matriz X:

```
>> y = length(X)      % Devuelve el
número de elementos en el vector de X
y =
    1000
>> z = size(X)        % Devuelve la
dimensión del espacio vectorial de la matriz
z =
    1000    2000
```

Para un mejor entendimiento se debe repasar la teoría elemental de matrices. Por ejemplo, un espacio vectorial (a partir del cual se define una matriz) solo está definida para la suma y multiplicación:

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} e & f \\ g & h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a+e & b+f \\ c+g & d+h \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} e & f \\ g & h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ae+bg & af+bh \\ ce+dg & cf+dh \end{pmatrix}$$

```
>> x = [1,2;3,4];
>> x = [1,2;3,4];
>> y = [4,3;2,1];
>> y = [4,3;2,1];
>> x*y
>> x.*y
ans
ans
```

Este punto es importante entenderlo y se utiliza mucho cuando se trabaja con problemas en donde existen muestreos estadísticos en la programación. Existen otros tipos de funciones matriciales. Se hace un pequeño resumen a continuación. Se define una matriz X cuadrada.

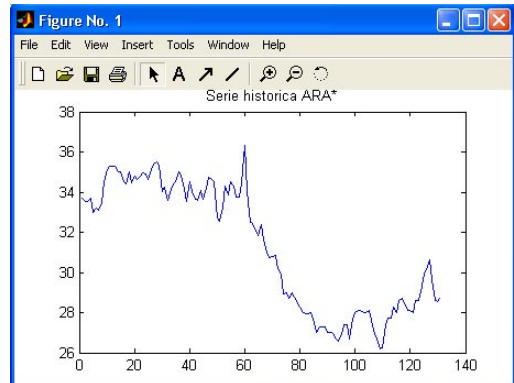
```
>> inv(X);
% despliega la inversa de la matriz X
>> det(X);
% despliega el determinante de la matriz X
>> zeros(m,n)
% despliega una matriz nula de m x n
>> eye(n)
% despliega una matriz identidad de dimensión n
```

Gráficas

En MATLAB es posible realizar todo tipo de graficas. Sin embargo, la idea es la misma y solo cambiará una función, la cual definirá el tipo de graficas que se desea. MATLAB es un software que está programado desde una perspectiva matricial. Cuando se grafica no es la excepción. En este programa es posible presentar en una misma pantalla la cantidad de graficas que se quieran; sin embargo, la forma de hacerlo es pensar en que cada una de las gráficas será la información que exista en cada una de las entradas de la matriz que se define. Por ejemplo, sea p = precio, r = rendimiento y v = volumen, entonces

```
>> plot(accion)
```

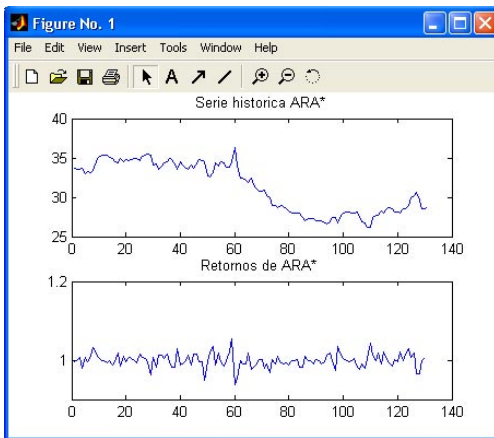
Y MATLAB desplegará



Para graficar dos variables, en dos gráficas simultáneas se escriben:

```
>> subplot(2,1,1), plot(accion)
>> subplot(2,1,2), plot(rendimiento)
```


Si el código se escribe en el M-File >> no aparece. subplot es la indicación para desplegar varias gráficas. Subplot(m,n,x) significa que la figura tiene una matriz m y n de x graficas. subplot(2,1,1) define la gráfica del precio de la acción que irá en la matriz de 2 x 1 en el primer lugar y subplot(2,1,2) define la gráfica del rendimiento que irá en el segundo espacio.

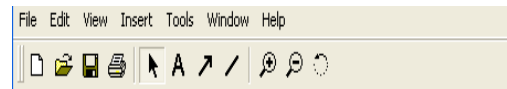


figure() sirve para desplegar varias hojas de gráficas. Por ejemplo:

```
figure(1)
plot(accion)
title('accion')
figure(2)
plot(rendimiento)
title('rendimiento')
```

MATLAB desplegará dos pantallas de gráficas. La primera será del precio de la acción y la segunda pantalla del rendimiento de éste. Title es la función para agregar un título a la gráfica.

Existen muchas funciones especiales que dan presentación a la visualización de las gráficas y cada función puede llamarse en el código del programa o realizarse directamente en la barra de herramientas de las gráficas. Es decir en



Referencias

MathWorks (2000), *Matlab Manual version 6*, MathWorks Publishing, Natick, MA 01760-2098, USA

MathWorks (2000), *Using MATLAB Graphics version 6*, MathWorks Publishing, Natick, MA 01760-2098, USA

Rodríguez C. (2000), *Manual introductorio de MATLAB*, México, DF, http://sistemas.fciencias.unam.mx/~cvrc/files/Manual_de_Matlab.doc

Moore H. (2005), *MATLAB para ingenieros ESources*, Prentice Hall,

The background is an abstract composition of various shades of green and blue. It features several horizontal bands of semi-transparent dots, some of which are blurred to create a bokeh effect. There are also several thin, flowing lines that sweep across the frame, giving it a sense of movement and depth. The overall aesthetic is clean, modern, and professional.

Contribuciones orales

NANOCOMPOSITO DE ZnO/POLIPIRROL FOTOACTIVO EN LUZ VISIBLE PARA LA DEGRADACIÓN DE COLORANTES

Blanca E. Castillo-Reyes¹, Víctor M. Ovando-Medina², Jaime E.A. Orozco², Hugo Martínez-Gutiérrez³, Pedro A. Alonso-Davila¹

¹ Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de San Luis Potosí. Av. Dr. Manuel Nava No.6, Zona Universitaria, San Luis Potosí, S.L.P. 78240, México. Email: becr_iq@yahoo.com.mx

² Ingeniería Química, Coordinación Académica Región Altiplano (COARA) Universidad Autónoma de San Luis Potosí, carretera a Cedral kilómetro 5+600, San José de las Trojes, Matehuala, San Luis Potosí 78700, México.

³ Centro de Nanociencias y Micro y Nanotecnologías, Instituto Politécnico Nacional (IPN), Luis Enrique Erro S/N, D.F. 07738, México.

Introducción

El ZnO es considerado un fotocatalizador de bajo costo con gran estabilidad física y química, alta capacidad de oxidación y disponibilidad [1]. Sin embargo, debido a su valor de energía de ancho de brecha (3.25 eV) es fotoactivo sólo bajo la irradiación de luz UV que es dañina y costosa [2]. Se ha demostrado que las partículas de ZnO con morfología en escala nanométrica presentan mejor rendimiento debido a su gran superficie, corta longitud de difusión de portadores y baja reflectividad [3].

Métodos

Síntesis del nanocomposito ZnO/PPy

En la metodología reportada para la síntesis de ZnO[4], la microemulsión fue compuesta

por una solución 35.5% Zn(NO₃)₂ al 0.7 M, 40.5% tensoactivos dioctil sulfosuccinato de sodio (AOT) y dodecilsulfato sódico (SDS) relación 2/1 y 27% tolueno, relaciones en peso a temperatura de 70 ° C, y con agitación magnética. La dosificación de solución acuosa de NaOH (41.6 en peso %) se realizó con una bomba de infusión, el tiempo de dosificación fue de 15 min. y la reacción se dejó proceder durante 30 min. Las nanopartículas fueron precipitadas con acetona. Después, el precipitado se lavó siete veces una solución de agua-acetona (80/20) y secó a 70 ° C para obtener nanopartículas de ZnO.

La polimerización del pirrol en nanopartículas de ZnO se realizó adicionando 0.8 gr de

tensoactivo SDS en 30 g de agua en un vial de 60 ml. Posteriormente, se añadieron 250 mg de nanopartículas de ZnO y se ultrasónico durante 10 min. Se añadió 0,4 g de pirrol y se dejó homogeneizar bajo agitación magnética durante 2 h. Posteriormente se disolvió Persulfato de amonio en 10 ml de agua y se añadió a la mezcla de reacción para iniciar la polimerización de pirrol durante 1 h. La mezcla de reacción se vertió en un matraz y se adicionó metanol para precipitar las nanopartículas ZnO/PPy. Posteriormente se lavó con un exceso de metanol y se decantó para ser secada a 60 °C en un horno durante 24 h. Las conversiones se determinaron gravimétricamente.

Pruebas de fotodegradación con azul de metileno

Los experimentos se llevaron a cabo en un reactor fotocatalítico de cuarzo con una lámpara de luz visible con intensidad de 50W (ver figura 1). Se establecieron diferentes cargas de ZnO/PPy de 136, 241 y 542 mg fueron bien dispersados en 150 ml de una solución acuosa de azul de metileno a 20 mg/L con agitación magnética. Las concentraciones de azul de metileno se variaron de 20 a 100 mg/L. Las soluciones fueron expuestas a una fuente de luz visible de una lámpara halógena con filamento de tungsteno. Las muestras de 0,5 ml se retiraron en diferentes momentos y se centrifugaron para determinar espectros UV/vis y la absorbancia a una longitud de onda de 664 nm para calcular las conceaciones.

Resultados

La Figura 2 muestra los espectros FTIR de las nanopartículas de ZnO (a) y del compuesto de ZnO/PPy (b). Se puede observar a partir de la curva A, que la señal típica de la interacción de ZnO en el modo de estiramiento es cerca de 893 cm^{-1} [5, 6]. La presencia de PPy se puede observar en la curva b, donde las señales más importantes están presentes: la banda a 1560 cm^{-1} y una banda débil a 1470 cm^{-1} , se asignan a la vibración de estiramiento de C=C y C-C en el anillo de pirrol; el pico a 1075 puede atribuirse a C-N vibraciones de estiramiento. Pico correspondiente a ZnO en la curva b es casi ausente, lo que indica que las nanopartículas de ZnO fueron bien recubiertas con PPy.

En las pruebas de fotodegradación, la figura 3 muestra el efecto de la concentración inicial de azul de metileno en la cinética de la fotodegradación utilizando ZnO/PPy y la comparación con las nanopartículas de ZnO puro (cuadrados vacíos) a 20 mg/L de azul de metileno. Se puede observar que para las nanopartículas de ZnO puro se logra sólo 25.3% de eficacia después de 60 min de irradiación de luz visible, en comparación con 95.2% del ZnO/PPy a la misma concentración de colorante. Se observó que el aumento de la concentración de azul de metileno, disminuye la eficiencia de degradación (82.1% y 76.2% para 50 y 100 mg/L de concentraciones de colorante, respec-

tivamente). El orden de reacción se puede encontrar a partir de una representación logarítmica de C/C_0 como una función del tiempo, donde C y C_0 son la concentración en un momento dado y la concentración inicial de azul de metileno en la solución, respectivamente. La Figura 4 muestra un gráfico de $\ln C/C_0$ en función del tiempo, en el que se puede observar que todas las fotodegradaciones siguieron una cinética de pseudo primer orden. La constante de velocidad de reacción (k) de ZnO/PPy era 23 veces más alto ($k = 0.055 \text{ min}^{-1}$) que el de las nanopartículas de ZnO puro ($k = 0.0024 \text{ min}^{-1}$), que mostró el mejor rendimiento de ZnO/PPy.

Conclusiones

Las nanopartículas de ZnO se sintetizaron con alto rendimiento mediante precipitación a partir de una microemulsión bicontinua y recubiertas con PPy por oxidación química para obtener un nanocompuesto de ZnO/PPy. Se observó que las nanopartículas de ZnO fueron totalmente inmersas en una matriz PPy y mostraron fotoactividad en la región de luz visible y aumento en la conductividad. El rendimiento fotocatalítico del nanocompuesto se demostró en la degradación del colorante azul de metileno bajo irradiación de luz visible, que mostró eficiencias de hasta el 95.2% después de 60 minutos de reacción en un mecanismo de pseudo primer orden.

Referencias

1. Rajbongshi B.M., Ramchiary A., Jha B.M. and Samdarshi S.K. (2014) *J Mater Sci: Mater Electron* 25:2969–2973.
2. Wu T., Lin T., Zhao J., Hidaka H. and Serpone N. (1999) *Environ. Sci. Technol.* 33:1379-1387.
3. Zhang M., Li Y.B., Delaunay J.J. (2012) *Nanoscale* 4:1509.
4. Romo L.E., Saade H., Puente B., López M.L., Betancourt R. and López R.G. (2011) *Journal of Nanomaterials*. Doi:10.1155/2011/145963.
5. Barkade S.S., Pinjari D.V., Singh A.K., Gogate P.R., Naik J.B., Sonawane S.H., Ashokkumar M. and Pandit A.B. (2013) *Ind. Eng. Chem. Res.* 52:7704–7712.
6. Batool A., Kanwal F., Imran M., Jamil T. and Siddiqi S.A. (2012) *Synthetic Metals*, 161: 2753–2758.

Tablas y Figuras

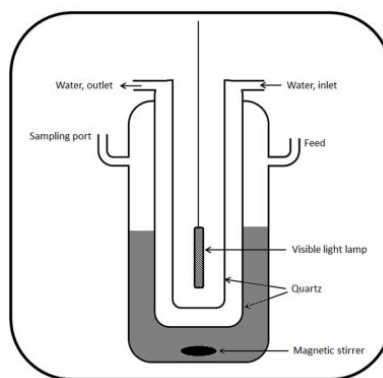


Figura 1. Esquema del reactor fotocatalítico

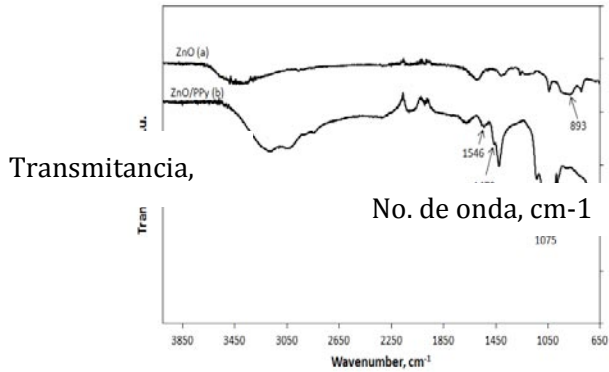


Figura 2. FTIR del ZnO puro (a) y de las nanopartículas de ZnO/PPy (b).

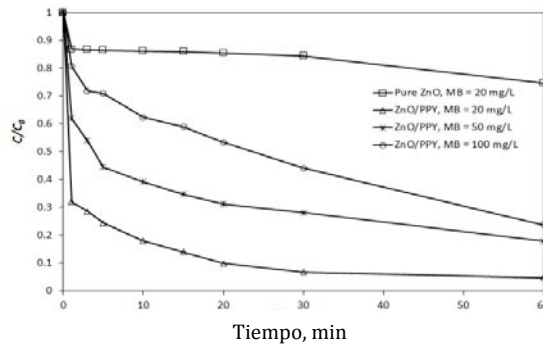


Figura 3. Cinética de fotodegradación del colorante azul de metileno bajo irradiación de luz visible utilizando nanopartículas de ZnO puro y el nanocompuesto de ZnO/PPy a diferentes concentraciones de azul de metileno.

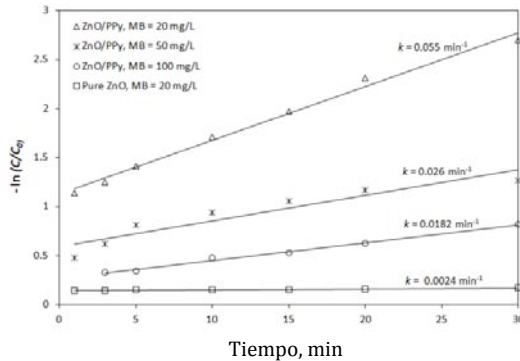


Figura 4. $\ln C/C_0$ como una función del tiempo a través de la fotodegradación del colorante azul de metileno bajo irradiación de luz visible usando nanopartículas de ZnO puro y ZnO / PPy a diferentes concentraciones de colorante.

CUANTIFICACIÓN DE SOLUTOS COMPATIBLES PRESENTES EN BACTERIAS HALÓFILAS MEDIANTE DMFS Y 1H qRMN

José de Jesús Olmos Espejel, Sandra I. Ramírez Jiménez, Josué Jesús Vázquez Herrera

Centro de Investigaciones Químicas, UAEM

olmos@uaem.mx

Introducción

Los extremófilos son organismos que se desarrollan en lugares con condiciones extremas de temperatura, pH, radiación, presión, salinidad, desecación, entre otras. Estos organismos se clasifican dependiendo del factor físico o geoquímico que requieren para desarrollarse⁽¹⁾. Los organismos halófilos son extremófilos capaces de habitar ambientes con elevados valores de salinidad, expresada en función del NaCl. Existen también los organismos halotolerantes que son aquellos que pueden crecer en ausencia o presencia de una moderada concentración de NaCl⁽²⁾.

La osmoadaptación de un microorganismo engloba el conjunto de manifestaciones fi-

siológicas y genéticas de adaptación que se hacen evidentes cuando éste se encuentra en ambientes donde la disponibilidad de agua es baja como ocurre en medios con altas cantidades de sales. Para lograr esta osmoadaptación, los microorganismos tienen que acumular osmolitos en su interior para balancear la presión osmótica externa producida por la alta concentración salina y evitar la pérdida de agua intracelular. Los osmolitos pueden ser iones inorgánicos o moléculas orgánicas, conocidas como solutos compatibles, que pueden tener o no carga. Los solutos compatibles no intervienen en el metabolismo de los microorganismos pero diversos estudios demuestran que moléculas como la ectoína, hidroxiectoína y betaína, entre otras, ayudan

a estabilizar la conformación funcional de las proteínas, favoreciendo la hidratación de estas macromoléculas⁽³⁾.

La mayoría de los trabajos reportados relativos a la identificación de los solutos compatibles presentes en bacterias halófilas, se basan en métodos de extracción clásicos como la extracción sólido-líquido. Este tipo de metodologías tienen algunos inconvenientes como son: (a) baja selectividad en la extracción, (b) tiempos de extracción largos, (c) baja sensibilidad en los métodos y (d) mayor consumo de reactivos, y por consiguiente, mayor generación de residuos⁽⁴⁾. La técnica de **Dispersión de Matriz en Fase Sólida (DMFS)** ha sido utilizada en las últimas décadas como una alternativa que disminuye considerablemente los inconvenientes de las técnicas clásicas de extracción. Se basa en el uso de adsorbentes sólidos que permiten realizar el proceso de extracción de los analitos y limpieza de los extractos en el mismo procedimiento⁽⁵⁾.

La **Resonancia Magnética Nuclear (RMN)** es una potente técnica que permite la identificación de moléculas que contienen núcleos magnéticamente activos y la cuantificación de los mismos cuando se utiliza en modo cuantitativo (qRMN) proporcionando diferentes ventajas con respecto a otras técnicas de análisis proporcionando análisis rápidos, elevada especificidad, robustez y linealidad. Debido a la abundancia de los protones en

la naturaleza, la técnica de ¹H qRMN es la más utilizada y una de sus principales ventajas es que no se necesitan estándares de la misma naturaleza química que los analitos de interés para realizar la cuantificación, ya que la relación entre la intensidad de la señal que proporciona un protón en una molécula es exactamente igual a la que otro protón produce en otra molécula de naturaleza química distinta⁽⁶⁾.

De esta forma, el objetivo principal del presente proyecto consistió en monitorear las concentraciones de los solutos compatibles ectoína, hidroxiectoína y betaína producidos por la bacteria halófila *Halomonas halodurans* y por la bacteria halotolerante *Bacillus pumilus* en cultivos expuestos a diferentes concentraciones de NaCl en sus medios utilizando las técnicas de DMFS y ¹H qRMN.

Metodología

Las muestras se obtuvieron a partir de cultivos mantenidos en agitación orbital a 150 rpm e incubados a 37 °C hasta que alcanzaron una D.O.₆₃₀ de entre 1.4 y 1.5. El volumen total de los cultivos fue de 500 mL. El medio nominal para *B. pumilus* se modificó con 0.171, 0.342 y 0.685 M de NaCl. El medio nominal para *H. halodurans* se modificó con 0.685, 1.370 y 2.055 M de NaCl. Una vez que se alcanzó la densidad óptica requerida, los cultivos fueron centrifugados a 4000 rpm a una temperatura de 4 °C descartando el sobrenadante. El sedimento se lavó con 10 mL

de disolución amortiguadora de fosfatos a pH de 7.4. La suspensión se volvió a centrifugar a 6000 rpm durante 15 min. El sedimento se colocó en portaobjetos de vidrio y se llevó a sequedad, hasta peso constante, colocándolo en una estufa a 60 °C.

Para la extracción de los solutos compatibles se tomaron 150 mg de biomasa seca y se homogenizaron con 300 mg de fase C18 en un mortero de ágata. La mezcla fue empacada en un cartucho de polipropileno y los solutos fueron recuperados haciendo pasar por el cartucho 10 mL de una mezcla CH₃OH:H₂O (1:1).

Para el análisis por ¹H qRMN, el extracto obtenido se llevó a sequedad en baño de agua a 70 °C. El residuo se disolvió en 0.5 mL de una disolución de biftalato de potasio de concentración 73.5 mM usando como disolvente D₂O que contenía 4,4-dimetil-4-silapentano-1-sulfonato (DSS) al 1% como referencia. La muestra se colocó en un tubo de RMN y se analizó en un equipo de 200 MHz para obtener los espectros de ¹H. Los desplazamientos químicos de las señales presentes en las muestras se compararon con los obtenidos en espectros de estándares de los solutos compatibles. Las concentraciones de los solutos identificados fueron calculadas comparando las áreas obtenidas para las señales de los solutos contra el área obtenida y la concentración conocida de biftalato, de acuerdo a la ecuación 1.

$$C_s = \left(\frac{\frac{A_s}{\#H_s}}{\frac{A_b}{\#H_b}} \right) * C_b * V * \frac{PM}{p} \dots \dots \dots (1)$$

Donde:
 C_s = concentración del soluto en la biomasa (μg mg⁻¹)
 A = área de la señal integrada del soluto (s) y del biftalato (b)
 #H = número de protones de las señales integradas del soluto (s) y del biftalato (b)
 C_b = concentración del biftalato (mM)
 V = volumen de la muestra en el tubo de RMN (mL)
 PM = peso molecular del soluto (mg mmol⁻¹)
 p = peso seco de la biomasa (mg)

Resultados

En la biomasa de *H. halodurans* se lograron identificar a los solutos compatibles betaína, ectoína e hidroxiectoína, mientras que en la biomasa de *B. pumilus* solo se logró identificar a la betaína. Como control se utilizaron muestras de biomasa de ambos microorganismos cultivados en su medio nominal en ausencia de NaCl. Los resultados se muestran en la figura 1. Se determinaron las concentraciones de cada uno de solutos compatibles identificados en las muestras cultivadas a diferentes concentraciones de NaCl. Los resultados promedio se presentan en la tabla 1. Para ambas bacterias se observa una correlación positiva entre la concentración de solutos acumulados en la biomasa y el porcentaje de NaCl adicionada al medio, evidenciada por el comportamiento lineal (r² ≥ 0.9829) observado. *B. pumilus* acumula una mayor concentración de betaína en comparación con *H. halodurans* lo cual

puede ser explicado por el hecho de que la segunda, además de betaína, acumula también ectoína e hidroxietoína para contrarrestar el estrés osmótico del medio.

Conclusiones

La bacteria halotolerante *B. pumilus* es capaz de acumular betaína para combatir la presencia de diferentes porcentajes de NaCl en el medio, mientras que la bacteria halófila *H. halodurans* es capaz de acumular betaína, ectoína e hidroxietoína. La producción de los solutos es proporcional a la concentración de NaCl en el medio.

Agradecimientos

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología

(CONACyT) por la beca posdoctoral otorgada a José de Jesús Olmos Espejel y por el apoyo a través del proyecto 105450.

Referencias

- 1) Rotschild, L., Mancinelli, R. *Nature* 409,1092-1101 (2001).
- 2) González-Hernández. J., Peña, A. *Rev. Latinoam. Microbiol.*44, 137-156 (2002).
- 3) Arakawa. T., Timasheff, S. *Biophys. J.* 47, 411-414 (1985).
- 4) Roberts, M. *Saline Systems* 1, 1-30 (2005).
- 5) Barker, S. 70, *J Biochem Biophys Methods* 151–162 (2007).
- 6) Pauli, G., Jaki, B. U., Lankin, D. C. *J. Nat. Prod.* 68, 133-149 (2005).

Tabla 1. Concentración de solutos compatibles recuperados de la biomasa de bacterias expuestas a distintas concentraciones de NaCl.

<i>Bacillus pumilus</i>		<i>Halomonas halodurans</i>			
[NaCl] mol/L	[Betaína] µg mg ⁻¹	[NaCl] mol/L	[Betaína] µg mg ⁻¹	[Ectoína] µg mg ⁻¹	[Hidroxietoína] µg mg ⁻¹
0.171	5.57	0.685	13.98	6.69	N.D.
0.342	15.01	1.370	15.82	12.81	
0.685	22.60	2.055	18.29	16.66	12.43
r ² (a)	0.9961	r ² (a)	0.9932	0.9829	21.00
D. E. R. % (b)	2.08-7.48	D. E. R. % (b)	4.92-7.62	9.20-11.70	0.9889
					9.24-13.57

(a) Obtenido al graficar la variación de la concentración de solutos en función de la concentración de NaCl en el medio. (b) Intervalo de valores obtenidos a partir de la desviación estándar y el promedio obtenido de la medición de 3 muestras diferente para cada porcentaje de NaCl.

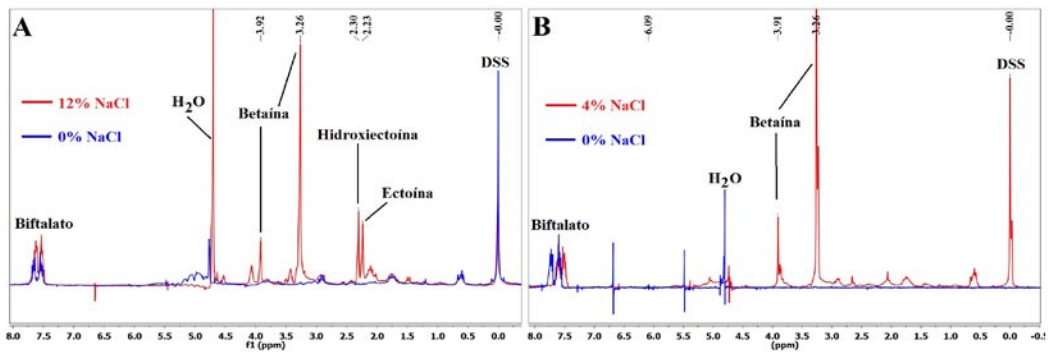


Figura 1. Espectros de ^1H RMN obtenidos de extractos provenientes de muestras de biomasa de (A) *H. halodurans* y (B) *B. pumilus* expuestas a diferentes porcentajes de NaCl en el medio.

CINÉTICA DE LA POLIMERIZACIÓN EN EMULSIÓN DE ESTIRENO EN PRESENCIA DE CINCO SURFACTANTES REACTIVOS

Ma. Gpe. Cinthia López-Palacios¹, Víctor M. Ovando-Medina¹

¹Departamento 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, México 78700: cinthialopezpalacios@alumnos.uaslp.edu.mx

Introducción

Los surfactantes se encuentran entre los compuestos químicos más versátiles y ampliamente utilizados de la industria. Gracias a sus propiedades, otra forma de llamarlos es anfífilos ya que tienen una doble afinidad, la cual se define desde el punto de vista físico-químico como una doble característica a la vez polar y apolar [1]. Los surfactantes polimerizables o también llamados “Surfactantes reactivos”, tienen propiedades características especiales además de las que los surfactantes convencionales tienen. El interés por los surfactantes polimerizables se origina en el hecho de que puede ser necesario usar surfactantes en alguna etapa de una operación, pero innecesario, o incluso no deseado, en una etapa

posterior [2]. Estos se han planteado como una alternativa que permite el desarrollo de materiales poliméricos con reacciones híbridas a escala nanométrica y con geometrías estables y definidas [3]. En los polímeros formadores de películas, la propiedad más interesante, sin embargo, es la resistencia a la absorción de agua comparada con los surfactantes convencionales [4]. En este trabajo se reporta el efecto de cinco surfactantes reactivos: Hitenol BC-10, Hitenol BC-30, Noigen RN-20, Noigen RN-30 y Noigen RN-50 durante la polimerización en emulsión de estireno sobre la cinética de reacción.

Métodos

Las polimerizaciones por lotes se llevaron a

cabo en un reactor esférico de vidrio enchaquetado de 250 mL de capacidad, con dos bocas, y con válvula de muestreo, al cual se le adaptó un condensador en la boca principal por el cual se hizo pasar agua fría a una temperatura aproximada de 2 °C, la cual fue suministrada mediante un recirculador (véase la figura 1, número 8), además por la chaqueta se hizo pasar agua caliente a 60 °C, la cual fue abastecida por otro recirculador (véase la figura 1, número 4). Por la segunda boca del reactor se burbujeó argón durante toda la reacción el cual fue previamente purificado pasándolo a través de un filtro para oxígeno (véase la figura 1, número 2), el flujo se reguló por una válvula. El reactor se cargó al principio con agua destilada y uno de los surfactantes reactivos utilizados, los cuales se dejaron en presencia de argón, empleando agitación magnética durante una hora, después de la cual se adicionó el iniciador (persulfato de amonio, APS) por la boca secundaria con una jeringa y se encendieron los recirculadores, los cuales no fueron apagados hasta el final de la reacción. Veinte minutos después de la adición del iniciador, se inyectó el monómero (estireno, previamente destilado) para dar inicio a la polimerización y se tomaron muestras a diferentes intervalos de tiempo. Todas las reacciones se llevaron a cabo a una temperatura de 60 °C, las condiciones son esencialmente las mismas con la única variación de que en cada una se utilizó un diferente surfactante reactivo (véase la tabla 1). Las conversiones de reacción se realizaron por gravimetría.

Resultados

En la figura 2 se muestran las conversiones durante toda la reacción de polimerización de estireno, para cada uno de los cinco surfactantes reactivos, en ella puede observarse que se obtuvieron conversiones altas para los surfactantes Hitenol BC10 (97%), Hitenol BC30 (98%), Noigen RN20 (99%), Noigen RN30 (99%), sin embargo cuando se utilizó el surfactante Noigen RN50 sólo se obtuvo un 80% de conversión. Con relación al tiempo podemos observar que para los 15 minutos de reacción ya se han alcanzado conversiones por arriba del 90%.

Conclusiones

Como pudo observarse las reacciones llevadas a cabo con Hitenol tienen una cinética de reacción muy parecida, para la reacción 3 que fue la del Noigen RN-50 se obtuvo una conversión final de solo 80% que es bastante baja en comparación con las reacciones de resto de surfactantes reactivos.

Referencias

1. Jean-Louis Salager, Alvaro Fernandez, (2004). *Surfactantes*, Venezuela, Universidad de los Andes.
2. K. Holmberg, B. Jonsson, B. Kronberg, B. Lindman, (2003) *Surfactants and Polymers in Solution*, 2nd edition, John Wiley & Sons, Chichester.
3. Luis A. Rios, David Ocampo, *Efecto de Surfactantes Polimerizables en la Distribución de Tamaño de Partícula, pH, Viscosidad, Con-*

tenidos de Sólidos y de Monómero Residual de una Resina Estireno-butilacrilato, Polímeros, vol. 23, n. 3, p. 352-357, 2013.

4. Rashmi Mandavi, (2011). *Kinetic Stud-*

ies of Some Esters and Amides in Presence of Micelles, Doctor of Philosophy Thesis Chemistry, Bhilai Institute of Technology, Durg, CG, India.

Figuras y tablas

Tabla 1. Condiciones experimentales para las reacciones tipo Batch.

Reacción	Surfactante	Agua, g	Surfactante, g	Monómero, g	Iniciador, g
1	NRN20	150	3	6.12	0.1224
2	NRN30	150	3	6.12	0.1224
3	NRN50	150	3	6.12	0.1224
4	HBC10	150	3	6.12	0.1224
5	HBC30	150	3	6.12	0.1224

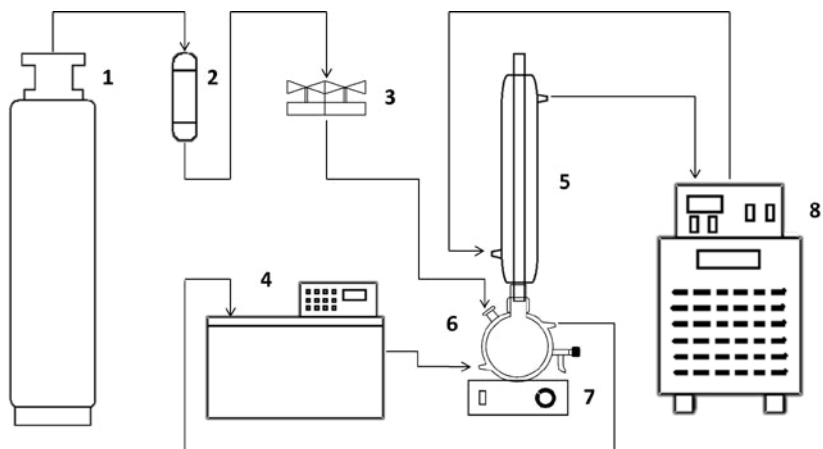


Figura 1. Diagrama de flujo de las polimerizaciones por lotes o Batch, dónde: 1. Tanque de argón; 2. Columna purificadora de argón; 3. Válvula de flujo de argón; 4. Recirculador de agua caliente; 5. Condensador Liebig; 6. Reactor esférico de vidrio encaquetado; 7. Agitador magnético; 8. Recirculador de agua fría.

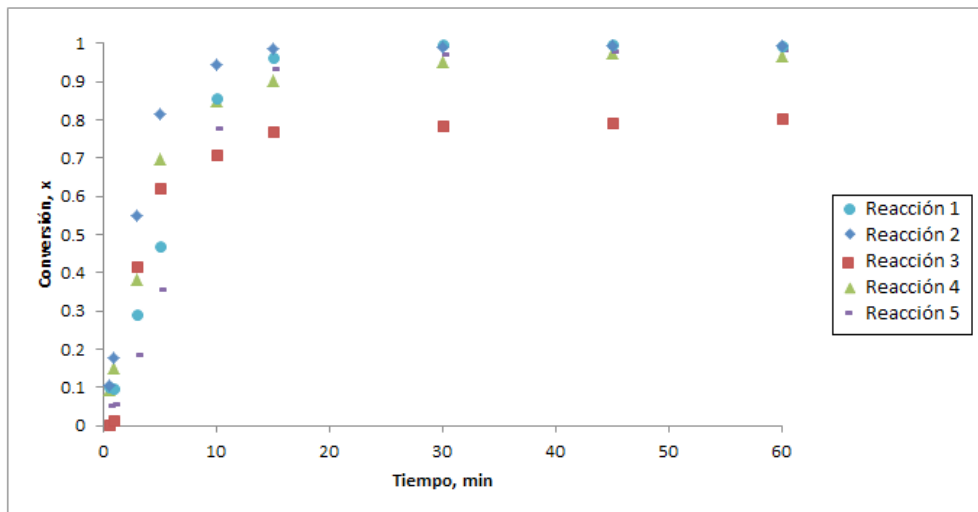


Figura 2. Conversiones de las polimerizaciones de estireno para los cinco surfactantes reactivos.

PRODUCCIÓN DE H₂ Y CH₄ EN UN PROCESO SECUENCIAL A PARTIR DE RESIDUOS ORGÁNICOS MINIMIZANDO EL USO DE AGUA

Arisbel Angulo Cuatepotzo¹, José Antonio Guevara García¹, Virginia Montiel Corona²

¹Laboratorio de Investigación en Bioinorgánica y Biotecnología (LIByB).

Fac. de Ciencias Básicas, Ingeniería y Tecnología. Universidad Autónoma de Tlaxcala

²Doctorado en Biotecnología, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa.

e-mail: zeltzin24.vm@gmail.com

Introducción

La investigación en fuentes alternativas de energía ha tomado gran importancia en años recientes debido a los problemas de contaminación ambiental derivados de la utilización de combustibles fósiles, a la escasez de estos y al aumento de su precio (Kapdan y Kargi, 2006).

Dentro de las energías alternativas el H₂ es una de las mejores opciones por ser un buen vector energético y porque durante su utilización no se emite CO₂ (Liu et al., 2013). Los métodos biológicos nos ofrecen alternativas para producirlo a partir biomasa residual con reducción en las emisiones de CO₂. Una fuente de biomasa susceptible de utilizarse en

la producción de H₂ son los residuos orgánicos municipales (Kothary et al. 2010) que se producen en grandes cantidades en nuestro país y que representan un problema ambiental. La utilización de estos residuos para la producción de energía nos brinda la oportunidad de dar solución al tratamiento de residuos.

La fermentación oscura y la foto-fermentación son procesos biológicos para producir H₂ a partir de biomasa y para mejorar significativa del rendimiento de H₂ es necesario acoplarlos en un proceso secuencial (Guwy et al., 2011). Sin embargo, y en casos reales este rendimiento aún dista del valor máximo teórico de 12 moles H₂/mol glucosa (Kim y Kim, 2013), debido a que al final de los procesos queda una canti-

dad de biomasa residual que todavía contiene energía, así que para mejorar las eficiencias energéticas y remociones de materia orgánica son necesarias etapas adicionales y una de las más eficientes y fácil de implementar es la producción de metano.

Uno de los puntos clave a considerar en estos procesos es el agua que se tiene que emplear para diluir la materia orgánica, lo más conveniente es emplear el mínimo de agua potable y para ello el reutilizar los efluentes gastados de alguna de las últimas etapas para diluir la carga orgánica de la etapa inicial puede ayudar con este objetivo.

Es así que para este trabajo se ha planteado integrar los procesos de fermentación oscura y fermentación luminosa para producir hidrógeno con la metanogénesis a fin de maximizar la eficiencia energética y remoción de materia orgánica minimizando el uso de agua.

Métodos

En la figura 1 se muestra el diagrama que describe el proceso que se llevará a cabo, en la primera etapa se llevará a cabo la optimización de la fermentación oscura, posteriormente los extractos acidogénicos producidos ricos en ácidos grasos volátiles se utilizaran como sustrato para la fermentación luminosa y finalmente los sólidos residuales de la fermentación oscura y una parte del efluente líquido de la fermentación luminosa se emplearán

para la producción de metano. El efluente resultante de la metanogénesis y el resto de la fermentación luminosa se emplearán como diluyentes en un nuevo ciclo de producción de H₂ en la fermentación oscura.

Para el proceso de fermentación oscura se emplearan residuos de cocina, un inóculo proveniente de la planta de tratamiento de aguas residuales de la UAM-I (al cual se le dará un tratamiento térmico) y cascaron de huevo como amortiguador de pH como lo ha reportado Montiel Corona et al. (2010). Los factores a optimizar en esta etapa serán tipo y mezcla de sustrato (residuos de frutas, verduras y comida), factor de dilución (1:1 y 1:2) y suplementación (con y sin hierro). De los factores a optimizar ya se han realizado los experimentos preliminares con respecto a tipo y mezcla de residuos.

En la fermentación luminosa se empleará el consorcio fotoheterótrofo IZT. Los ensayos se llevaron a cabo en lote en botellas de 120 ml a las que se les colocará extractos acidogénicos previamente diluidos, el pH se ajustará a 6.0. En condiciones anaerobias se inocularán con 5 mL de cultivo y se incubarán a 30-32 °C en una cámara iluminada a una intensidad luminosa de 3000 lux.

La metanogénesis se llevará a cabo con el mismo inóculo de la fermentación oscura pero sin tratamiento térmico, se probarán dos diluciones (1:1 y 1:2).

Las variables de respuesta serán producción de hidrógeno, metano, remoción de sólidos y concentración de ácidos grasos volátiles. Cada experimento se llevará a cabo por triplicado. La composición del biogás y extracto acidogénico se llevará a cabo por cromatografía de gases.

Resultados

Resultados preliminares

Los resultados que se presentan son relativos a la optimización de la fermentación oscura, específicamente sobre la selección del sustrato. En la figura 2 se presenta la producción de hidrógeno que se obtuvo al emplear como sustrato residuos de verduras, frutas y comida de manera individual y las mezclas frutas/verduras y frutas/verduras/comida. En ella se puede observar que la producción de hidrógeno al emplear residuos de verduras es la más baja, las producciones de hidrogeno más altas se obtienen al emplear residuos de frutas y comida. La causa de esto está en función del contenido de azúcares; los residuos de frutas tienen un contenido más alto de azúcares disponibles para las bacterias que las verduras y en el caso de los residuos de comida también hay una cantidad importante de carbohidratos solubles fácilmente asimilables por las bacterias debido a que en el proceso de cocción de los alimentos se lleva a cabo una hidrólisis parcial de los sólidos lo que facilita la liberación de azúcares que son altamente asimilables por las bacterias productoras de hidrógeno. En cuanto a las mezclas, la combinación de los tres sustratos

presenta una producción similar a la de frutas y comida, por lo que esta mezcla es un buen candidato para la producción de hidrógeno, adicionalmente es más representativa de los residuos domésticos que se generan.

La concentración de hidrógeno en el biogás se determinó por cromatografía de gases y esta fue del 50 %. El volumen de H₂ fue corregido a condiciones de presión y temperatura estándares. Durante el proceso no se detectó la producción de metano.

El perfil de ácidos grasos volátiles en el extracto acidogénico de la mezcla frutas/verduras/comida, indicó una concentración de 4.2 g/L de ácido acético, 0.3 g/L de propiónico y 7.7 g/L de butírico.

Perspectivas del trabajo

Con el proceso planteado en este trabajo se mejorará el rendimiento de hidrógeno al emplear la fermentación oscura y luminosa además de mejorar la eficiencia energética al implementar la producción de metano.

Este trabajo establece un proceso eficiente y económico para el tratamiento de residuos domésticos minimizando el uso de agua y prescindiendo del uso de reactivos químicos para controlar el pH.

Referencias

1. Kapdan, I. K., H., Kargi, F. *Enzyme and Microbial Technology*. 38, 569–582 (2006).

- Liu, X., Li, R. *Bioresource Technology* 146, 317–323 (2013).
- Kothari, R., Tyagi, V.V. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 14, 3164–3170 (2010).
- Guwy, A.J., Dinsdale, R.M. *Bioresource Technology* 102, 8534–8542 (2011).
- Kim, D. H., Kim, M. S. *Bioresource Technology*. 127, 267-274 (2013).
- Montiel Corona V., Sánchez Camarillo A.R. *PCTI*. 66 (2010). <http://pcti.mx>.

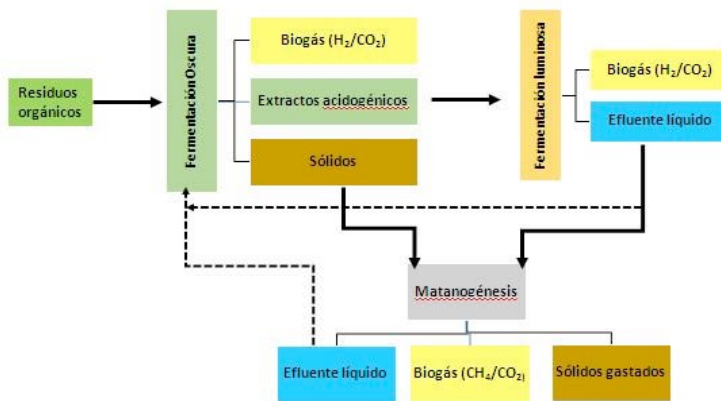


Figura 1. Proceso secuencial para la producción de hidrógeno y metano.

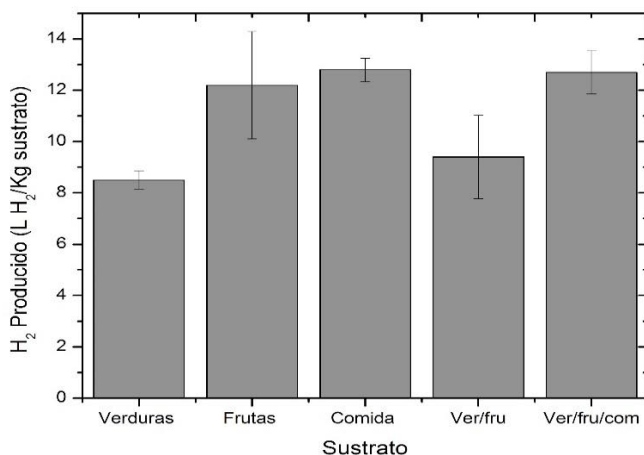


Figura 2. Producción acumulada de H₂ en el experimento selección de sustrato en la fermentación oscura.

APROVECHAMIENTO DE LA ENERGIA RESIDUAL DE PILAS USADAS TIPO “D”

Yecenia Moreno Macías, José Antonio Guevara-García

Laboratorio de Investigación en Bioinorgánica y Biotecnología (LIByB). Fac. de Cs. Básicas. Universidad Autónoma de Tlaxcala. Apizaco, Tlaxcala. México. E-mail: jaguevarag@hotmail.es

Introducción

En México una de las principales preocupaciones es la contaminación ambiental producida por la eliminación de pilas y baterías usadas; esto se debe al rápido crecimiento de la demanda de los equipos electrónicos portátiles que las utilizan como fuentes de energía y dado que en México no existe reciclaje de estos residuos se confinan en los rellenos sanitarios cientos de toneladas al año [1]. El problema en cuestión es importante no solo para México sino para muchos países. Un promedio de ocho pilas alcalinas desechables son consumidas por persona al año en los EE.UU. de acuerdo con la USEPA. Con una población de aproximadamente 305 millones de personas, esto se traduce en un estimado de 2440 millones de

pilas utilizadas y eliminadas por en los EE.UU. [2]. En México, la estimación más reciente es de 12 pilas desechables consumidas al año por habitante [3].

Por otro lado, el hidrógeno puede jugar un papel crucial dentro de una estrategia global de energía sostenible a nivel mundial para cumplir con el doble desafío del cambio climático y la disminución de los recursos de petróleo, ya que es tanto un combustible transportable y un almacenamiento de energía a largo plazo en las principales redes eléctricas y otros sistemas de suministro de energía estacionaria [4].

Este grupo de investigación reportó anteriormente la obtención de hidrógeno por

electrólisis de agua utilizando la energía residual de las pilas usadas tipo “AA”, como parte inicial de un proceso de reciclado, formando baterías para alimentar a un electrolizador y producir H_2 y O_2 . Los resultados mostraron un rendimiento de producción de H_2 de 2.35%, y una producción de corriente promedio por pila de 1321 mAh, que es más del 50% del reportado por el fabricante para una pila alcalina nueva [5].

En el presente trabajo se reporta el aprovechamiento de la energía residual de las pilas usadas tipo “D” por medio de electrolisis de agua, para producir hidrógeno.

Métodos

320 pilas usadas de tipo “D” obtenidas por donación del Zoológico “Africam Safari” en Valsequillo, Puebla, se clasificaron por marca. De cada una de las pilas se midió su voltaje en circuito abierto. Los valores de voltajes correspondientes a cada marca de pila se registraron en una hoja de cálculo. Se construyeron paneles (baterías) de pilas usadas de tipo “D”, utilizando bloques de unicel de 12.0cm X 5.5cm X 9.0 cm. A cada bloque se le practicaron 6 horadaciones, en dos filas de 3, de 3.0 cm de diámetro. En cada horadación se colocaron dos pilas tocándose con los polos opuestos alternando las terminales (+) y (-) que asoman fuera del panel. Las pilas se conectaron en serie, para sumar los voltajes, y luego cada batería se conectó a un electrolizador para la producción de H_2

(ver Figura 1). El volumen de hidrógeno se midió por el desplazamiento del émbolo de una jeringa de vidrio conectada a la salida del tubo en “U”. El volumen producido de hidrógeno se midió contra tiempo. Además, se anotó la corriente (mA), el voltaje (V) y la temperatura del experimento en cada momento y la presión atmosférica, para normalizar el volumen de hidrógeno.

Resultados

Un porcentaje de 35.6% de las pilas usadas tipo “D” analizadas tuvo un voltaje entre 1.4 y 1.5 V, y 96.25% de las pilas mostraron voltajes mayores a 1.2V (energía disponible para diversas aplicaciones) (ver Figura 2). El rendimiento de producción de hidrógeno fue de 2.35%, mientras que en la literatura se reportan rendimiento máximos del 12%, utilizando equipos especializados [6].

En la Figura 3(a), se observa el ajuste a la Ley de Ohm, $I=V/R$, de las baterías utilizadas. Las resistencias calculadas para todo el circuito se encuentran en el intervalo 10 – 20 ohms. En la Figura 3(b) se presentan las curvas mA vs. t y V vs. t, correspondientes a cada batería. Ambas curvas muestran un comportamiento exponencial de tipo $y=y_0 + A*\exp(R_0*x)$, con un ajuste caso exacto en el caso de las curvas V vs. t.

La energía calculada, cuantificada por el área bajo las curvas, permite establecer que estas baterías pueden alimentar equipos como el

electrolizador por lapsos de varios días antes de vaciar completamente la carga que poseen.

Conclusiones

Un porcentaje considerable de las pilas usadas tipo “D” (más del 90 %) tienen una energía utilizable considerable (alrededor del 50%), la distribución de frecuencias no sigue una distribución normal. Una posible explicación es que las pilas se utilizan en dispositivos de alta demanda de corriente en la mayoría de los casos. Esta energía puede ser recuperada y aprovechada en la misma forma que se utilizan paneles fotovoltaicos y constituir un ahorro de energía importante en una planta de reciclado. En la aplicación específica de producción de hidrógeno vía electrolítica, el rendimiento es bajo pero es posible optimizarse hasta en un 12%. Esto hace atractivo económicamente el reciclado de pilas y contribuye a diseñar un manejo sustentable de la energía y de los materiales contenidos en estos residuos.

Referencias

1. Guevara-García, J.A., Montiel-Corona, V. *J. Environmental Management*. 95, S154-S157 (2012).
2. Krekeler, M.P.S, Barret, H.A., Davis, R., et al. *Journal of Power Sources*. 203, 222-226 (2012).
3. Morales Chamorro, B. Tesis de Licenciatura en Química Industrial. Universidad Autónoma de Tlaxcala (2014).
4. Montiel Corona, V., Sánchez Camarillo, A.R., Guevara García, J.A. *Revista CiBlyT*. 3 (11), 35-42 (2009).
5. Guevara García, J.A, Morales Chamorro, B., González Contreras, B.M., Munive Rojas, M.A. *Chemistry Sciences*, 3(4), 35-37 (2013).
6. Gibson, T.L., Kelly, N.A. *Int. J. Hydrogen Ener.* 33, 5931-5940 (2008).



Figura 1. A la izquierda, baterías armadas por Y.M.M. utilizadas en la generación de H₂. A la derecha una batería alimentando al electrolizador

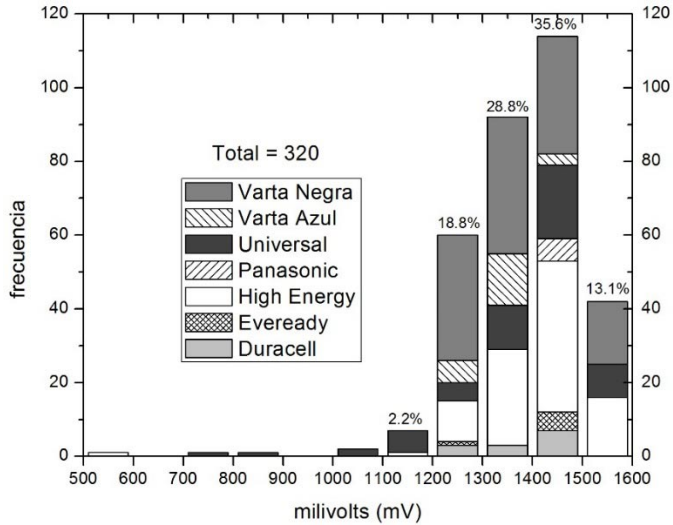


Figura 2. Histograma correspondiente al estadístico de las pilas usadas tipo "D" analizadas.

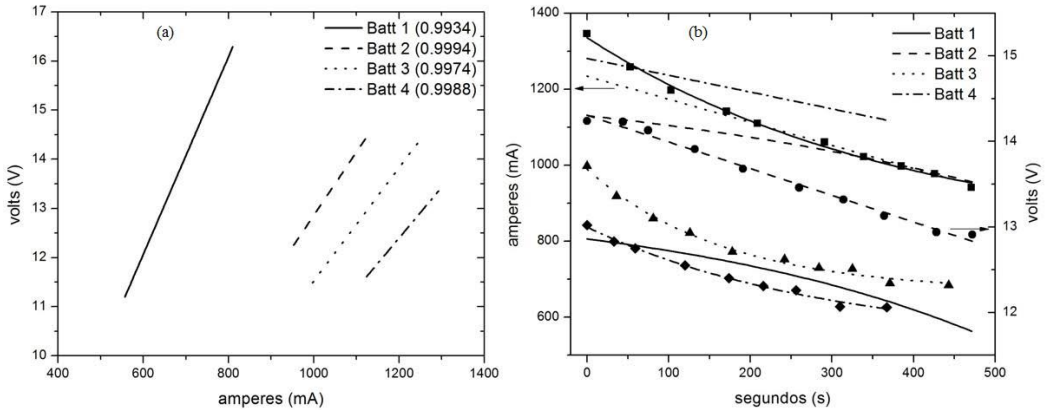


Figura 3. (a) Rectas de ajuste de cada batería a la ecuación de Ohm. Entre paréntesis se da el coeficiente de correlación. (b) Grafica de doble eje Y: en la izquierda se lee la corriente (mA) y en la derecha se lee el voltaje. En este último caso, además del código de línea, se representa cada punto experimental, para observar la bondad del ajuste.

SÍNTESIS DE NANO-HIDROGELES MEDIANTE POLIMERIZACIÓN EN MICROEMULSIÓN DE POLÍMEROS BIODEGRADABLES CON APLICACIÓN EN LA AGROINDUSTRIA

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

^aDepartamento de Ingeniería Química, COARA – Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Carretera a Cedral Km 5+600, San José de las Trojes, Matehuala, SLP, 78700, México
E-mail: ere92@live.com.mx

1. Introducción

El concepto de la polimerización en microemulsión apareció alrededor de 1980, como consecuencia de los numerosos estudios realizados 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].

2. Metodología

Síntesis de poli(vinil alcohol): Primero se sintetizó mediante una microemulsión directa el poli(acetato de vinilo), después se hidrolizó con una solución de hidróxido de sodio (NaOH) 1 N para obtener el polivinil alcohol. Para la obtención del poli(acetato de vinilo) se utilizó

agua destilada, sal sódica del sulfosuccinato de bis (2-etilhexilo) (AOT), persulfato de potasio (KPS) como iniciador y acetato de vinilo como monómero. La reacción se realizó en un reactor de vidrio con chaqueta de enfriamiento/calentamiento de 3 bocas y con capacidad de 1000 ml, empleando agitación mecánica de 300 rpm y una temperatura de 60 °C. Se agregó al reactor 345 g de agua, 1.1 g de AOT y 0.0966 g de KPS, se burbujeo por 60 minutos con argón. Posteriormente se añadió 4.83g de acetato de vinilo después de 30 minutos se agregó una solución de KPS al 1.96%. Se procedió a la adición del acetato de vinilo usando una bomba de dosificación a una velocidad de 0.346 g/ml durante 192 minutos, dejándola reaccionar durante 1 hora. Se burbujeo con argón todo el tiempo de reacción para desplazar el oxígeno disuelto. Se tomó una muestra del látex para calcular la conversión. El látex restante se hidrolizo usando una solución 1 N de NaOH, fue decantado y llevado a la estufa a 40 °C.

Síntesis de nanopartículas de acrilamida y polivinil alcohol: Se utilizó agua destilada, sal

sódica del sulfosuccinato de bis (2-etilhexilo) (AOT) como surfactante, peróxido de benzoilo como iniciador, acrilamida (AA) y polivinil alcohol y Nitrate sodic ammonium como entrecruzante. Las reacciones se realizaron mediante polimerización en microemulsión inversa, en un reactor de vidrio con chaqueta de enfriamiento/calentamiento y con capacidad de 250 ml, empleando agitación mecánica constante y una temperatura de 50 °C. El surfactante y el tolueno fueron puestos en el reactor, posteriormente se agregó el peróxido de benzoilo en una solución de agua y se burbujeo argón durante una hora, se agregaron el monómero, polivinil alcohol, agua y etanol usando una bomba peristáltica a una velocidad de 0.26 ml/min. Finalmente agregó el entrecruzante, para dar inicio a la polimerización, dejándola reaccionar durante 5 horas, se burbujeo con argón todo el tiempo de reacción para desplazar el oxígeno disuelto en el agua. En la tabla 1 se muestra la composición de las reacciones. Las muestras finales de los látices poliméricos fueron analizadas mediante dispersión cuasielástica de luz (QLLS), para obtener el tamaño final de partícula.

Tabla 1. Composición de las reacciones

RX	COMPOSICIÓN	COMPOSICIÓN MASA
Tolueno (85%) AOT (15%)	95% masa	Tolueno 80.75 g AOT 14.25 g
Agua	2.5% masa	15 g
Etanol	2.5% masa	10 g
Monómero	2.5% masa	3.63 g
Entrecruzante	1% respecto al monómero	0.036 g
Iniciador	1% respecto al monómero	0.036 g

3. Resultados y análisis

En la Figura 1 se observa el espectro de infrarrojo de acrilamida y polivinil alcohol, las banda de estiramiento de los grupos NH entre 3200 y 3400 cm^{-1} , e igualmente las vibraciones de estiramiento de grupo C=O(amida I, 1672 cm^{-1}) y la vibración de flexión del enlace N-H (amida II, 1607 cm^{-1}), así como vibraciones correspondientes a la deformación del grupo C-N entre 1300 y 1475 cm^{-1} correspondientes a la poliacrilamida[4,5]. Se observó la banda

en 2908 cm^{-1} , fuerte, correspondiente a una vibración del grupo C-H. Hay también confirmación del grupo C-OH de los alcoholes con bandas en 1237 (débil) y 1415 cm^{-1} (ancha e intensa) y una vibración de flexión en 1330 cm^{-1} (intensa) que corresponde nuevamente al enlace de O-H, (tabla 1) correspondientes al polivinil alcohol [5,7].

En la figura 2 se observa los tamaños de partícula de la copolimerización.

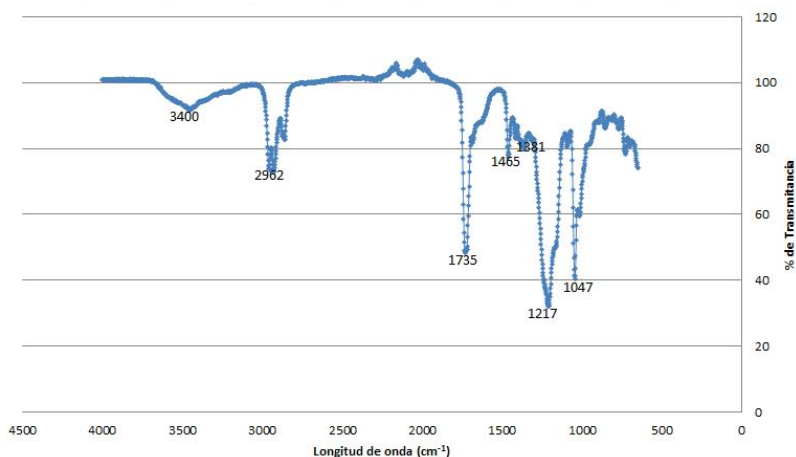


Figura 1. Espectro de infrarrojo de acrilamida y polivinil alcohol

Tabla 1. Región de espectro

Grupo funcional	Región de espectro encontrada (cm^{-1})	Región de espectro reportada (cm^{-1})
N-H	3400	3200-3400
C=O	1735	1700
C-N	1381	1300-1475
C-H	2962	2965-2850
C-OH	1217	1237-1415
O-H	1349	1330
C-O	1047	1300-1000

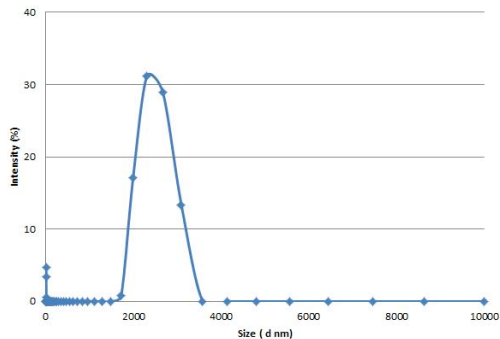


Figura 2. Size distribution by intensity

Conclusiones

Mediante espectroscopia de infrarrojo es posible observar los principales grupos funcionales de cada uno de los polímeros (poliacrilamida y polivinil alcohol), comprobando la presencia de éstos dos polímeros en el copolímero final. Además se puede observar que los tamaños de partícula obtenidos fueron de 2500 nm.

Agradecimientos: Al proyecto CON-ACYT 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., "Reactivity ratios and monomer partitioning in the microemulsion copolymerization of vinyl acetate and butyl acrylate", *J. Appl. Polym. Sci.* 111, 329-337, (2009).
3. Herrera Barros A. P., "Synthesis and agglomeration of gold nanoparticles in reverse micelles", *Trabajo de grado Tesis de maestría*, Universidad de Puerto Rico Campus Mayagüez. Puerto Rico. (2005).
4. González, Nain; Contreras, Jesús; López-Carrasquero, "Estudio de la síntesis y caracterización de hidrogeles semi-IPN obtenidos a partir de poli(acrilamida y el biopolímero poli(hidroxitbutirato-co-hidroxiacrilato)" *Interciencia*, vol. 38, núm. 6 pp. 430-436, (2013)
5. Zumaya Quiñones Rocío, Antonio Cruz Rocío, "Liberación de ibuprofeno empleando hidrogeles de poli(carboximetil celulosa-co-acrilamida)", *Volumen 10(6)*, (2009).
6. Arredondo Alejandro, Patiño José F., "matriz a partir de un hidrogel de alcohol polivinílico (pva) combinada con sulfadiazina de plata con potencial aplicación en el manejo y control de la sepsis en heridas dérmicas", *Colombia, Volumen 12(4)*, (2011).
7. García Cerda L. A., Escareño Castro M. U., "Preparación de compósitos magnéticos mediante la síntesis in situ de nanopartículas magnéticas dentro de una matriz polimérica", vol. 19, núm. 1, México, pp. 20-24, (2006).

USO DE GRASA RESIDUAL DE LICONSA PARA LA PRODUCCIÓN DE BIODIESEL POR MÉTODO CONVENCIONAL Y MICROONDAS

Bunfilio E. Ramos Cortés, Ana M. Lumbreras García,
José A. Guevara García

*e-mail:beduardo_ramosc@hotmail.com

Laboratorio 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.

Introducción

Se estima que en México la producción de leche fue de 10.8 millones de litros y de queso fue de 145 mil toneladas en 2009 [1]. Aproximadamente 90% del total de la leche utilizada en la industria quesera es eliminada como lactosuero, el cual retiene cerca del 55% del total de sólidos de la leche, entre ellos las grasas [2]. Se utilizan enormes cantidades de agua para la limpieza, esterilización y lavado de equipos, durante este proceso, la mantequilla y la grasa residual que se lavan se recogen en trampas de grasa antes de llegar a la planta de tratamiento de efluentes. Esta escoria es una masa flotante de sólidos de menor densidad formado por una mezcla de grasas, lípidos, proteínas, materiales de embalaje, etc. La industria

láctea procesa 5 litros/min de leche por día, produce alrededor de 200-350 kg de escoria por día, de la cual es difícil deshacerse [3]. La mayoría de las industrias lácteas elimina esta escoria en el sitio de disposición de desechos sólidos o por incineración.

El biodiesel es un biocombustible que se obtiene principalmente por medio de una reacción de transesterificación luego de la extracción de aceites de granos y semillas. El uso de semillas y granos ex profeso para la producción de biodiesel ocupa grandes extensiones de terreno fértil. Al usar un residuo lácteo no hay interferencia en la producción de alimentos para consumo humano y se obtiene un combustible limpio.

En este trabajo se utilizó una grasa residual de la planta de LICONSA en el estado de Tlaxcala y se desarrolló un reactor prototipo con base en irradiación con microondas en flujo continuo para la obtención de biodiesel a partir de la grasa láctea residual.

Métodos

La grasa residual se recogió de la zona de escoria de la trampa de grasa de la tubería de tratamiento de efluentes en un estado fresco. Esta escoria es de una apariencia amarillenta semi-sólida, parte de un lote fue filtrada para eliminar los sólidos suspendidos no deseados y secada a presión reducida. Se procedió a la esterificación de los ácidos grasos libres utilizando como catalizador ácido sulfúrico. Las reacciones de esterificación y de transesterificación se llevaron a cabo por medio de reflujo en un matraz provisto de agitación magnética, se usaron proporciones de 1:6 (aceite: metanol) en medio ácido (ácido sulfúrico al 2.5%) por un periodo de aproximadamente 4 horas hasta llegar a una acidez constante. La reacción se detuvo finalizando el calentamiento y la mezcla se llevó a un embudo de separación y se dejó reposar por 12 horas para dar tiempo a la separación de fases: una fase amarillenta (éster) y otra fase acuosa. Una vez obtenidas las dos fases se realizó cromatografía de capa fina con disolventes poco polares, el recorrido se apreció en una cámara de luz UV y las placas fueron reveladas con una cámara de yodo. La fase que contiene al éster se utilizó

para la reacción de transesterificación. El éster se secó y se llevó a un sistema de reflujo por media hora con una solución de hidróxido de sodio, metanol e hidróxido de potasio. Los productos fueron llevados al embudo de separación para dejar reposar por 12 h y obtener la separación de las dos fases en las cuales se encontró en la parte superior el éster (biodiesel) con una coloración amarilla paja y en la parte inferior del embudo la glicerina con una coloración café.

Para el método por irradiación de microondas se adicionaron proporciones para la etapa de esterificación de 1:6 (aceite: metanol) en medio ácido con H_2SO_4 al 2.5% dentro del depósito en el microondas, se ajustaron las condiciones del microondas en la potencia media alta por 12 minutos, una vez obtenido el producto se llevó a un embudo de separación y se dejó reposar por un lapso de 12 horas. En la etapa de transesterificación a la muestra se le adicionó una mezcla de hidróxido de sodio, metanol e hidróxido de potasio a la cual se le irradiaron microondas con un potencia media alta dentro del microondas por un tiempo de 15 minutos, una vez concluida la reacción se le dio un tiempo de 12 horas para la separación de fases, en la superior se obtuvo el éster (biodiesel) con una coloración amarilla paja y en la fase inferior de embudo la glicerina con coloración café. El proceso de secado fue con malla molecular para la captación de humedad en el producto final.

Se aplicó el método Karl–Fisher para la determinación de humedad a la grasa láctea sin un tratamiento previo. Se obtuvo así un buen resultado para la industria láctea al minimizar costos en el proceso a gran escala de la producción de biodiesel. La muestra cuenta con un mínimo de agua, los índices medibles de yodo (método de Hanus) y saponificación (Índice de Koettstorfer) son aquellos mg de KOH necesarios para saponificar un gramo de grasa láctea, lo cual hace a esta materia prima muy susceptible a la generación indeseada de subproductos como el jabón. Esta reacción indeseable sucede al adicionar en exceso sosa o potasa. El índice de yodo son los gramos de yodo absorbidos por 10 g de grasa.

Resultados

La etapa de esterificación es la conversión de grasa residual y alcohol usando un catalizador homogéneo H_2SO_4 al 2.5%. El método de irradiación de microondas para la generación de los productos éster y agua, muestra productos desde el minuto 8 monitoreando la conversión por el aumento del potencial (mV) hasta alcanzar una meseta, finalizando la conversión a productos obteniendo un rendimiento de 95% de éster [4] (ver Figura 1(a)).

La segunda etapa transesterificación por irradiación en microondas desde el minuto 8 muestra (ver Figura 1(b)). La conversión de un éster de poco valor a otro éster de gran valor industrial para la obtención y generación de un de biodiesel obteniendo un

92% mientras que por el método a reflujo se obtuvo un 46.66% de este combustible. La densidad resultante fue comparada con otras muestras de diésel de origen fósil con un ± 0.05 g/mL de diferencia, siendo así los resultados satisfactorios.

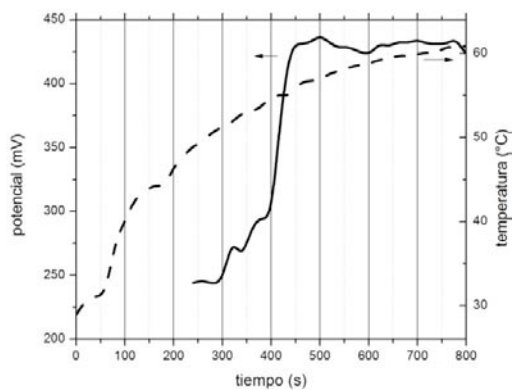
Actualmente se está trabajando para sustituir el ácido sulfúrico por un catalizador heterogéneo reutilizable tal como la Amberlita IR 124.

Conclusiones

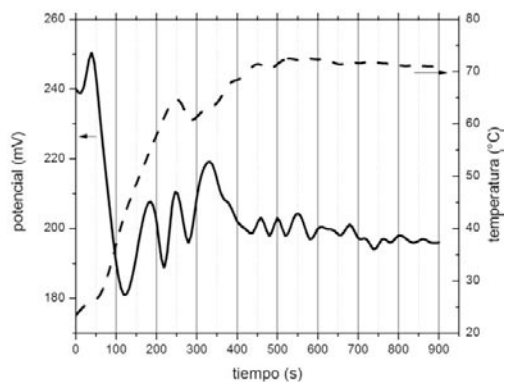
Al comparar el método por microondas vs el método a reflujo, puede observarse que el primero es una forma más rápida para la generación de biodiesel. La obtención de un mayor rendimiento en menor tiempo por el método de irradiación en microondas reduce horas de trabajo a tan solo minutos. Esta técnica a gran escala permite transformar químicamente un desperdicio industrial y generar combustible limpio útil para otros procesos al interior de la empresa láctea y que puede sustituir el consumo de diésel de origen fósil.

Referencias

1. SAGARPA, Reporte agroindustrial. México (2009).
2. P. Panesar, J. Kennedy, D. Gandhi and K. Bunko, *Food Chemistry*, 105, 114 (2007).
3. P. Sivakumar, K. Anbarasu and S. Renganathan, *Fuel*, 90, 147-151 (2011).
4. J. Hernando, P. Leto, M. P. Matia and N. J.L, *Fuel*, 86, 1641–1644 (2007).



(a)



(b)

Figura 1. Gráficas de doble eje Y para los procesos de conversión por método de microondas. A la izquierda se lee el potencial, a la derecha la temperatura. (a) Reacción de esterificación; (b) reacción de transesterificación.

EFFECTO DE LA RAPIDEZ DE DEFORMACIÓN EN LA DISPERSIÓN DE UN NANOCOMPUESTO POLIMÉRICO

Fabián Colín Rivera, Friné López Medina, Jorge Castillo Tejas

nlrcolin@hotmail.com

Universidad Autónoma de Tlaxcala

Introducción

En la actualidad muchas de las investigaciones en el desarrollo de nuevos materiales se centran en estudiar materiales compuestos basados en una matriz polimérica y un refuerzo, obteniendo mejoras en la rigidez, conductividad eléctrica, resistencia a la llama, entre otras propiedades. Cuando se estudia la respuesta al flujo de un fluido, una técnica que ha exhibido ser una herramienta de gran utilidad es la simulación por Dinámica Molecular (DM), que es una técnica para estimar el equilibrio de un sistema y sus propiedades de transporte. El propósito de la dinámica molecular consiste en conocer la evolución con respecto al tiempo del vector de posición así como de la velocidad de cada

partícula a partir del modelo molecular que representa el sistema.

En investigaciones recientes, mediante el uso de técnicas computacionales como la simulación por dinámica molecular (DM), se ha desarrollado un mecanismo en estado estable para determinar el parámetro energético que da origen a una distribución adecuada de las partículas¹.

Cuando el sistema es sometido a una condición de flujo, la dispersión de las partículas del refuerzo puede ser diferente respecto a la condición de equilibrio. El objetivo del presente trabajo es determinar la dispersión de las partículas de refuerzo en una matriz polimérica en condiciones de flujo por presión.

Metodología

En este trabajo se considera que el sistema en estudio está formado por 400 cadenas lineales y 20 partículas esféricas. Cada cadena consta de 20 sitios enlazados, donde, cada sitio o monómero es de tamaño s . Para reforzar las cadenas de polímero se incluyen, como ya se mencionó, 20 partículas esféricas de tamaño $4s$. Se considera que los monómeros tienen una masa de 1, y por la relación de tamaños entre monómeros y partículas, éstas tienen una masa de 64. En este trabajo, el sistema se somete a un campo externo de fuerza para reproducir una condición de flujo por presión o de tipo Poiseuille².

En trabajos previos^{1,3} la forma en que interactúan los componentes del sistema está dada por el modelo Lennard Jones modificado. Éste es utilizado para simular la interacción de cadenas de polímero con nanopartículas y está dado por:

$$u(r_{ij}) = 4 \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij} - r_{EV}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij} - r_{EV}} \right)^6 \right] U(r_{cutoff}) \quad (1)$$

donde $U(r_{cutoff})$, permite que la energía potencial y la fuerza tiendan a cero de manera suavizada s es el tamaño del sitio, r_{ij} es la separación entre partículas, r_{EV} es un parámetro que toma en cuenta los efectos de volumen excluido, para la interacción polímero-nanopartícula y nanopartícula-nanopartícula, r_{EV} es 1.5σ y 3σ respectivamente y para la interacción polímero-

polímero, r_{EV} toma un valor de cero, s es el parámetro de interacción energética y toma valores de 2 y 4 cuando la interacción es polímero-nanopartícula y nanopartícula-nanopartícula respectivamente, además de tomar un valor de 1 cuando se lleva a cabo una interacción polímero-polímero.

Para mantener los monómeros enlazados, se utiliza la parte repulsiva de la Ecuación 1 y el potencial atractivo FENE por sus siglas en inglés *Finite Extensible Nonlinear Elastic*, dado por:

$$u(r_{ij}) = \frac{-1}{2} k_v R_0^2 \ln \left[1 - \left(\frac{r_{ij}}{R_0} \right)^2 \right]$$

donde $k_v = 30(\epsilon/\sigma^2)$, es la constante del resorte y $R_0 = 1.5\sigma$, es la longitud de enlace máxima.

Para evitar errores en los cálculos computacionales se utilizan unidades adimensionales² (adimensionales) y un ensamble (NVT), donde las condiciones de densidad ρ y temperatura T^i se fijan de acuerdo a la literatura³ quedando en los valores siguientes: $\rho^i = 0.7$ y $T^i = 1.33$. A estas condiciones se asegura que el sistema en estudio se encuentra en un estado de polímero fundido.

Resultados previos

El modelado de la dinámica molecular se divide en dos etapas, las cuales consisten en el desarrollo y/o implantación del modelo

molecular y la aplicación de herramientas de cómputo para el desarrollo de algoritmos que describan las ecuaciones matemáticas mediante simulación de dinámica molecular. Para realizar la simulación se implementan códigos de programación en lenguaje FORTRAN, antes de reproducir las condiciones del flujo por presión que se va a estudiar, es necesario generar la configuración inicial de posiciones y velocidades iniciales de cada partícula. Las posiciones iniciales de las partículas se asignan mediante algún enrejado o de simulaciones previas (ver Figura 1) y las velocidades iniciales se generan de manera aleatoria o también de simulaciones previas. Cuando se realiza una simulación, el sistema evoluciona con el tiempo a partir de sus condiciones iniciales hasta un estado de equilibrio, esta fase de relajación, se debe a la solución de las ecuaciones movimiento. Cuando el sistema llega a un estado de equilibrio, se pueden calcular los promedios de las propiedades en el tiempo. En la Figura 2 se presenta la configuración final del sistema correspondiente a la etapa de equilibración.

Perspectivas del trabajo.

Una vez que el sistema se encuentra en un estado de equilibrio se van a realizar simulaciones de dinámica molecular con una condición de flujo por presión realizando un análisis de los perfiles de velocidad, así como los perfiles de esfuerzo. También se va a determinar cuál es el efecto del campo externo de la fuerza en la dispersión de las nanopartículas mediante mediciones de la función de distribución radial.

Referencias

1. Liu J., Gao Y., Cao D., Zhang L., Guo Z. *Langmuir*. 27, 7926-7933 (2011).
2. M. Vásquez, “Flujo por presión para un fluido simple a través de una región de simulación cilíndrica usando dinámica molecular”. Tesis de licenciatura. Universidad Autónoma de Tlaxcala, (2013).
3. Smith J. S., Bedrov D., Smith G. D. *Composites Science and Technology*. 63, 1599-1605 (2003).

Figuras

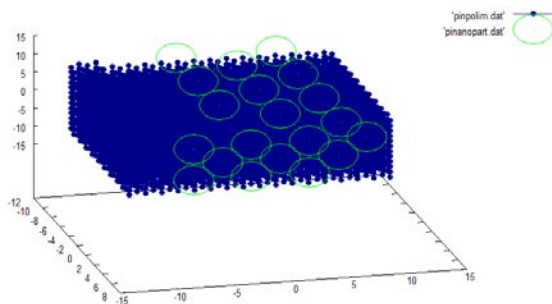


Figura 1. Configuración inicial del sistema.

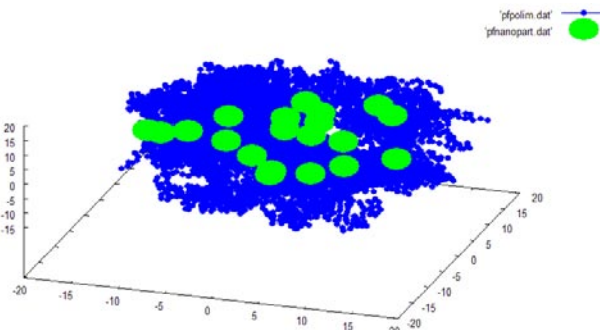


Figura 2. Configuración final del sistema en equilibrio.

ADSORCIÓN Y TOXICIDAD DE MALATIÓN EN PRESENCIA DE NANOTUBOS DE CARBONO OXIDADOS

Antonio Gómez Gutiérrez^a, Nancy Verónica Pérez Aguilar^{a*}, Pérez T. Diego A^b, Nezdira De León Mena^c, Sonia Yesenia Silva Belmares^c, Lucero Rosales Marines^a, Guadalupe de la Cruz^c

^a Cuerpo Académico de Ingeniería Química, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Coahuila, Boulevard Venustiano Carranza y José González Lobo, Saltillo, Coahuila, 25280, MÉXICO. * nancyperez@uadec.edu.mx

^b División Académica de Ciencias Biológicas de la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, Av. Universidad s/n, Zona de la Cultura, Col. Magisterial, Villahermosa, Tabasco, 86040, MÉXICO.

^c Cuerpo Académico de Químico Farmacobiólogo, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Coahuila, Boulevard Venustiano Carranza y José González Lobo, Saltillo, Coahuila, 25280, MÉXICO.

Introducción

En México existen reportes de la presencia de plaguicidas, como el malatión (MA), en lodos y limos en 27 diferentes reservorios acuíferos [1]. El MA es un insecticida organofosforado sintético de uso intensivo en el sector agrícola por a su eficacia y bajo costo. El MA es soluble en la mayoría de los disolventes orgánicos, pero con solubilidad en agua de solo 145 ppm, debido a la presencia de dos enlaces carboxiester en su estructura. El MA presenta baja toxicidad y se degrada rápidamente en malaoxón, un compuesto más tóxico que inhibe la acción de la acetilcolinesterasa (AChE) en la destrucción de la acetilcolina (ACh), alterando así el sistema nervioso central (SNC). En casos extremos

puede ocasionar la muerte [2]. Debido a su estructura química el MA difícilmente se elimina por métodos convencionales de tratamiento de agua, por lo que para su remoción se utilizan métodos avanzados de tratamiento, como la adsorción. Diversos estudios de adsorción han demostrado que los nanotubos de carbono (NTC) y el carbón activado (CA) son algunos de los adsorbentes con capacidad para captar moléculas orgánicas e inorgánicas. También se ha demostrado que la oxidación química de los NTC con diferentes agentes oxidantes facilita su dispersión en solventes polares. Adicionalmente se debe evaluar la toxicidad de NTC por medio de bioensayos adecuados, como el de *Artemia salina* (*A. salina*) [3-6].

En esta investigación se presentan resultados preliminares de la capacidad de adsorción de MA sobre NTC oxidados (NTC-OX), y se compara con la capacidad de CA. Además, se evalúa la toxicidad de soluciones de MA, NTC-OX, y mezclas de NTC-OX con MA, con el ensayo de *A. salina*.

Metodología

Para el experimento de adsorción se utilizaron NTC oxidados con una solución de ácido nítrico y ácido sulfúrico concentrados (1:1); el PCC de este material fue de 6.5. Los NTC-OX se lavaron y secaron antes de realizar los experimentos de adsorción. El equilibrio de adsorción de malatión sobre NTC-OX y CA, se determinó poniendo en contacto una cantidad conocida de adsorbente con soluciones de MA de concentración inicial desde 100 a 1000 ppm. El pH se ajustó a 7 con soluciones valoradas de NaOH ó HCl 0.01N. Las mezclas se agitaron por 2 h en una incubadora (marca PRENDO, modelo INO 650V-7) a 25 °C y 150 rpm. La concentración inicial de las soluciones y en el equilibrio se midió con un espectrofotómetro UV-VIS (marca UNICO, modelo RDL8024S). La curva de calibración se preparó con cuatro estándares de concentraciones desde 100 a 1000 ppm.

Las pruebas de mortalidad se realizaron con *A. salina*; los quistes se eclosionaron con agua de mar artificial en una cámara de agua con burbujeo a 29 °C durante 24 h y con luz blanca a pH 8. La *A. salina* se expuso a

soluciones de MA de concentración inicial desde 50 a 400 ppm por 24 h a 25 °C. La toxicidad de NTC-OX se midió con NTC-OX en solución a 200 ppm, en contacto con *A. salina* a 25 °C por 24 h. Finalmente, el ensayo de toxicidad se hizo con una mezcla 1:1 de NTC-OX con MA. La mortalidad de *A. salina* en cada ensayo se midió después de 24 horas de exposición con microplaca y un control, cada ensayo se realizó por triplicado. En el conteo de mortalidad se consideraron muertas los individuos que en un lapso de 10 s y con un ligero movimiento de la placa no presentaban movilidad.

Resultados

La concentración de malatión en las soluciones iniciales y al equilibrio se midió con un espectrofotómetro UV-VIS a una longitud de onda de 290 nm. Con la concentración inicial y al equilibrio se calculó la masa adsorbida de malatión en cada muestra, de acuerdo al balance de masa:

$$q_e = (C_0 - C_e) V / m \quad (\text{ec. 1})$$

Donde q_e es la masa de malatión en el equilibrio en mg/g; C_0 y C_e son las concentraciones al inicio y en equilibrio en mg/L; V es el volumen de la solución en L y m es la masa de muestra en g. Los datos experimentales se presentan en la Tabla 1, y se analizaron con los modelos de Freundlich (ec.2), de Langmuir (ec. 3) y de Prausnitz- Radke (ec.4).

$$q = \frac{aC}{1 + bC^\beta} \quad (\text{ec.2})$$

$$q = kC^{\frac{1}{n}} \quad (\text{ec.3})$$

$$q = \frac{q_m KC}{1 + KC} \quad (\text{ec.4})$$

Las constantes correspondientes se calcularon con el software Polymath v.6.0. Con los parámetros calculados se observó que el modelo de Freundlich describe la tendencia de los datos observados (Figura 1). El valor de la constante de Freundlich para CA y NTC-OX fue de 13.9 y 0.54 ((mg-g⁻¹)(L-mg⁻¹)^{1/n}) y el valor del parámetro n fue 1.535 y 0.813 respectivamente a pH 7 y 25°C. El material con mayor capacidad de adsorción fue NTC-OX, para una concentración de MA en equilibrio de 400 mg/L la masa adsorbida fue 1050 mg/g, 7 veces mayor que para CA, 150 mg/g.

Los resultados de las pruebas con *A. salina* mostraron que la CL₅₀ de MA fue de 230 ± 10 mg/L, esto es ligeramente tóxico; en tanto que NTC-OX no mostró ningún efecto de toxicidad para este organismo. Finalmente el ensayo de toxicidad de una solución de MA en presencia de NTC-OX (1:1) no presentó ningún efecto de mortalidad para *A. Salina*, esto se muestra en la Figura 2.

Conclusiones

- Se comprueba que NTC-OX adsorbe 7 veces más MA que el CA a pH 7 y 25°C.

- En cuanto al estudio de toxicología, se concluye que el MA es ligeramente tóxico para *A. Salina*, en cambio NTC-OX es un material no tóxico para este organismo.
- La presencia de NTC-OX reduce de manera importante la toxicidad de MA, ya que una solución de concentración inicial de 1000 ppm de MA y 200 ppm de NTC-OX, no produce mortalidad para *A. Salina*.

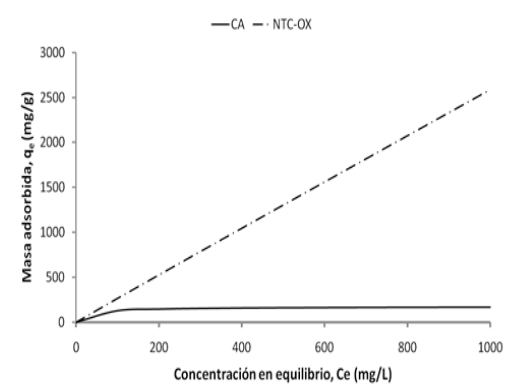
Referencias

1. (Martínez L., Galar M., Olvera E., Chehue A. Captación de malatión en sedimentos artificiales y su efecto tóxico sobre *Limnodrilus hoffmeisteri*, *Rev. RICA de UNAM.*, vol. 17, No. 3, 2001, pp. 137-146.)
2. Fernández, D., Mancipe, L. Intoxicación por organofosforados, *Rev. Med.*, Vol. 18, No. 1, p. 84-92, 2010.
3. Wesley E. W., Ford D. (2009). Industrial water quality. 4ª Ed. McGraw-Hill, p. 32-28, 525-575.
4. X. Peng, Y. Li, Z. Luan, Z. Di, H. Wang, B. Tian, Z. Jia. Adsorption of 1,2-dichlorobenzene from water to carbon nanotubes, *Chem. Phys. Lett.*, Vol. 376, p. 154–158, 2003.
5. K. Yang, W. Wu, Q. Jing, L. Zhu. Aqueous adsorption of aniline, phenol, and their substitutes by multi-walled carbon nanotubes, *Environ. Sci. Technol.*, Vol. 42, p. 7931–7936, 2008.
6. Arasteh, R. “Adsorption of 2-nitrophenol by multi-wall carbon nanotubes from aqueous solutions”, *Appl. Surf. Sci.*, Vol. 14, p. 4447-4455, 2010.

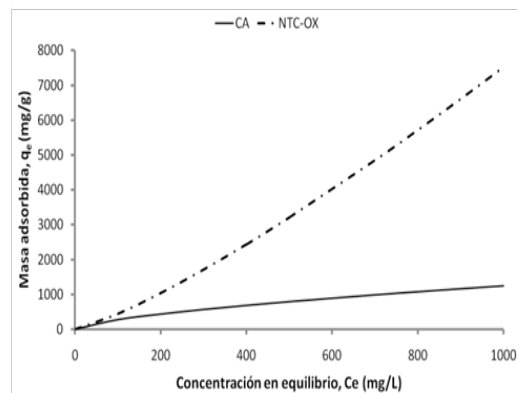
Tablas

Tabla 1. Datos experimentales de las isoterms de adsorción de malatión a pH 7 y 25 °C

CA		NTC-OX	
$C_{e(exp)}$	q_e (mg/g)	$C_{e(exp)}$	q_e (mg/g)
43.9	83.5	180.14	17.14
145.3	266	227.29	174.29
203.9	626.8	280.14	245.71
355.3	781.6	308.71	557.14
403.9	925.2	341.57	948.86
		357.29	1283.43



a)



b)

Figura 1. Comparación de la adsorción de MA entre CA y NTC- OX a pH 7 y 25 °C; las isoterms se ajustaron con el modelo de Freundlich.

Figuras

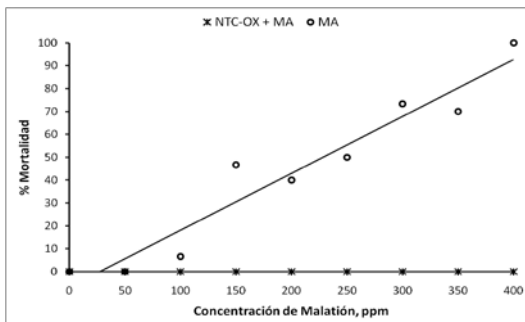


Figura 2. Relación la mortalidad de *A. Salina* en presencia de diferentes concentraciones de MA (círculos) y una solución (1:1) de MA y NTC-OX (cruces).

CARACTERIZACIÓN EXPERIMENTAL DE UN TRANSFORMADOR TÉRMICO POR ABSORCIÓN CON ABSORBEDOR ADIABÁTICO

Jonathan Ibarra Bahena¹, Carmen Valeria Valdez Morales², Rosenberg J. Romero D.³

¹Posgrado en Ingeniería y Ciencias Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos. jibarra@uaem.mx

²Posgrado en Ingeniería y Ciencias Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos.

³Centro de Investigación en Ingeniería y Ciencias Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos.

Introducción

La revalorización de energía es un tema importante en sectores industriales tales como el alimenticio, el petroquímico, el farmacéutico entre otros, que consumen grandes cantidades de energía en forma de calor y desechan gases de escape y/o efluentes a una temperatura de alrededor de 80°C. Una parte de este calor residual se puede revalorizar a niveles térmicos superiores mediante un transformador térmico de una etapa o *SSHT* (por sus siglas en inglés de *Single Stage Heat Transformer*), debido a la relación de recuperación alta (alrededor del 50%) de calor útil, un *SSHT* tiene el potencial de contribuir a proteger el medio ambiente, necesitando solo una pequeña cantidad de energía eléctrica para su funcionamiento [1].

Un *SSHT* es un dispositivo que extrae calor de una fuente térmica a una temperatura determinada y, mediante un ciclo termodinámico, lo revaloriza a una temperatura mayor para ser aprovechado en procesos con requerimientos energéticos más altos que los que podrían ser suministrados por la fuente térmica [2].

Un *SSHT* consta de 5 componentes principales: Un evaporador, un condensador, un generador, un absorbedor y un intercambiador de calor llamado “economizador”, como se muestra en la Figura 1. Este dispositivo utiliza una mezcla de fluido de trabajo – absorbente para realizar la revalorización de la energía que se suministra en el evaporador

y en el generador. La mezcla diluida en absorbente, se conduce del absorbedor hacia el generador donde el fluido de trabajo se vaporiza parcialmente utilizando una cantidad de calor Q_{gc} . El fluido de trabajo evaporado es conducido al condensador donde cambia de fase al rechazar una cantidad de calor Q_{co} . El fluido de trabajo condensado se bombea al evaporador donde se vaporiza a una presión mayor que la presión en el generador utilizando una cantidad de calor Q_{ev} , el vapor proveniente del evaporador se pone en contacto con la solución concentrada en el absorbedor bombeada desde el generador donde se produce una reacción exotérmica y cede una cantidad de calor Q_{th} , por último, la solución diluida a mayor temperatura, cede parte de su calor latente a la solución concentrada proveniente del generador en el economizador, antes de llegar al generador e iniciar el ciclo nuevamente [3].

El absorbedor es el componente crítico en las máquinas térmicas por absorción, ya que su desempeño impacta directamente en el tamaño y rendimiento de del dispositivo [4]. En el presente trabajo se muestra la caracterización experimental de una unidad de *SSHT* que cuenta con un absorbedor adiabático.

Métodos

Los componentes principales de la unidad experimental de *SSHT* son intercambiadores de calor de placas o *PHE* (por sus siglas en ingles de *Plate Heat Exchanger*) fabricados en acero

inoxidable 316 L. Las fuentes de calor para el generador y el evaporador se simularon con resistencias eléctricas de temperatura ajustable. La mezcla y el fluido de trabajo (mezcla Carrol – agua) fueron transportados dentro del *SSHT* utilizando 3 bombas de engranes de 32 W. Los caudales volumétricos se midieron utilizando 2 flujómetros analógicos de borosilicato. La concentración de la mezcla Agua/Carrol en el generador y en el absorbedor fueron calculadas por la correlación reportada por Basurto – Pensado et al [7]. Se utilizó una torre de enfriamiento con una bomba de 0.373 kw para retirar el calor del condensador. La Figura 2 muestra un diagrama esquemático del *SSHT* utilizado.

Resultados

En la Figura 3 se muestra el comportamiento térmico de una prueba experimental del *SSHT*. Se puede apreciar que la temperatura del absorbedor es 8°C mayor que la temperatura del generador, y que el proceso de absorción ocurre en 4 minutos, lo cual es 10 veces más rápido que el reportado en trabajos previos [6].

Conclusiones

Se llevó a cabo la caracterización experimental de una unidad de *SSHT*. Los resultados muestran que el proceso de absorción ocurre en 4 minutos, lo que es significativamente más rápido que el reportado en trabajos previos. La revalorización térmica alcanzada fue de 8°C.

Referencias

1. Sekar S., Saravanan R., “*Experimental studies on absorption heat transformer coupled distillation system*”, *Desalination*, 274, pp. 292–301, (2011).
2. Horuz I., Kurt B., “*Absorption heat transformers and an industrial application*”, *Renewable Energy*, 35, pp. 2175 – 2181, (2010).
3. Ibarra – Bahena J., Romero R. J., Velazquez – Avelar L., Valdez – Morales C.V., Galindo – Luna Y.R., “*Evaluation of the thermodynamic effectiveness of a plate heat exchanger integrated into an experimental single stage heat transformer operating with water / carrol mixture*”, *Experimental Thermal and Fluid Science*, 51, 257 – 263, (2013) .
4. Ibarra – Bahena J., Romero R. J., “*Performance of different experimental absorber design in absorption heat pump cycle technologies: A review*”, *Energies*, 7, pp. 751 – 766, (2014).
5. Basurto – Pensado M.A., Romero R.J., Sánchez – Mondragón J.J., Dorantes – Romero D., “*Analysis and characterization of an optical fiber for carrol – water liquid pair*”, *Energy*, 36, pp. 3952 – 3958, (2011) .
6. Ibarra – Bahena J., Romero R. J., Velazquez – Avelar L., Valdez – Morales C.V., Galindo – Luna Y.R., “*Experimental thermodynamic evaluation for a single stage heat transformer prototype build with commercial PHEs*”, *Applied Thermal Engineering* (2014), <http://dx.doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2014.05.018>

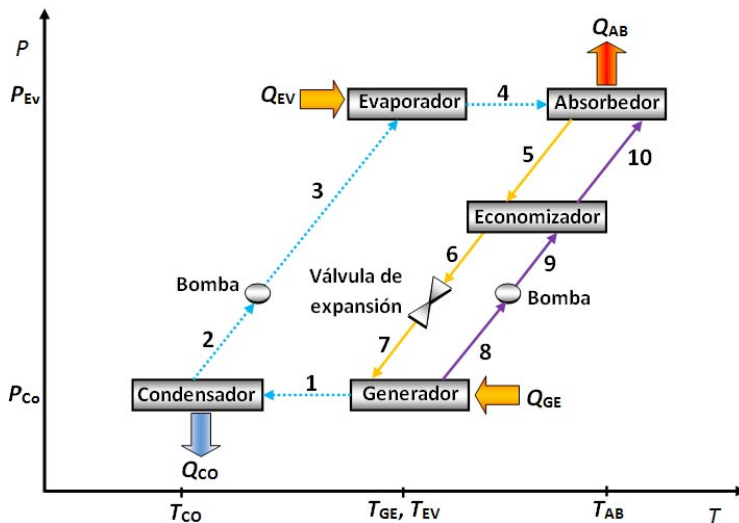


Figura 1. Diagrama esquemático de un SSHT.

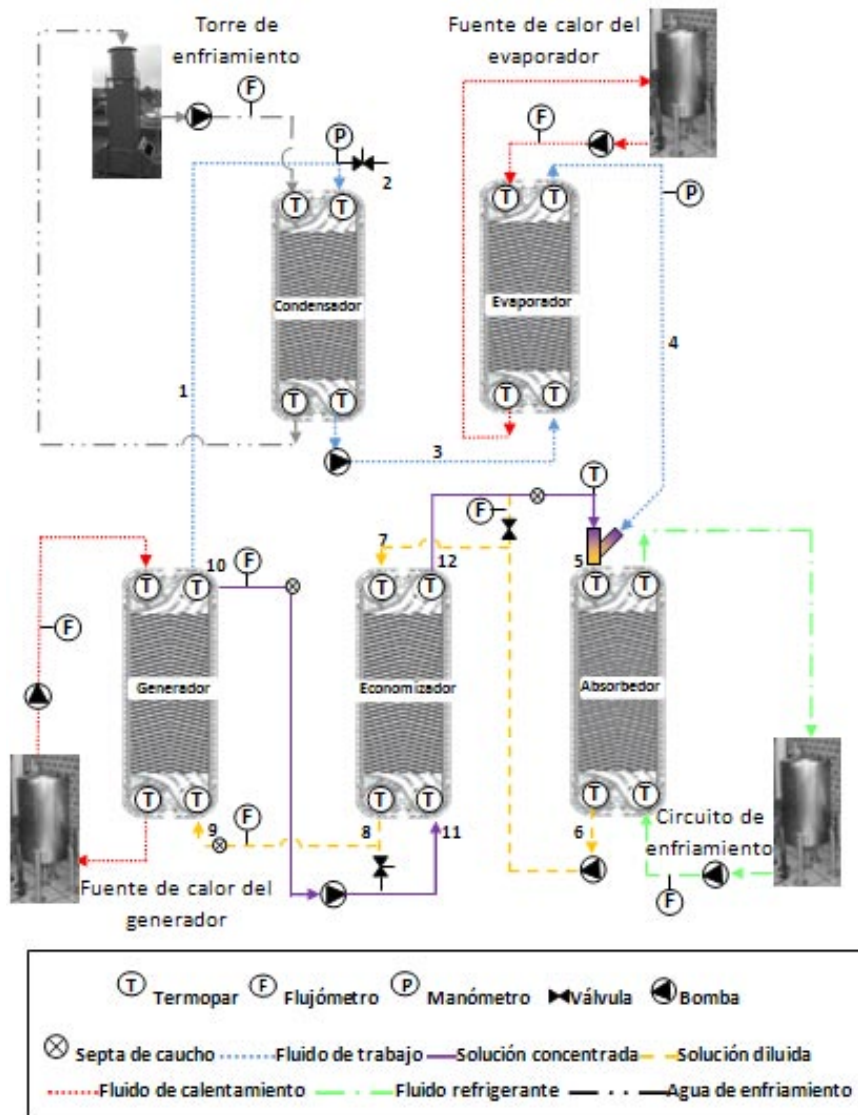


Figura 2. Diagrama esquemático del SSHT experimental.

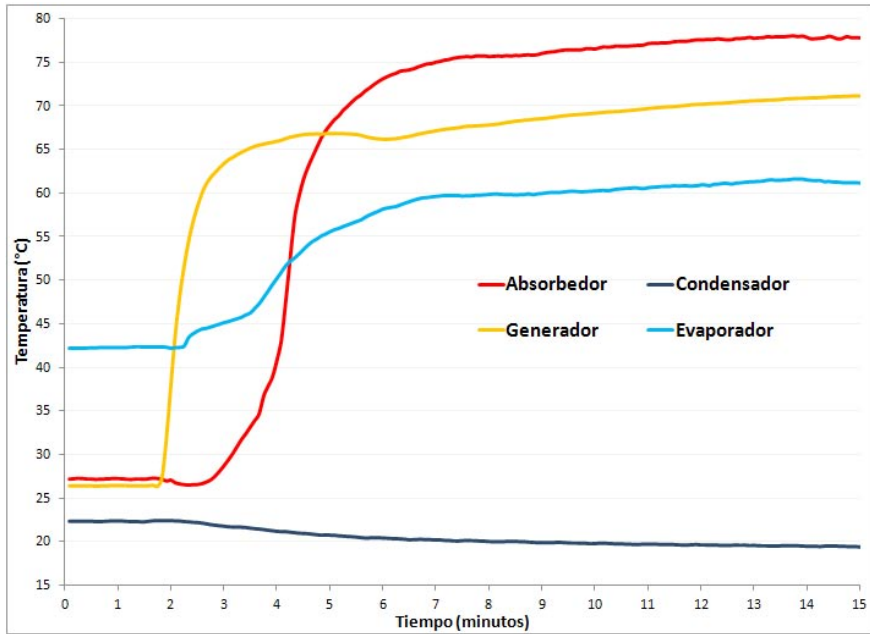


Figura 3. Registros de temperatura experimentales del SSHT.

SÍNTESIS DE RESINAS POROSAS PARA LA REMOCIÓN DE METALES PESADOS DE EFLUENTES INDUSTRIALES

Adriana Tlilayatzí Muñoz¹, Shirley Carro Sánchez¹, Judith Cardoso Martínez²

¹Facultad de Ciencias Básicas, Ingeniería y Tecnología. Universidad Autónoma de Tlaxcala.

²Universidad Autónoma Metropolitana

shir_cs@hotmail.com

Introducción

La remoción de Cr (VI) en efluentes industriales es de vital importancia desde el punto de vista ambiental y de salud. Uno de los métodos empleados es la remoción de metales por adsorción (intercambio iónico). Cardoso y col.¹ propone una polimerización en suspensión, realizando la síntesis de un copolímero de 4-vinil piridina- divinilbenzeno. Algunas de las características obtenidas son: alta área superficial, rápida cinética de adsorción y bajo costo de producción. Sin embargo el material al implementarse a nivel piloto no cuenta con la suficiente rigidez para soportar el empacamiento de las columnas de adsorción, al aumentar el material entrecruzante (aumento de concentración de

DVB) para aumentar la rigidez, disminuye la adsorción, esto es porque los grupos piridina son un factor primordial para la remoción de Cr. Aunado a lo anterior, el tamaño obtenido de perla es muy pequeño.

En este trabajo se analizarán diversos factores con la finalidad de aumentar el tamaño de las perlas obtenidas para tomar las condiciones como base para la síntesis de los copolímeros.

Metodología

Para la obtención de las perlas de resina de intercambio iónico con el tamaño deseado se realizó el siguiente procedimiento. Primero se varió el tipo de agitador ya se ha demostrado que la variación de los elementos dentro del

reactor juega un papel importante en la ruptura de gotas.² Se probaron tres geometrías para el agitador (Figura 1). La mezcla de reacción se agitó a dos diferentes velocidades, 150 y 250 rpm.

Para cuantificar el tamaño de gota promedio se prepararon soluciones agua- monómero en concentración 113 g de monómero/litro de agua y 22.6 g /L agua de alcohol polivinílico, PVA, como agente de suspensión. Se probaron dos diferentes volúmenes de mezcla, 50 y 100 ml, aproximadamente. Estabilizado el sistema se tomaron muestras y se analizaron mediante microscopía óptica, con la finalidad de buscar el tamaño promedio de gota mayor.

Una vez decididas las condiciones de operación, se realizaron las polimerizaciones con estireno. La formulación base, es decir concentraciones de reactivos, es la misma utilizada por García y Cardoso³. Las formulaciones empleadas se indican en la Tabla 1.

Resultados

Análisis de tamaño de gota

Cuando se aumenta el volumen de mezcla el tamaño de gota incrementa para todas las geometrías de agitador, sin embargo, aún cuando se emplea un mayor volumen si se incrementa la velocidad de agitación el tamaño de gota resulta menor que cuando se emplea menor volumen y baja velocidad de agitación. En cuanto al tipo de agitador, se observó que al incrementar el número de

aspas el tamaño de gota disminuía. En la Figura 2, se muestra la imagen de microscopía óptica con el mayor tamaño de gota a una velocidad. Por lo tanto, se decidió emplear como condiciones de agitación 150 rpm, un volumen de 100 ml y el agitador de media luna.

Obtención de perlas

Para la formulación 1, se obtuvieron escamas y perlas con un porcentaje de conversión fue de 18%. Por lo tanto, se concluye que el tiempo de reacción debe extenderse. En la formulación 2 se formó una masa. Debido a la baja concentración de PVA empleada el sistema no fue estable y las perlas coagularon entre sí. En las formulaciones 3, 4 y 5 sí se obtuvieron perlas, con un porcentaje de conversión es 33.89%, 48.06% y 21.4% respectivamente. En la Figura 3 se muestran las imágenes de microscopía óptica para las perlas obtenidas en cada síntesis. Como puede observarse, cualitativamente, las perlas obtenidas en la formulación 4 son más grandes que las obtenidas en las formulaciones 3 y 5, las cuales son de tamaño semejantes. Cabe señalar que no hay uniformidad de tamaño para todas las polimerizaciones. Esto podría indicar que la agitación no es uniforme en el reactor.

Conclusiones

Al aumentar la velocidad de agitación, el tamaño de gota disminuye considerablemente ($< .003$ mm) para todas las geometrías de

agitador empleadas. Asimismo, al incrementar el número de aspas en los agitadores empleados existe formación de gotas de menor tamaño.

Respecto a las polimerizaciones, las formulaciones 3 y 4, dieron mejores resultados en cuanto al tamaño, sin embargo, los diámetros obtenidos son dispersos, probablemente por una agitación no uniforme. Tras la obtención de las perlas con tamaño uniforme se procederá a realizar la síntesis de los copolímeros VP-DVB.

Tablas y Figuras

Tabla 1. Descripción de las polimerizaciones realizadas.

Formulación	PVA (grs)	Agua (ml)	Monómero (grs)	Iniciador (grs)	Tiempo (hrs)
1	2.26	100	11.3	.22	4
2	.60	100	11.3	.22	6
3	2.26	100	22.6	.22	8
4	2.26	100	11.3	.22	8
5	2.26	100	11.3	.11	12



Figura 1. Imagen de los agitadores empleados

Referencias

1. Judith Cardoso, Jesús Ortiz-Palacios, Octavio Manero, 2008. Journal of Applied Polymer Science, Vol. 107, 3644–3653.
2. Llaned Aguila Hernández, 2013. Influencia de la configuración del reactor en la formación y coagulación de partículas en sistemas de emulsión. Tesis. Universidad Autónoma de Tlaxcala. Apizaco, Tlax.
3. García Torres María de los Ángeles, Judith Cardoso, 2008. Remoción de cromo (VI) en aguas residuales utilizando resinas de intercambio iónico. Tema de servicio social. Universidad Autónoma Metropolitana. México D.F.

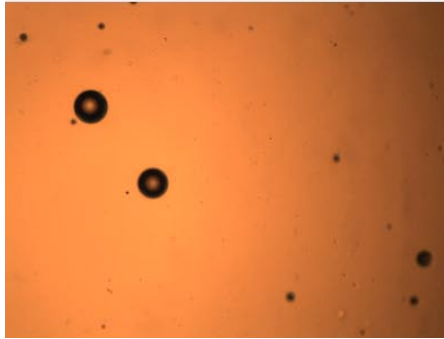
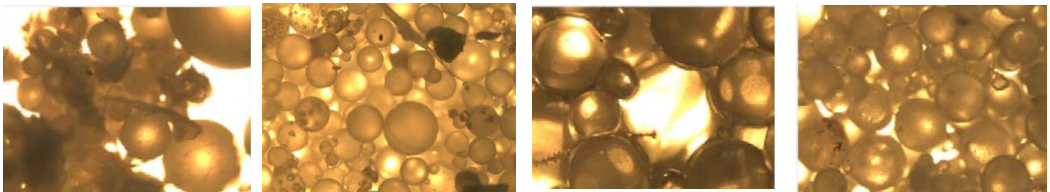


Figura 2. Se muestra la distribución de tamaño de gota a una velocidad de 150 rpm y 100/13.1 gr. agitador media luna.



(a)

(b)

(c)

(d)

Figura 3. Formulación 1 (a), 3(b), 4 (c),5(d)

DETERMINACIÓN DE RESIDUOS DE PLAGUICIDAS ORGANOCLORADOS EN PECES DE LA PRESA FALCÓN EN TAMAULIPAS, MÉXICO

Sofía Alvarado Reyna^a, José A. Ramírez De León^a, Rubén Santiago Adame^a, Gloria Sandoval Flores^a, Isidro Palos Pizarro^a

^aUniversidad Autónoma de Tamaulipas Unidad Reynosa-Aztlán, calle 16 y Lago de Chápala Fracc. Aztlán cp 88740

Reynosa, Tam. México.

[†]salvarad@uat.edu.mx

INTRODUCCIÓN

Los plaguicidas organoclorados aldrín, dieldrín, endrín, clordano (y sus isómeros), DDT (y sus metabolitos DDE y DDD), heptacloro, mirex, toxafeno, PCB's (bifenilos policlorados), HCB (hexacloro benceno), dioxinas y furanos, catalogadas por la PNUMA en el Convenio de Estocolmo como parte de “la docena sucia”, se encuentran prohibidos desde 2001 [1]. Son compuestos orgánicos a base de carbono, que resisten la degradación fotolítica, biológica y química. Se caracterizan por una baja hidrosolubilidad y liposolubilidad elevada, lo que da lugar a bioacumulación en el tejido adiposo, son semivolátiles [2] y fueron usados, de manera indiscriminada, en control de plagas y de enfermedades como la malaria, en países

tropicales [3]. El objetivo de este estudio fue determinar la presencia de residuos de plaguicidas organoclorados en músculo y grasa de las especies de pescado: mojarra tilapia (*Oreochromis aureus*) bagre (*Ictalurus punctatus*), besugo (*Alodinotus grunniens*) y carpa común (*Cyprinus carpio*) en la presa Falcón en Nuevo Laredo Tamaulipas, México.

MATERIALES Y MÉTODOS

Recolección de muestras.

Los especímenes se midieron, pesaron, evisceraron y almacenaron a -20°C.

Extracción, purificación y análisis de residuos de plaguicidas organoclorados

El proceso de extracción y purificación fue

realizado de acuerdo a Shenck y col., 1996 [4]. Se usó cromatógrafo de gases Hewlett – Packard 6890N, *Network GC system* (Agilent Technologies, USA), autoinyector 7683 *Series Injector*, automuestreador 7683 *Series*, columna Zebron ZB-5 de 30 m x 0.25 mm D.I., 0.25 μm de espesor de película (Phenomenex) y un detector de μ -captura de electrones (μ -ECD) ^{63}Ni , acorde a las recomendaciones del método 8081A para la determinación por cromatografía de gases (EPA, 1996) [5].

RESULTADOS

En la tabla 1 se muestran los valores biométricos de las especies seleccionadas. En la tabla 2 y 3 respectivamente, se muestran las concentraciones de residuos de los plaguicidas organoclorados expresados en ngg^{-1} de musculo de pescado y en ngg^{-1} de grasa.

Resultados por especies

Bagre. El análisis mostró que a excepción del isómero α -clordano, todos los plaguicidas, de interés se presentaron en los especímenes analizados. Los residuos de clordano y p,p' , DDT fueron los más altos con 97.74 ngg^{-1} y 56.72 ngg^{-1} de músculo respectivamente. El heptacloro y el p,p' , DDD se encontraron en todos los especímenes, a diferencia del aldrín, endrín y el mirex que al menos en un espécimen fueron hallados. La concentración es estos residuos por contenido graso muestra al γ -clordano como la concentración más alta (1308.34 ngg^{-1} de grasa).

Besugo. Esta especie fue la más pequeña (Tabla 1), no obstante, se encontró la presencia de todos los compuestos de interés. Las concentraciones determinadas fueron mínimas ($< 45 \text{ ngg}^{-1}$ de músculo) solamente la concentración de clordano en el espécimen 4 fue superior a los 100 ngg^{-1} de músculo (Tabla 2). El p,p' DDE, pudo ser identificada mas no cuantificada. La concentración más alta fue la de clordano con 1887.59 ngg^{-1} de grasa.

Tilapia. Esta especie fue la de menores concentraciones. La concentración de p,p' DDT fue la más alta con 38.90 ngg^{-1} de músculo. El α -clordano, γ -clordano, clordano y p,p' DDE fue posible cuantificarlos en un sólo especímenes de tilapia. En relación al contenido graso se muestra que el p,p' DDT con 38.90 ngg^{-1} de grasa es la de mayor concentración.

Carpa. Esta especie fue la de mayor peso, longitud y músculo obtenido (Tabla 1), no obstante albergó bajas concentraciones de residuos de plaguicidas organoclorados. Siendo el clordano el más alto con 109.60 ngg^{-1} de músculo seguido por el heptacloro con 66.60 ngg^{-1} de músculo. No se encontró la presencia del isómero α -clordano y solamente en un espécimen fue posible cuantificar la presencia del de p,p' DDE. La evaluación con respecto al contenido graso muestra al clordano con 3433.63 ngg^{-1} de grasa. Esta especie fue la de mayor concentración en comparación con las otras especies.

CONCLUSIONES

Los plaguicidas organoclorados aldrín, endrín, mirex, heptacloro, p,p', DDT, p,p' DDE, p,p' DDD, (Σ DDT's); α -clordano, γ -clordano, clordano (Σ Clordanos) que se analizaron, están presentes en los diferentes especímenes de la presa Falcón. Los clordanos se encuentran en mayor concentración de ngg^{-1} de musculo en bagre, besugo y capa y el p,p', DDT en bagre y tilapia. En relación al contenido de plaguicidas organoclorados en grasa de pescado, la mayor presencia es de clordanos en besugo y capra, γ -clordano en bagre y p,p', DDT en tilapia. Las concentraciones reportadas en el presente estudio, señalan que la presencia y los niveles de contaminantes orgánicos persistentes, identificados en pescados de la presa Falcón no representan un riesgo para el consumo, de acuerdo a los niveles máximos permisibles establecidos por la Agencia de Protección Ambiental (EPA) y la Administración de Alimentos y Medicamentos (FDA) con respecto a la presencia de plaguicidas organoclorados.

REFERENCIAS

- [1] FAO/PNUMA. 2001 United Nations Environment Programme. Persistent Organic Pollutants (Disponible en <http://www.pops.int/>)
- [2] Ritter, L. K.R., Solomon, J., Forget, M., Stemeroff y Oleary, C. "A review of selected persistent organic pollutants". Report for the International programme on Chemical Safety (UNEP/ILO/WHO), UNEP Chemicals, International Labour Office, World Health Organization, Geneva. (1995).
- [3] Pikkarainen, A., Parmanne, R. *Marine Pollution Bulletin*. 52, 1299-1309 (2006)
- [4] Schenck, F.J., Calderon, L., y Podhorniak, L.V. *Journal of AOAC International*. 79 (5), 1209-1214 (1996).
- [5] Soil Screening Guidance; User's Guide (Environment Protection Agency, Washington, DC, 1996)

TABLAS

Tabla 1. Datos biométricos de las especies de la Presa Falcón

Especimen	Bagre					Besugo				
	1	2	3	4	5	1	2	3	4	5
Peso (g)	1540	1980	1950	1870	3170	615	585	660	560	550
Longitud (cm)	51.3	53.6	52.4	51.0	60.0	36.0	35.0	36.5	34.5	34.5
Músculo (g)	505	655	465	485	885	235	205	250	165	215
Lípido (%)	2.47		3.26	3.42	4.47	4.31	6.56	2.82	5.56 ±	4.39 ±
	±	9.38	±	±	±	±	±	±	0.17	0.07
	0.42	± 0	0.10	0.50	0.56	0.13	0.11	0.09		
		.09								

Especimen	Carpa					Tilapia				
	1	2	3	4	5	1	2	3	4	5
Peso (g)	3450	3190	3745	2200	3130	1025	980	1170	975	1070
Longitud (cm)	63.5	60.5	67.0	54.5	60.0	38.0	38.5	40.5	35.0	38.0
Músculo (g)	1470	1300	1950	715	865	355	325	415	345	395
Lípido (%)	1.38	3.82	3.47	1.75	2.89	1.66	2.43	2.87	3.69 ±	1.59 ±
	±	±	±	±	±	±	±	±	0.35	0.11
	0.02	0.07	0.28	0.02	0.13	0.26	0.26	0.01		

Tabla 2. Concentración de plaguicidas organoclorados ngg⁻¹ de músculo de pescado.

Especimen	α -			γ -			Σ					
	Heptacloro	Aldrin	Endrin	Clordano	Clordano	Clordano	Clordanos	Mirex	p,p'DDT	p,p'DDD	p,p'DDE	Σ DDT's
Bagre 1	13.97	1.08	4.55	ND	32.33	13.69	46.02	DLD	DLD	5.37	DLD	5.37
Bagre 2	21.96	ND	ND	ND	ND	97.74	97.74	3.09	56.72	8.96	1.55	67.23
Bagre 3	11.29	ND	6.99	ND	15.74	2.44	18.18	DLD	DLD	6.68	DLD	6.68
Bagre 4	5.11	ND	0.95	ND	ND	11.11	11.11	0.20	ND	6.10	DLD	6.10
Bagre 5	2.99	ND	0.07	ND	38.80	17.98	56.78	0.24	DLD	5.38	DLD	5.38
Besugo 1	ND	ND	ND	5.60	ND	ND	5.60	0.09	3.68	ND	DLD	3.68
Besugo 2	26.76	7.94	21.72	9.45	39.88	43.75	93.08	0.82	DLD	5.96	DLD	5.96
Besugo 3	16.45	3.66	23.20	ND	ND	30.35	30.35	2.52	ND	7.57	DLD	7.57
Besugo 4	18.08	2.61	15.45	ND	ND	104.76	104.76	0.91	DLD	6.00	DLD	6.00
Besugo 5	10.96	2.77	10.18	ND	ND	ND	ND	0.90	0.92	7.89	DLD	8.81
Carpa 1	12.79	2.05	5.66	ND	12.79	47.24	60.03	ND	1.09	9.85	DLD	10.94
Carpa 2	24.67	3.80	15.70	ND	ND	109.60	109.60	0.83	11.72	6.40	DLD	18.12
Carpa 3	23.61	4.62	ND	ND	ND	ND	ND	ND	2.09	8.53	DLD	10.62
Carpa 4	45.05	9.12	ND	ND	ND	ND	ND	ND	ND	ND	5.35	5.35
Carpa 5	66.60	4.47	ND	ND	ND	ND	ND	ND	1.46	ND	DLD	1.46
Tilapia 1	6.87	1.67	DLD	3.13	DLD	5.61	8.75	1.54	DLD	4.92	4.66	9.58
Tilapia 2	14.35	1.54	8.31	ND	ND	ND	ND	3.48	27.46	8.97	DLD	36.43
Tilapia 3	5.68	ND	ND	ND	ND	ND	ND	ND	38.90	ND	DLD	38.90
Tilapia 4	4.30	ND	ND	ND	ND	ND	ND	ND	21.41	ND	DLD	21.41
Tilapia 5	8.52	ND	ND	ND	ND	ND	ND	ND	8.36	ND	DLD	8.36

ND No Detectado

DLD Debajo del Límite de Detección

Tabla 3. Concentración de plaguicidas organoclorados ngg-1 de grasa de pescado

Especímen				α-	γ-	Σ		Mirex	p,p'DDT	p,p'DDD	p,p'DDE	DDT's
	Heptacloro	Aldrin	Endrin	Clordano	Clordano	Clordano	Clordanos					
Bagre 1	565.34	43.73	184.16	ND	1308.34	553.76	1862.09	DLD	DLD	217.42	DLD	217.42
Bagre 2	234.17	ND	ND	ND	ND	1042.26	1042.26	32.97	604.81	95.54	16.58	716.93
Bagre 3	345.68	ND	213.95	ND	482.19	74.61	556.79	DLD	DLD	204.70	DLD	204.70
Bagre 4	149.22	ND	27.60	ND	ND	324.50	324.50	5.88	ND	178.12	DLD	178.12
Bagre 5	66.84	ND	1.61	ND	867.50	401.00	1268.50	5.38	DLD	120.34	DLD	120.34
Besugo 1	ND	ND	ND	129.94	ND	ND	129.94	2.06	85.34	ND	DLD	85.34
Besugo 2	150.59	44.50	10.04	128.99	1524.19	1887.59	3540.77	5.44	DLD	88.98	DLD	88.98
Besugo 3	582.73	129.82	821.90	ND	ND	1075.39	1075.39	89.40	ND	268.31	DLD	268.31
Besugo 4	325.09	46.91	277.83	ND	ND	1884.12	1884.12	16.34	DLD	107.95	DLD	107.95
Besugo 5	249.54	63.22	231.00	ND	ND	ND	ND	20.50	21.13	179.00	DLD	200.13
Carpa 1	929.88	149.29	411.25	ND	929.31	3433.63	4362.94	ND	79.43	715.88	DLD	795.31
Carpa 2	645.74	99.60	ND	ND	ND	2868.97	2868.97	21.90	308.80	167.42	DLD	476.22
Carpa 3	680.71	133.32	ND	ND	ND	ND	ND	ND	ND	245.93	DLD	245.93
Carpa 4	2579.62	522.29	ND	ND	ND	ND	ND	ND	ND	ND	306.62	306.62
Carpa 5	2326.52	156.10	ND	ND	ND	ND	ND	ND	50.88	ND	DLD	50.88
Tilapia 1	412.67	100.63	DLD	188.29	DLD	337.10	525.40	92.57	DLD	295.83	279.94	575.77
Tilapia 2	590.92	63.26	342.30	ND	ND	ND	ND	143.48	1130.53	369.44	DLD	1499.97
Tilapia 3	197.78	ND	ND	ND	ND	ND	ND	ND	1355.04	ND	DLD	1355.04
Tilapia 4	116.47	ND	ND	ND	ND	ND	ND	ND	579.49	ND	DLD	579.49
Tilapia 5	534.70	ND	ND	ND	ND	ND	ND	ND	524.90	ND	DLD	524.90

ND No Detectado

DLD Debajo del Límite de Detección

CONSTRUCCIÓN DE UN SISTEMA DE CAVITY RING DOWN SPECTROSCOPY PARA DETECCIÓN DE NO₂

Jorge Ulises Domínguez Ornelas¹, Francisco Langner González¹, Rodrigo Morales Cueto²

ing_ulises_dominguez@hotmail.com

¹UAEM

²CIQ-UAEM

Introducción

Cavity Ring Down Spectroscopy (CRDS) es una técnica de espectroscopía relativamente nueva que permite detectar concentraciones muy pequeñas (partes por trillón) de gases que absorben luz a longitudes de onda específicas. Mediante esta técnica se puede medir indirectamente la concentración de dichos gases por medio de la observación de la tasa de decaimiento de la intensidad de la luz emitida por un láser hacia el interior de una cavidad óptica resonante, dentro de la cual se tiene la muestra en cuestión. CRDS es el resultado del advenimiento de espejos de muy alta reflectividad ($R > 99.9\%$) para longitudes de onda específicas, así como de sistemas de detección fotónica altamente sensibles.

Las ventajas de esta técnica en comparación con otras técnicas de espectroscopía son diversas. La fluctuación en la intensidad de las emisiones del láser no afecta la medición, debido a que la tasa de decaimiento no depende de la intensidad del haz de luz. Esto significa que pueden usarse láseres más compactos y económicos, como diodos laser (LD, por sus siglas en inglés), lo cual brinda la opción de cambiar estas fuentes por otras de distinta longitud de onda, permitiendo así detectar una gran cantidad de analitos. Por otro lado, la longitud de la trayectoria de absorción es muy grande. La cantidad de muestra mínima que puede ser detectada es proporcional a la distancia que la luz recorre mientras es absorbida por tal muestra. En el CRDS se tiene

un haz de luz que “rebota” miles de veces en los espejos de alta reflectividad dentro de la cavidad. Esto hace que se pueda conseguir una trayectoria de absorción efectiva de varios miles de metros en, por ejemplo, una cavidad de 1 m de longitud. La gran magnitud de tal trayectoria es lo que le brinda al CRDS su enorme sensibilidad, llegando al orden de 40 partes por trillón en volumen. [1]

Los óxidos de nitrógeno o NO_x juegan un papel muy importante en la tropósfera, pues modifican la abundancia de ozono (O₃) y, como consecuencia, la calidad del aire. [2] Cuando hay luz solar presente, existe un estado fotoestacionario entre la oxidación del NO debido al O₃ y la fotólisis de NO₂. La perturbación de estas proporciones a través de la oxidación del NO (causado por radicales peroxi) lleva en última instancia a la producción de O₃ [3]. El NO_x es removido de la tropósfera principalmente a través de su conversión a ácido nítrico (HNO₃). La proporción de NO_x en la tropósfera puede variar en hasta 4 órdenes de magnitud; desde 10 pptv en las áreas oceánicas hasta 1 parte por millón (ppmv) en zonas urbanas. Debido a este gran rango de variación, es importante un método de detección de alta sensibilidad como el CRDS [1].

Construcción del sistema

Una configuración típica para un sistema CRDS se muestra en la Figura 1. La cavidad está hecha de cuarzo y tiene un metro de longitud. Sus monturas poseen conexiones para tuberías

de teflón, las cuales se usarán para establecer un flujo de analito en la cavidad. El láser utilizado es un diodo láser (LD) de nitruro de galio (GaN) que emite luz a 405 nm y que se encuentra instalado en una montura que regula la temperatura del diodo a temperatura ambiente, utilizando un enfriador termoeléctrico (TEC). Aunque el CRDS es una técnica que no se ve afectada por la variación en la intensidad de cada pulso emitido por el láser, sí puede llegar a mostrar variaciones en las lecturas ocasionadas por cambios en la longitud de onda. En el espectro de absorción del NO₂ (Figura 2), existe un pico significativo para la banda de 405 nm, por lo cual el láser (que no tiene un ancho de banda muy amplio) es más que adecuado.

Una de las partes críticas del CRDS es la pulsación del láser. Debido a que el LD es de tipo CW (Constant Wave), el haz de luz que emite es continuo, sin interrupciones. Para resolver este problema, conectamos el LD a un controlador (driver) que está conectado a un generador de función de onda cuadrada trabajando a 1 kHz. Así, podemos controlar la corriente, la temperatura y la frecuencia de pulsado del LD con una misma unidad.

La importancia del sistema de detección debe recalcar. Los espejos usados en la cavidad tienen una muy alta reflectividad ($R > 99.9\%$) para $\lambda = 405$ nm. Esto quiere decir que de la luz que incide en el primer espejo, sólo pasa el 0.1%. Esta luz “rebotará” dentro de la cavidad

miles de veces, siendo absorbida por el analito, y en cada vuelta sólo el 0.01% de esa luz saldrá por el segundo espejo. La enorme atenuación de la luz de entrada con respecto a la de salida hace que el sistema de detección tenga que ser capaz de mostrar señales correspondientes a sólo unos cuantos fotones. Por esto, usamos un tubo fotomultiplicador (PMT), el cual utiliza el efecto de cascada de electrones para amplificar la señal [4]. El respectivo circuito de control se encuentra conectado a su vez a un osciloscopio configurado como un módulo de adquisición de datos. Tal módulo es capaz de obtener hasta 5 millones de muestras por segundo, y se encuentra conectado a una computadora para obtener los datos para su posterior análisis.

Perspectivas del trabajo

Calibración

Una vez que el sistema se encuentre en funcionamiento (esto es, que se encuentre listo para la recepción de datos) debemos realizar la primera calibración. Debido a que el sistema detectará NO₂ (al menos en una fase inicial), debemos obtener una medición de referencia (baseline) con una concentración conocida del mismo, la cual nos ayudará a determinar los parámetros de calibración y, de esa forma, empezar las mediciones en campo.

Analitos

Podemos cambiar el LD por otro de distinta longitud de onda, lo que nos permitirá analizar otros compuestos ambientales. En una fase posterior, podemos incluir una fase de

calentamiento para el estudio de compuestos orgánicos volátiles.

Medición en campo

Se pretende que el sistema sea lo más compacto posible, de manera que pueda transportarse con facilidad a zonas remotas y urbanas en el estado de Morelos para medir la calidad del aire y correlacionarlo con la degradación de los suelos.

Múltiples canales y recolección continua de datos

Es posible escalar el proyecto para realizar múltiples mediciones de distintos compuestos al mismo tiempo. Así, el sistema podrá recopilar datos constantemente para observar las fluctuaciones de diversos compuestos de interés a lo largo del día, el mes o el año.

Referencias

1. Hans D. Osthoff, "Measurement of atmospheric NO₂ by pulsed cavity ring-down spectroscopy" (2006)
2. Seinfeld, J. H. y S. N. Pandis, "Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change", John Wiley, Hoboken, N. J. (1998)
3. Leighton, P. A., "Photochemistry of Air Pollution", Elsevier, New York, (1961)
4. Lubsandorzhev, B, "On the history of photomultiplier tube invention". Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, (2006)
5. B. Kirmse, A. Delon, R. Jost, "NO₂ absorption cross section and its temperature dependence" (1997)

Figuras

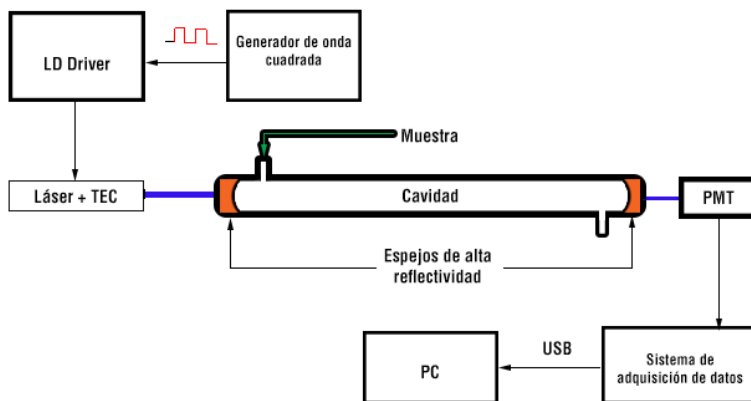


Figura 1. Esquemático de un sistema CRDS básico.

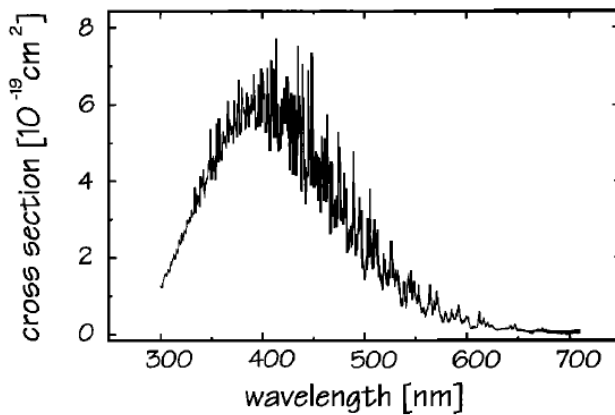


Figura 2. Espectro de absorción para el NO₂. [5]

DEGRADACIÓN DE BENZO(a)PIRENO POR *Serratia marcescens*, EN FASE SEMISÓLIDA

GARCÍA MORALES BRENDA ISABELLE

bellex23@hotmail.com

Egresada de la carrera en Ingeniería Química de la Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería

Asesora: Dra. Constanza Machín Ramírez.

Introducción

Uno de los problemas más serios a nivel mundial, es la contaminación de suelos y acuíferos con petróleo y sus derivados (1). Aunado a los efectos tóxicos que produce sobre la flora y fauna de un hábitat determinado, este contaminante puede ser transportado en el ambiente por diversos mecanismos naturales (precipitaciones pluviales, lixiviación, etc.), incrementando el riesgo a la exposición y el riesgo a la salud.

México posee extensas áreas contaminadas por hidrocarburos, las cuales se encuentran principalmente en sitios cercanos a las instalaciones de extracción y procesamiento del crudo, así como en las zonas marítimas de exportación. En México Petróleos Mexi-

canos (PEMEX) es la empresa paraestatal responsable del proceso del petróleo.

Los hidrocarburos policíclicos aromáticos (HPA's), son productos derivados principalmente de la refinación del petróleo y plantas manufactureras de gas (2). Los HPA's, son altamente hidrofóbicos, están formados por dos o más anillos bencénicos fusionados. Son considerados los compuestos más recalcitrantes del petróleo y potencialmente genotóxicos y carcinogénicos (2). El benzo[a]pireno (BaP) es uno de los HPA's más estudiado debido a su toxicidad, baja solubilidad y biodegradabilidad.

Por la importancia que tiene el suelo, y para poder contribuir en la mejora del medio am-

biente, el objetivo del presente trabajo fue la de evaluar la capacidad de la bacteria *Serratia marcescens* para degradar Benzo[a]pireno en fase semisólida. Utilizando un suelo que se esterilizo en autoclave a una temperatura de 121°C por 15 min, el cual se contamina con 50 ppm de BaP.

Metodología

Este experimento se realizó por triplicado, utilizando 12 frascos de una capacidad de 250 ml, rotulándolos como Tiempo inicial y tiempo final con sus respectivos controles. La matriz suelo: agua fue de 50:50, Con las siguientes condiciones de proceso.

Tabla 1. Condiciones del proceso en la experimentación.

<i>Para T0 y TF</i>	<i>Controles T0 y TF</i>
20 g de suelo estéril.	20 g de suelo estéril.
12 ml de agua de la llave estéril.	12 ml de agua de la llave estéril.
583.33 µl de BaP.	583.33 µl de BaP.
8 ml de inóculo <i>S. marcescens</i> .	
Velocidad de agitación=	80 rpm
Temperatura=	27°

A los experimentos T0 y controles se dejaron 2 horas en agitación para hacer homogénea la mezcla y se le determino los análisis correspondientes para TF y sus respectivos controles se dejaron en agitación durante 7 días y posterior a esto se realizaron los análisis.

Previo al experimento al suelo se le hizo un análisis fisicoquímico determinando, densidad real, densidad aparente, % de humedad, pH, tipo y textura de suelo

Los métodos de análisis utilizados fueron los siguientes:

CUENTA VIABLE. (Unidades Formadoras de Colonias): La cuenta viable de una población microbiana es la concentración absoluta de los organismos viables presentes en una muestra	TÉCNICA DE EXTRACCIÓN PARA SUELO CONTAMINADO EN FASE SEMISÓLIDA. Posteriormente se realizó un análisis gravimétrico para extraer el contaminante, utilizando diclorometano.
---	--

Resultados

Tabla 2. Características fisicoquímicas del suelo.

Parámetro
Suelo.
Densidad real. (g/ cm³).

2.35 ± 0.11
 Densidad aparente (g/ cm^3).
 0.85 ± 0.01
 Humedad (%)
 20
 pH.(23°C)
 7.01 ± 0.02

Textura.

4.76
15.87
79.36

Clase Textural.
ARENO FRANCO.

Tabla 3. Cuenta viable durante la experimentación.

No. muestra	UFC/g	No. muestra	UFC/g
T0A	6×10^5	CT0A	----
T0B	2×10^6	CT0B	----
T0C	14×10^5	CT0C	Contaminación flora autóctona.
TfA	2×10^5	CTfA	Contaminación flora autóctona.
TfB	2×10^6	CTfB	Contaminación flora autóctona.
TfC	1×10^6	CTfC	Contaminación flora autóctona.

Para los ensayos en el tiempo inicial (T0), se obtuvieron resultados consistentes en los 3 triplicados. (TF) No hay un incremento en

la concentración de biomasa para la bacteria. El crecimiento de la bacteria disminuye un poco.

Tabla 4. análisis gravimétrico, por medio de la extracción.

	SB1	CSB1
% REMANENTE	43.32704182	64.22834541
% DEGRADACION	56.67295818	35.77165459

Conclusiones

De acuerdo a los resultados obtenidos, fue imposible determinar si la bacteria *Serratia marcescens* presenta la capacidad de degradar BaP en fase semisólida. De acuerdo a la (tabla 4) se observa que si hay un % de degradación al igual que el control el cual no tenía inóculo. Esto probablemente, se deba a que el BaP se adsorba fuertemente al suelo utilizado, debido a las condiciones de agitación y a la propia naturaleza del suelo, pero esto no pudo ser demostrado con los experimentos que se realizaron en este estudio.

Se pretende llevar las muestras al HPLC de líquidos para confirmar si está presente el BaP. Como se sabe la bacteria *S. marcescens* es productora de compuestos tensoactivos (biosurfactantes). Los cuales favorecen a la biodegradabilidad (3).

Otra cuestión es que en los controles para T0 y Tf se puede apreciar (tabla 3) que hubo crecimiento así como hubo una % de degradación (tabla 4) significativo, el cual podría deberse a la misma flora autóctona del suelo, o a la contaminación del ambiente.

Debido a esto se pretende realizar un experimento el cual se harían solo los controles

agregando un % de cloruro mercuríco (veneno) para así poder eliminar todo del suelo, y realizar la extracción para poder comprobar si el suelo está absorbiendo al contaminante.

Además de realizar este experimento y para corroborar los resultados, se hará una cinética de degradación, mandando a esterilizar el suelo con radiación gamma en el ININ (El Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares) este experimento se haría durante 28 días haciendo extracciones cada 2 días.

Referencias

Libros

- 1.-Colin B. 2001. Química ambiental. Edit:Reverte. España. pp. 367-372.
- 2.-Kanaly R., Bartha R., Watanabe K. and Harayama S. 2000. "Rapid mineralization of benzo[a]pyrene by microbial consortium growing on diesel fuel. Appl. Environ. Microbiol. 66 (10): 4205-4211.

Artículos. 3.-PRODUCCIÓN DE BIOSURFACTANTES POR CEPAS DE *Serratia marcescens* Nashbly S. Rosas, Fernando Martínez, María del Refugio Trejo Centro de Investigación en Biotecnología, Universidad Autónoma del Estado de Morelos

OBTENCIÓN DE DENSIDADES DEL METANOL CON SIMULACIÓN MOLECULAR

Miriam García Sánchez, Friné López Medina, Jorge Castillo Tejas y Shirley Carro Sánchez

lopezmedinafrine@gmail.com

Universidad Autónoma de Tlaxcala

Introducción

La caracterización de mezclas electrolíticas, como consecuencia de la naturaleza propia de sus compuestos, resultado de la disociación y solvatación de los iones por la acción de un solvente, vislumbra la importancia del conocimiento de las propiedades de los solventes y mezclas de solventes. Los alcoholes son solventes orgánicos ampliamente usados en la industria, su importancia radica en su naturaleza anfífila, ya que conduce a las características deseables de un solvente. La descripción de las interacciones entre moléculas de alcoholes como consecuencia de su alta polaridad, debe llevarse a cabo empleando modelos de potencial que cuantifiquen las interacciones propias de su naturaleza, es decir, aquellas asociadas a las

cargas de los átomos que forman la molécula. El metanol como solvente, es uno de los más utilizados a nivel industrial.

Jorgensen (1981 y 1986), Haughney y col. (1986 y 1987), Pálinkás y col. (1987), van Leeuwen y Smit (1995), Chen y col. (2001), Honma y col. (2003), Pérez Pellitero y col. (2008), han propuesto diferentes funciones potenciales para la predicción de propiedades del metanol en fase líquida, vapor o ambas. El objetivo de esta investigación es la codificación de un modelo molecular rígido para metanol que permita la estimación de densidades del componente puro mediante técnicas de Simulación Monte Carlo (MC) empleando un ensamble de Gibbs.

Método

Modelo Molecular empleado

El metanol (MeOH), tiene un ángulo de enlace C-O-H de 108.53° (van Leeuwen y Smit, 1995). Es una molécula altamente polar, por lo que se emplea el potencial OPLS (*Optimized Potential for Liquid Simulation*) propuesto por Jorgensen (1986) que combina las interacciones de cargas electrostáticas y las interacciones de no enlace. La energía de no enlace se calcula con el potencial Lennard Jones y las interacciones de cargas electrostáticas se estiman con un potencial Coulómbico. El ángulo y las distancias de enlace son fijos y son r_{CO} , 1.4246Å y r_{OH} , 0.9451Å . Se aplica truncamiento al potencial Lennard-Jones y se calculan contribuciones de largo alcance de la energía potencial del sistema mediante el método de campo de reacción (RF), el modelo de potencial intermolecular para el MeOH se obtiene con la siguiente expresión:

$$u(r_{ij}) = \sum_i^m \sum_j^n 4\epsilon_{ij}^{ab} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}^{ab}}{r_{ij}^{ab}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}^{ab}}{r_{ij}^{ab}} \right)^6 \right] + \frac{q_i^a q_j^b}{r_{ij}^{ab}} \left[1 + \frac{\epsilon_{RF} - 1}{2\epsilon_{RF} + 1} \left(\frac{r_{ij}^{ab}}{r_c} \right)^3 \right]$$

Los parámetros del modelo OPLS son presentados en la Tabla 1. r es la distancia entre el sitio de interacción a de la molécula i y el sitio de interacción b de la molécula j . ϵ_{RF} es el continuo dieléctrico y r_c el radio de corte de largo alcance, el cual fue establecido de 10Å para ambos potenciales.

Se realizó una codificación en lenguaje de programación FORTRAN para estimar las interacciones moleculares descritas ante-

riormente, empleando técnicas de simulación Monte Carlo en ensamble de Gibbs. Se llevaron a cabo simulaciones, las etapas de equilibración y producción fueron de 1×10^5 y 9×10^5 ciclos MC, respectivamente. El promedio de las densidades de líquido y vapor en el ensamble fueron estimadas durante el periodo de producción. Se estimó el error estadístico para cada uno de los valores obtenidos.

Resultados

Detalles de la Simulación Molecular

La simulación corresponde a un sistema con 2 regiones, cada una representa una fase homogénea I y II, con un volumen (V_I y V_{II}) y número de partículas (N_I y N_{II}) definido. El sistema se encuentra a temperatura, presión y volumen constante (ensamble NVT, Allen y Tildesley, 1976). Asimismo, se emplean condiciones de frontera periódica. El sistema consiste de 125 moléculas en cada fase. La distribución de probabilidad consiste en fluctuación de volumen de las regiones de simulación, desplazamiento, rotación, e intercambio de moléculas (Frenkel y Smith, 1996).

La molécula se construyó mediante conjuntos de vectores y se generó la configuración inicial en las regiones que constituyen las 2 fases, la cual consistió en un enrejado cúbico simple (ver Figura 1). En Figura 2, se encuentran resultados de energía potencial (Figura 2a) y densidad (Figura 2b) de simulación del equilibrio de fases líquido-vapor de MeOH

a una $T=425\text{K}$. Se obtuvieron densidades de fase líquida y vapor para un intervalo de temperaturas desde 350K a 470K , y se compararon con los obtenidos por van Leeuwen y Smit. En la Figura 3a, puede verse una clara subestimación en las densidades de líquido y vapor para temperaturas por encima de 400K respecto a las obtenidas por van Leeuwen y Smit. Para $T=350\text{K}$ se observa una sobreestimación de la densidad de vapor, mientras que la densidad del líquido (a la misma temperatura), presentó un porcentaje de error de 5.23. Finalmente, los resultados se compararon con datos experimentales (Srivastava y Smith, 1986) observándose, de manera general, una subestimación de las densidades de líquido y una sobreestimación en las densidades de vapor (ver Figura 3b).

Conclusiones

Se estimaron datos de densidades lo cual permitió reproducir la curva de saturación del MeOH. Se contrastan los resultados obtenidos con datos de simulación reportados por van Leeuwen y Smit (1995), quienes emplearon el mismo modelo molecular. Se encuentran diferencias considerables a temperaturas superiores a los 420K , esto puede ser por la técnica empleada para calcular correcciones de largo alcance, pues este trabajo considera RF, mientras que van Leeuwen y Smit emplean el método sumatorias de Ewald. Además, la desviación de los resultados de este trabajo con respecto a los experimentales puede atribuirse al conjunto de parámetros

empleados para el modelo. En general, el comportamiento de los datos obtenidos es adecuado para los fines de la investigación.

Agradecimientos

Se agradece el apoyo brindado por el Cuerpo Académico “Fluidos Complejos”, clave UATLX-CA-217 con recursos del Programa Estratégico de Cuerpos Académicos, Calidad y Productividad para su internacionalización CACyPI-UATx-2014.

Referencias

1. Jorgensen, W. L. *J. Phys. Chem.* 90, 1276-1284 (1986).
2. Haughney, M., Ferrario, M. y McDonald I. R. *J. Phys. Chem.* 91, 4942-4940 (1987).
3. Pálinkás, G., Hawlicka, E. y Heinzinger, K. *Phys. Chem.* 91, 4334-4341 (1987).
4. Van Leeuwen, M. E., Smit, B. *Phys. Chem.* 99, 1831 (1995).
5. Chen, B., Pottof, J., Siepmann, I. *J. Phys. Chem. B*, 105, 3093-3104. (2001).
6. Honma, T., Liew, Ch. Ch., Inomata, H., Arai, K. *J. Phys. Chem.* 107, 3960-3965 (2003).
7. Perez-Pellitero, J., Bourasseau, E., Demachy, I., Ridard, J., Ungerer, P., Mackie, A.D. *Phys. Chem.*, 112 (2008).
8. Allen, M.P., Tildesley, D.J. *Computer Simulation of liquids* (Oxford Univ. Press, New York, 1987).
9. Frenkel, D., Smith, B. *Understanding molecular simulation* (Academic Press, San Diego, 1996).

Tablas

Tabla 1. Parámetros del modelo OPLS para el MeOH.

Átomo o grupo	q , carga e^-	$\sigma(\text{Å})$, tamaño de molécula	ϵ/k_B (K), interacción energética/cte. Boltzmann
CH ₃	0.265	3.775	104.17
O	-0.700	3.07	85.55
H	0.435	0	0

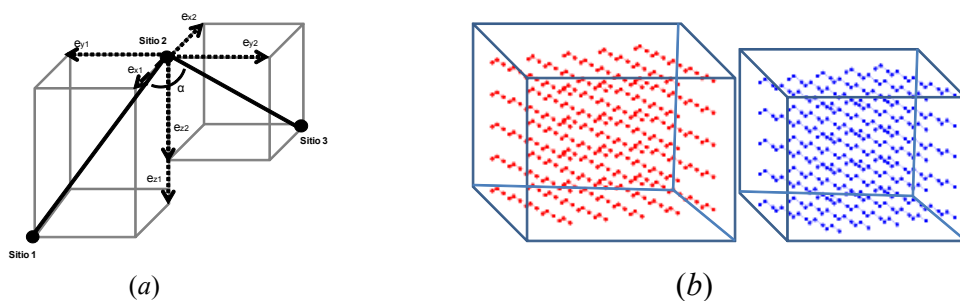


Figura 1. (a) Arreglo vectorial para la construcción de una molécula de MeOH sitio por sitio (sitio 2: átomo de oxígeno, sitio 1: grupo CH₃ y sitio 3: átomo de H). (b) Enrejado cúbico simple.

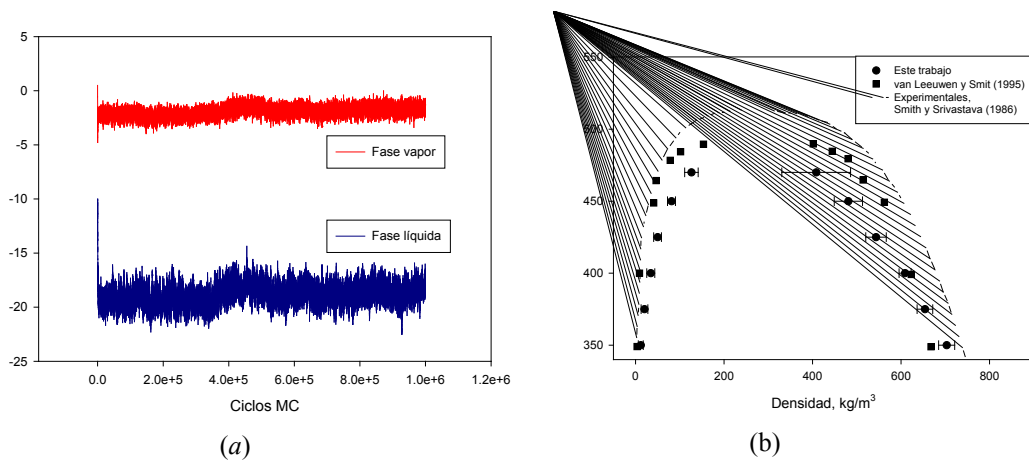
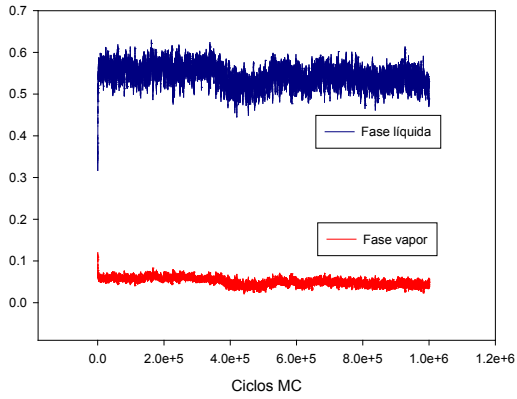
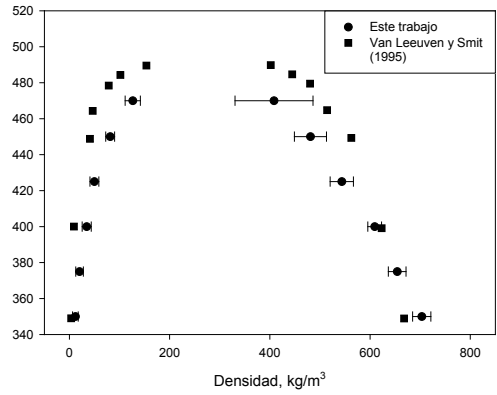


Figura 2. Evolución del equilibrio de fases líquido-vapor de metanol a 425K.



(a)



(b)

Figura 3. Curva de saturación del MeOH, van Leeuwen y Smit (1995) y experimentales.

INMOVILIZACIÓN DE *BURKOLDERIA SP.* SOBRE DIFERENTES SOPORTES PARA LA REMOCIÓN BIOLÓGICA DE PARATIÓN METÁLICO

Maikel Gilberto Fernández-López¹, Elida Carolina Popoca-Ursino¹, Raunel Tinoco-Valencia², Ma. Laura Ortiz-Hernández¹

Correo: fmaikel44@yahoo.com

¹Centro de Investigaciones en Biotecnología

²Instituto de Biotecnología

Introducción

Los plaguicidas organofosforados representan el 38% de los plaguicidas usados mundialmente (1). Si bien se han logrado aislar diversos microorganismos capaces de degradar éstos plaguicidas, los reportes sobre bacterias que mineralizan el paratión metílico (PM) son escasos. Esto se debe principalmente a que el p-nitrofenol (PNF), producto de la hidrólisis del PM resulta altamente tóxico para las bacterias. El Laboratorio de Investigaciones Ambientales del CEIB aisló de suelos agrícolas del estado de Morelos una cepa de *Burkholderia* sp., capaz de hidrolizar el PM y utilizar el PNF como única fuente de carbono (2). Para aumentar los rendimientos de degradación, las células se inmovilizaron sobre diferentes

soportes y se evaluó su capacidad de resistir diferentes concentraciones de PNF.

Métodos

Se cultivó *Burkholderia* sp. en caldo de soya tripticaseína (CSTC) suplementado con PM (50 mg/L) por 18 horas a 30 °C y 120 rpm. La biomasa fue colectada por centrifugación y lavada dos veces con una solución de NaCl 0.8% (p/v). Se ajustó a una densidad óptica de 0.5 a 600 nm y la suspensión resultante fue utilizada como inóculo para las pruebas de degradación del PM y PNF. En todos los experimentos se utilizó un volumen de inóculo 1% (v/v). En las pruebas de remoción de plaguicidas fue utilizado un medio de sales minerales (MM) suplementado con

PM o PNF como única fuente de carbono. Para el cultivo en suspensión se llevó a cabo una cinética durante 24 horas a 30 °C y 120 rpm para conocer el comportamiento del crecimiento de las bacterias (cuenta viable), la hidrólisis del PM, la generación y degradación del PNF. Para los ensayos de inmovilización se utilizaron tres soportes: zeolita pulverizada, trozos de *Opuntia* sp. y fibras de *Agave* sp. Los soportes se adicionaron al 2% (p/v) en CSTC, después de inocular los soportes, estos se incubaron durante 24 horas a 30 °C y 100 rpm, se lavaron los soportes dos veces con solución de NaCl 0.8% para eliminar las células libres. Se adicionó el MM suplementado con PM a 50 mg/L como fuente de carbono.

Para determinar el efecto tóxico del PNF sobre *Burkholderia* sp., se siguió la misma metodología descrita anteriormente y se sustituyó el PM con PNF a 25; 50; 100; 200; 300 mg/L. Se determinó la viabilidad de las células después de 24 horas de incubación.

Para cuantificar la concentración de plaguicida, se colectó 1 ml de muestra de cada matraz a diferentes intervalos de tiempo, se adicionó 1 ml de acetato de etilo y la mezcla se homogenizó y se dejó reposar hasta la separación de fases. La fase orgánica se recuperó y se filtró a través de embudos de vidrio empacados con lana de vidrio y sulfato de sodio anhidro, el procedimiento

se repitió tres veces (3). Finalmente, el extracto se dejó secar y se adicionó 1 ml de metanol al 50 %. Las muestras fueron analizadas por HPLC en columna C18 con un flujo de 0.8 ml/min, en un sistema metanol-agua 60:40 y a 30 °C. Las lecturas se realizaron a 270 nm.

Resultados

La inmovilización celular sobre los soportes propuestos no brindó grandes diferencias entre sí en el proceso de degradación, sin embargo fue muy superior al cultivo en suspensión debido a que se alcanzan valores de biomasa superiores. Para los dos soportes de origen vegetal la cantidad de plaguicida adsorbida fue superior a la zeolita (ver Figura 1).

Burkholderia sp., a pesar de usar el PNF como fuente de carbono, no es capaz de crecer a concentraciones de este compuesto por encima de 25 mg/L en cultivos en suspensión (ver Figura 2), sin embargo las células inmovilizadas resisten concentraciones de PNF superiores. Las células inmovilizadas en *Opuntia* sp. son capaces de permanecer viables hasta una concentración de 200 mg/L de PNF. La viabilidad de las células inmovilizadas en zeolita se ve afectada a concentraciones por encima de 100 mg/L. Para las células inmovilizadas sobre fibras de *Agave* sp., a pesar de que desaparece el 100% del PNF a una concentración de 100 mg/L, la cantidad de células inmovilizadas sobre el soporte disminuye 71.2%.

Conclusiones

1. La inmovilización celular aumentó la velocidad de degradación comparado con los cultivos en suspensión.
2. Los soportes de *Opuntia* sp. y *Agave* sp. adsorben una mayor cantidad de PM comparado con la zeolita.
3. Las células inmovilizadas resisten mayores concentraciones de PNF comparado con las células en suspensión y son capaces de degradar este compuesto a altas concentraciones.

Referencias

1. Singh, B.K., Walker, A. *FEMS Microbiol Rev.*, 30,428–471 (2006).
2. Popoca-Ursino, E.C. Aislamiento de bacterias con capacidad de degradación de plaguicidas organofosforados, evaluación molecular de sus actividades. Tesis M. Bt., Centro de Investigación en Biotecnología (2012).
3. Ortiz-Hernández, M.L., Sánchez-Salinas, E. *Rev. Int. Contam. Ambient.*, 26,27-38 (2010).

Figuras

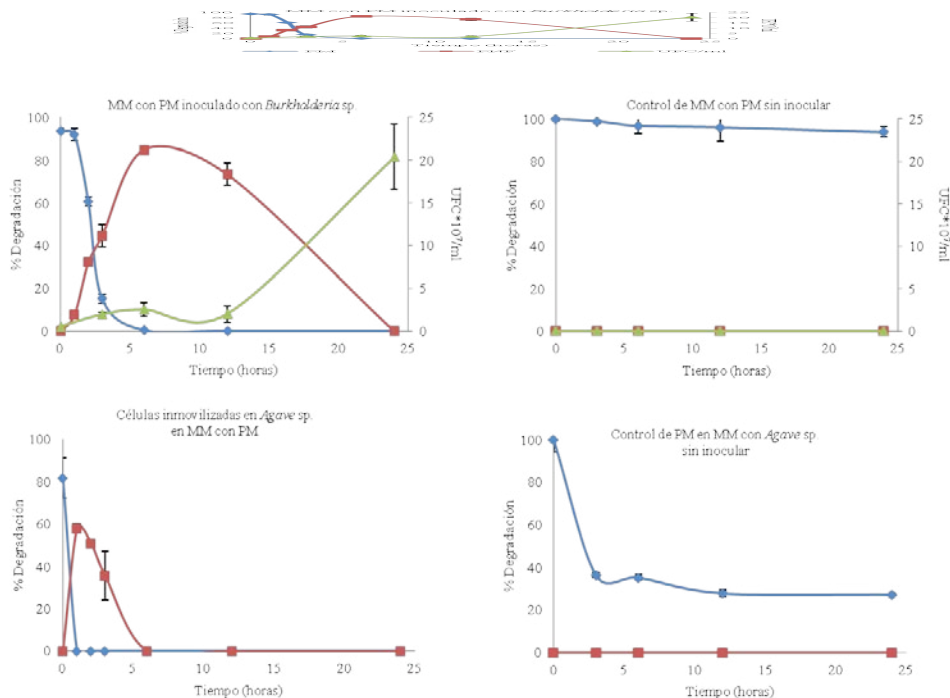


Figura 1. Cinética de Crecimiento y degradación en células en suspensión e inmovilizadas.

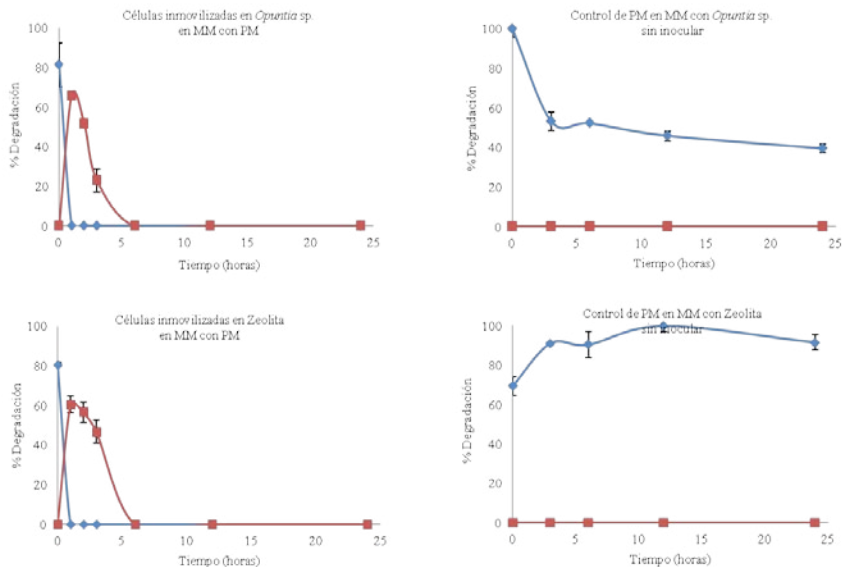


Figura 1. Continuación

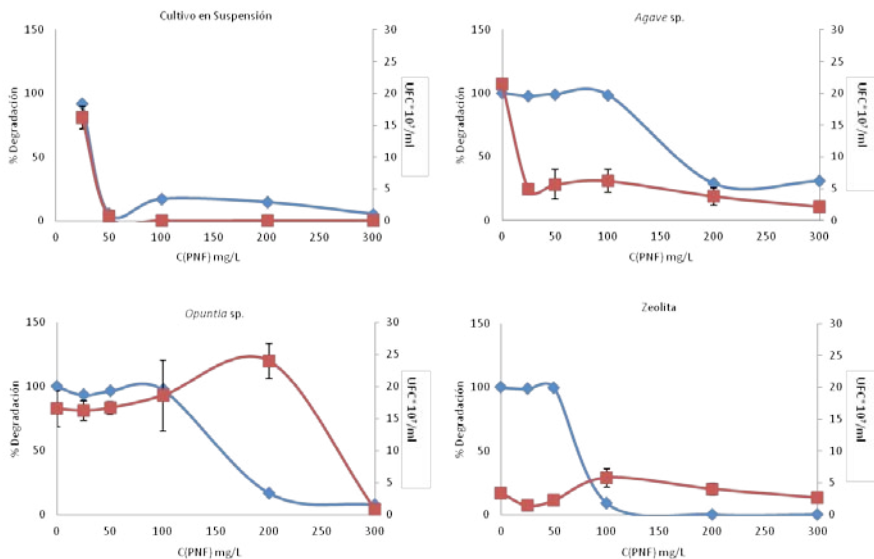


Figura 2. Inhibición del crecimiento por PNF en células en suspensión e inmovilizadas

Carteles

SÍNTESIS EN EMULSIÓN INVERSA VÍA RAFT DE UN COPOLIMERO DE ACRILAMIDA CON HEXADECIL ACRILAMIDA

Rubén Saucedo Lara¹, J. Víctor Amador Noya¹, Shirley Carro Sánchez*¹,
Valeria J. Gonzales Coronel²

¹Facultad de Ciencias Básicas Ingeniería y Tecnología, Universidad Autónoma de Tlaxcala, Calzada Apizaquito S/N, Apizaco, Tlaxcala. C.P.90300

*shir_cs@hotmail.com

²Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Av. San Claudio y 18 Sur, Col. *San Miguel Ciudad Universitaria*. Puebla, Puebla C.P. 72520

Introducción

Una de las técnicas usadas recientemente para producir copolímeros, es la polimerización radicalica controlada, que hace uso de agentes de transferencia de cadena¹, esta técnica permite controlar la longitud de la cadena, la composición, polidispersidad y la arquitectura de la cadena, parámetros que tienen relación con las propiedades macroscópicas del polímero². Una de las técnicas de polimerización radicalica controlada es la de transferencia de cadena (RAFT).

En este trabajo se estudiaron dos técnicas para la obtención de la copolimerización vía RAFT de acrilamida con el monómero hidrófobo Hexadecil-acrilamida (HDAM), las

cuales son denominadas: *in situ* y *por etapas* empleando como agente de transferencia un Tritiocarbonato diácido (TCA). La incorporación de grupos hidrófobos en la cadena hidrófila (PAM) propicia un fuerte aumento de la viscosidad, haciendo así que tenga aplicaciones en recuperación de petróleo, revestimientos y cosméticos².

Sección experimental

Se efectuaron polimerizaciones en emulsión inversa vía RAFT, utilizando AM como monómero hidrófilo, HDAM como monómero hidrófobo, 4,4 Azobis Ácido Cianovalerico (ACVA) y 2,2 Azobisisobutironitrilo (AIBN) como iniciadores, Span 80® como emulsificante, Tritiocarbonato diácido como agente

de transferencia con una relación de concentración molar agente / iniciador de [1/1]. El agente RAFT y el HDAM fueron sintetizados y proporcionados por la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (BUAP).

Para la obtención de los copolímeros PAM-HDAM, se utilizó el macroagente AM-TCA [1/1] sintetizados con dos iniciadores (AIBN y ACVA). Se probaron dos técnicas de obtención, denominadas en este trabajo como polimerización *in situ* y *por etapas*. La polimerización *in situ*, consiste en la síntesis del macro agente RAFT [1/1] durante 10 hrs., después del tiempo de reacción, inmediatamente, en la misma mezcla de reacción, se agrega HDAM reaccionando por tres hrs más para formar el copolímero. La polimerización por pasos contempla dos etapas, la primera es la obtención del macro agente RAFT [1/1] y su purificación. La segunda consiste en polimerizar el macro agente RAFT con HDAM durante tres hrs realizando una emulsión nueva.

Resultados

Se sabe que la naturaleza del iniciador posee un carácter importante en la emulsión, se ha demostrado que se obtienen buenos resultados con iniciadores parcialmente solubles tanto en la fase acuosa como dispersa³. Respecto al efecto del tipo de iniciador, se obtuvo una conversión de 70.10% y un peso molecular viscosimétrico, Mv, de 167774 gr/gr-mol con AIBN mientras que para ACVA fue de 93.0% y

un Mv de 37100 gr/gr-mol. Aparentemente, el tipo de iniciador no influye en la síntesis del macroagente, sin embargo, es necesario probar el carácter viviente del macroagente AM-TCA copolimerizando con HDAM. En la Figura 1 se compara la viscosidad obtenida con el macroagente y el copolímero obtenidos con el empleo de los dos iniciadores utilizando ambas técnicas *in situ* y *en etapas*. Se puede observar que, cuando se emplea la técnica *en etapas*, la viscosidad intrínseca disminuye (Tabla 1) al agregar el monómero hidrófobo, señal de la incorporación del mismo, ya que se ha demostrado que a bajas concentraciones, este tipo de copolímeros tiende a formar agregados intermoleculares que disminuyen en la viscosidad.

En las figuras 2 y 3 se muestran los espectros de RMN para las dos técnicas empleadas, *in situ* y *en etapas*, respectivamente, con ambos iniciadores. Cuando se emplea la técnica *in situ* se observa homopolimerización, confirmado lo observado mediante viscosimetría. Para las polimerizaciones por etapas el espectro RMN, se muestra la incorporación del grupo metilo en un desplazamiento de 1.12 PPM, los protones correspondientes al metileno de acrilamida en la señal de 3.83 ppm, el protón de metino en la señal de 3.80. Las señales de 3.753PPM y 5.88 corresponden a la mezcla de disolventes. Sin embargo, el porcentaje de incorporación del monómero hidrófobo es mayor cuando se emplea ACVA (del 65% v.s. 54%).

Conclusiones

Para la formación de los copolímeros en la técnica de *in situ* mediante RMN, no se aprecia la incorporación del HDAM con ninguno de los dos iniciadores ocupados, pero con la técnica por etapas se puede apreciar la presencia del HDAM dentro de la cadena polimérica, por lo que se comprueba que puede crecer la cadena debido al carácter viviente del macroagente.

Se concluye que la mejor técnica para obtener los copolímeros PAM-HDAM es por etapas utilizando como iniciador al ACVA, ya que utilizando este iniciador no se presentan señales de los disolventes, y el Mv obtenido es aceptable.

Considerando estos resultados, el trabajo subsecuente es realizar copolimerizaciones con otros monómeros hidrófobos con diferente longitud de cadena para observar el efecto de la estructura en las propiedades reológicas y controlar la estructura de la cadena, para obtener copolímeros por bloques de PAM-Hidrófobo.

Agradecimientos

Los autores agradecen a PROMEP por el financiamiento del proyecto 103.5/12/2116

Referencias

1. R. Saucedo, "Síntesis y Caracterización de macroagentes de poli(acrilamida) para la obtención de polímeros asociativos" en el XXXV Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia

en Ingeniería Química, Nuevo Vallarta, Jalisco, México. 8 de mayo 2014.

2. Yuya M., Hideharu M. *Macromol. Chem. Phys.* 211, 1137-1147 (2010).
3. Kobitskaya E., 2008, Synthesis of Hydrophobically Modified Polyacrylamide in Inverse Miniemulsion. Tesis Ulm, Moscú Rusia.

Tablas

Tabla 1. Mv obtenido con macroagente y los copolímeros con AIBN y ACVA.

	AIBN Mv (gr/gr-mol)	ACVA Mv (gr/gr-mol)
Macroagente	167774	37100
PAM-HDAM <i>in situ</i>	18615	21815
PAM-HDAM por etapas	62583	47774

Figuras

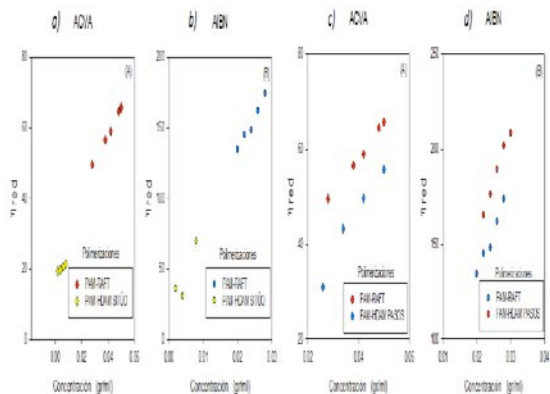


Figura 1. Comportamiento de la hred de copolímeros PAM-HDAM *in situ* [a) y b)] con ACVA y AIBN; por etapas [c) y d)] con ACVA y AIBN.

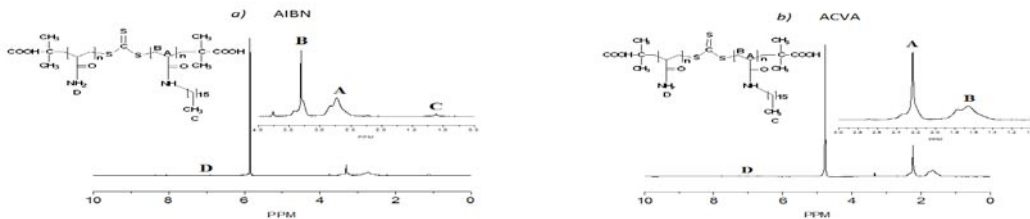


Figura 2. Espectro RMN del copolímero PAM-HDAM con AIBN a) y con ACVA b) en técnica in situ.

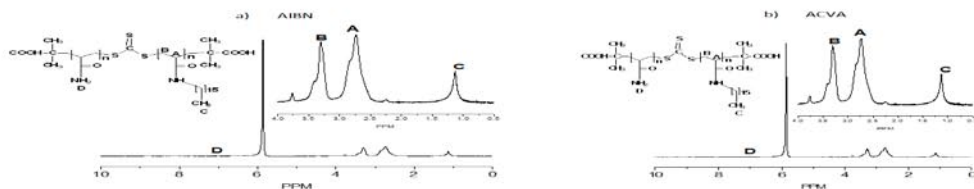


Figura 3. Espectro RMN del copolímero PAM-HDAM con AIBN a) y con ACVA b) en técnica en etapas.

RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE PROTEÍNAS EN LA UAEM

Carlos Amero¹, Roberto Maya-Martínez¹, Paloma Gil-Rodríguez¹, Gilberto Valdes², Angel Peláez-Aguilar¹, Lina Rivillas¹, Nina Pastor²

carlosamero@uaem.

¹Centro de Investigaciones Químicas, UAEM

²Facultad de Ciencias, UAEM

Introducción

Los mecanismos que llevan a ciertas proteínas a formar fibras amiloides o agregados no son claros. Estas fibras amiloides insolubles, que están formadas a partir de proteínas solubles en condiciones normales, caracterizan a más de 20 enfermedades incluyendo Alzheimer, enfermedades priónicas, amilodosis de cadena ligera y Parkinson, entre otras (1).

La amiloidosis primaria o amiloidosis de cadena ligera de anticuerpos es una enfermedad potencialmente mortal, causada por la deposición extra-celular de agregados fibrilares insolubles en distintos órganos vitales. Esta acumulación de agregados impide el funcionamiento adecuado de los sistemas.

Específicamente en este proyecto se están estudiando las cadenas ligeras de inmunoglobulina de la línea germinal 6a y 3r.

Para obtener una mejor comprensión de la formación de fibras amiloides, se plantea la caracterización de las proteínas en sus formas monoméricas, determinando la estabilidad termodinámica, la dinámica y los cambios conformacionales. Se intenta correlacionar estos parámetros con la propensión de formación de fibras y así determinar qué es lo que lleva a una de estas proteínas monoméricas a formar fibras amiloides.

Métodos

La Resonancia Magnética Nuclear (RMN)

es, junto con la difracción de rayos X, la única metodología que puede usarse para determinar la estructura molecular de macromoléculas con alta resolución (2). La RMN permite, además, estudiar de manera eficaz y sencilla las interacciones entre biomoléculas. Asimismo, la mayor ventaja de la RMN es la de ser la única metodología que permite el estudio de la dinámica de macromoléculas con resolución atómica en varias escalas de tiempos (2).

Debido a esta capacidad de monitorear los cambios estructurales, dinámicos y las distintas interacciones, con resolución atómica, la RMN permite obtener información de los mecanismos de formación de fibras amiloides difícilmente obtenidos con otra metodología.

Preparación de muestras de RMN. Para realizar estudios de macromoléculas por RMN, el primer paso necesario es contar con muestras adecuadas. La RMN es una técnica de sensibilidad muy baja, por lo cual requiere concentraciones de muestras más altas que otras técnicas. En concreto, la producción de muestras de RMN requiere la obtención de miligramos de muestra por litro de cultivo, lo que hace que la optimización de los protocolos sea indispensable.

Así mismo, para poder estudiar moléculas de peso molecular entre 10,000 daltones y 50,000 daltones por RMN, es indispensable

el uso de un marcaje con Nitrógeno 15 y Carbono 13 (2).

Las proteínas recombinantes fueron sobre-expresadas en *E. Coli* en 1L de medio mínimo M9 con ^{15}N cloruro de amonio y/o ^{13}C -glucosa como única fuente de nitrógeno y/o carbono. La purificación se realizó de acuerdo a protocolos ya establecidos. Una vez obtenidas, las proteínas puras fueron disueltas en soluciones amortiguadoras con pH controlado y concentraciones de baja sal.

RMN. En cualquier análisis de RMN, es completamente necesario asignar cada señal a su correspondiente amino-acido. Esta asignación se llevó a cabo utilizando series de espectros de correlación que utilizan acoplamiento escalares a lo largo de la cadena peptídica, como son HNCA, HNCOCA, HNCACB, CBCACONH, HNCO y HNCACO(2). Los experimentos de RMN se efectuaron a temperatura controlada en el espectrómetro de 700 MHz equipado con sonda criogénica de tres canales. Todos los datos de RMN fueron procesados usando NMRPipe (3).

Los experimentos para medir la dinámica de la muestra en distintas escalas de tiempo fueron experimentos de relajación T1, T2, Noe (ps-ns) o experimentos de dispersión (ms). Se realizaron estudios estructurales por medio de espectros tipo Noe.

Resultados

Se produjeron muestras marcadas con Nitrógeno 15 y Carbono 13 para las proteínas: 6a, 6a-R25, 3c, 3c-p7. Los espectros de estas proteínas fueron asignados utilizando experimentos de triple resonancia en tres dimensiones. Asimismo se obtuvo la estructura tridimensional de las proteínas 6a y , 6a-R25, donde se pudo observar que el plegamiento de las dos es muy similar.

Referencias

1. Dobson CM. *Semin Cell Dev Biol.* 15, 3-16 (2004).
2. Cavanagh J, Fairbrother WJ, Palmer III AG, Skelton NJ, Rance M. *Protein NMR Spectroscopy: Principles and Practice.* (Elsevier Academic Press, 2006).
3. Delaglio F, Grzesiek S, Vuister GW, Zhu G, Pfeifer J, Bax A. *J Biomol NMR.* 6, 277-293 (1995).

SIMULACIÓN DE LA REFORMACIÓN DE NAFTAS EN CAMAS FLUIDIZADAS UTILIZANDO DINÁMICA DE FLUIDOS POR COMPUTADORA

Ing. Erika Atriano Pérez, Dr. Arturo Ortiz Arrollo

Universidad Autónoma de Tlaxcala

eri1788@hotmail.com

Introducción

El proceso de reformación catalítica surge por la necesidad de aumentar el octanaje en las mezclas de nafta para producir gasolina y, por las exigencias mundiales en controles ambientales, reducir y eliminar el uso del plomo en combustible de motor. La optimización avanzada de un proceso tan complejo requiere de modelos matemáticos detallados capaces de predecir con precisión la composición del reformado, la calidad del producto, y el ciclo de vida del catalizador en un amplio intervalo de condiciones de operación.

En relación con el comportamiento de los lechos fluidizados, se han desarrollado diversos métodos. Entre los experimentales

más comunes se encuentran: el método de la pérdida de carga y método de las fluctuaciones de presión. Sin embargo, la reformación de naftas es más compleja, por ello los anteriores métodos no son factibles, ya que implica costos y tiempo elevados. Por lo tanto, es necesario desarrollar un método de fácil manejo, de bajo costo y eficiente, que permita ver si es factible aplicarlo al reformado de naftas. En este trabajo se propone modelar un reactor de cama fluidizada con un método computacional de dinámica de fluidos (CFD) para la reformación de naftas.

Metodología

La simulación se realizará utilizando un modelo de CFD (Fluent o MFX) que se basa

en una descripción de un fluido euleriano de fases múltiples. El flujo de granulado constituye la base para el modelado de la cinética que permitirá la turbulencia de las fases sólidas. Un sistema de coordenadas cartesianas en dos dimensiones se utiliza para describir los dominios de cálculo.

Mathiesen y col. (2000a y 2000b) propusieron un modelo de flujo gas/sólido, que se generaliza para una fase de gas y un número N de fases sólidas. Esto se hizo con el fin de describir las distribuciones de tamaño de partícula más realista. Dieron una descripción detallada del modelo, incluyendo una discusión de la consistencia del modelo de gas/partículas de múltiples fases.

Cada fase sólida se caracteriza por un diámetro, factor de forma, densidad y coeficiente de restitución. La presencia de cada fase se describe por una fracción de volumen que varía de cero a la unidad. Las leyes de conservación de la masa, cantidad de movimiento y la temperatura granular se cumplen para cada fase individual. Todas las fases comparten una presión de fluido.

La turbulencia en fase gaseosa se modelará mediante un modelo, Deardorff (1971) a escala inferior a la malla (SGS). Las escalas más grandes se simularán directamente, mientras que las pequeñas escamas se modelarán con el modelo de turbulencia SGS. Con el fin de calcular las fluctuaciones en las fases sólidas se

resuelve una ecuación de conservación de la temperatura granular para cada fase sólida.

Para realizar la simulación se tomarán en cuenta lo siguiente:

Reformación de naftas

La reformación catalítica se realiza a temperaturas elevadas (450-520 ° C) y presiones moderadas (4-30 bar). Mediante el uso de un catalizador el proceso se lleva a cabo en tres o cuatro reactores en serie y en presencia de hidrógeno (equivalente a 4-6 mol H₂/mol de hidrocarburo). Es importante mencionar que el mismo proceso de reformación produce a su vez hidrógeno que es utilizado en otros reactores o bien, reciclado al reformador. En la reformación catalítica de naftas se reorganizan o reconstruyen las moléculas de hidrocarburos lineales para producir hidrocarburos ramificados e isómeros que mejoran el octanaje del producto.

Proceso con regeneración continua del catalizador

Las deficiencias del reformado con regeneración cíclica se solucionan con un proceso de regeneración continua a baja presión (50 psig), el cual se caracteriza por una elevada actividad del catalizador con reducidos requisitos en éste, produciendo un reformado más uniforme con mayor contenido de aromáticos e hidrógeno de alta pureza. Este tipo de proceso utiliza un diseño de reactor de lecho móvil, en el cual los reactores están apilados. El catalizador se mueve por grave-

dad, fluyendo desde la parte superior hacia el fondo de los reactores apilados. El catalizador gastado es retirado desde el último reactor y enviado a la parte superior del regenerador para combustionar el coque. El transporte de catalizador entre los reactores y el regenerador se hace por un método de elevación con gas. Durante el funcionamiento normal, pequeñas cantidades de catalizador se retiran continuamente, por lo que catalizador fresco o regenerado se añade a la parte superior del primer reactor a fin de mantener un inventario constante del catalizador [Fahim 2010].

Modelo de Smith (1959)

Constituido por tres clases de hidrocarburos: parafinas, naftenos y aromáticos, donde cada clase de hidrocarburo es representado por un único compuesto que tiene las propiedades promedio de esa clase (no se hace distinción entre constituyentes de distinto número de átomos de carbono dentro de cada clase). El hidrogeno y gases ligeros (etano, propano y butano) son también considerados en este modelo. Así, el modelo involucra en total a 5 pseudocomponentes, y se constituye en el primer intento para desagrupar la nafta en varios constituyentes [Rodríguez 2011].

Perspectivas del trabajo

Aplicando el modelo de Mathiesen y col. (2000a y 2000b), así como adaptar el mo-

delo cinético de Smith en el reactor de cama fluidizada, se espera obtener eficiencia en el reactor, con ello el proceso de reformación será aun más eficiente y el proceso de reformado de naftas será aun mas rápido comparado con un reactor de cama fija, que es el actualmente utilizado.

Referencias

Revistas

1. Mathiesen, V, Solberg, T, Hjertager, B.H., (2000a). Prediction of gas/particle flow including a realistic particle size distribution. Powder Technology 112 (2000) pp. 34-45.
2. Mathiesen, V., Solberg, T., Hjertager, B.H. (2000b). An experimental and computational study of multiphase flow behavior in a circulating fluidized bed. Int. Journal of Multiphase Flow, Vol 26, No. 3, pp. 387-419.
3. Deardorff, J.W. (1971). On the Magnitude of Subgrid Scale Eddy Coefficient. Journal of Computational Physics, Vol. 7, pp.120-133.
4. Fahim, Alshahaf y Elkilani. (2010). Fundamentals of Petroleum Refining, Primera Edición. Elsevier B.V.
5. Rodríguez, M. A., y Ancheyta, J. (2011). Detailed description of kinetic and reactor modeling for naphtha catalytic reforming. Elsevier , 3492-3508.

ANÁLISIS DE LA CEPA DE *Trichoderma atroviride* QUE EXPRESA EL GEN *Lcc* DE *Trametes sanguineus*

Edgar Balcázar López¹, Luz Helena Méndez-Lorenzo², Ulises Esquivel-Naranjo³, Marcela Ayala⁴, Alfredo Herrera-Estrella⁵, Jorge Luis Folch-Mallol⁶

edkaizerbal@gmail.com

¹Centro de Investigación en Biotecnología-Universidad Autónoma del estado de Morelos.

²Facultad de Ciencias-Universidad Autónoma del estado de Morelos

³Unidad de Microbiología Básica y Aplicada, Facultad de Ciencias Naturales-Universidad Autónoma de Querétaro.

⁴Instituto de Biotecnología-Universidad Nacional Autónoma de México. Laboratorio Nacional de Genómica para la

⁵Biodiversidad-Cinvestav-Campus Guanajuato.

⁶Centro de Investigación en Biotecnología-Universidad Autónoma del estado de Morelos.

Introducción

Las lacasas pertenecen a una clase de enzimas redox denominadas multicobre oxidasas (EC 1.10.3.2). Tienen la capacidad de catalizar la oxidación de orto y para-difenoles, aminofenoles, polifenoles, poliaminas, aril diaminas y ligninas **(1)** utilizando oxígeno molecular como aceptor final de electrones. La oxidación de sustratos por parte de la lacasa puede generar radicales libres los cuales pueden difundir y oxidar otro tipo de sustratos de tipo no fenólicos **(2)**. Las lacasas están ampliamente distribuidas en el grupo de los hongos, aunque también se pueden encontrar en plantas superiores, bacterias e insectos. Estas enzimas presentan cuatro átomos de cobre denominados T1 Cu, T2 Cu y T3 Cu, estos dos últimos forman una

clúster trinuclear T2/T3 Cu. En el sitio T1 Cu se lleva a cabo la oxidación del sustrato, el electrón del sustrato viaja a través de un tripéptido conservado (His-Cys-His) al clúster T2/T3 Cu donde se reduce el O₂ a H₂O. La oxidación de un amplio rango de sustratos hace que estas enzimas tengan un gran potencial en diversas aplicaciones biotecnológicas, por ejemplo en la decoloración y detoxificación de efluentes, síntesis de polímeros, biorremediación, entre otras. Además las lacasas tienen la capacidad de oxidar diversos compuestos de tipo farmacéutico, biocidas, disruptores endocrinos, y varios pesticidas halogenados. A pesar del gran potencial de estas enzimas la producción de lacasas de las fuentes nativas no puede satisfacer la creciente demanda del mercado

debido a los bajos rendimientos de producción, así como la incompatibilidad de los procesos industriales de fermentación estándar con las condiciones necesarias para el crecimiento del microorganismo. En nuestro laboratorio previamente se había clonado y caracterizado un gen que codifican para una lacasa (*Lcc*) de *Trametes sanguineus*. La enzima purificada fue capaz de oxidar los sustratos ABTS, guaiacol, siringaldazina, and *o*-dianisidina, además la enzima retuvo el 40% de su actividad original después de 3 horas de incubación a 60° C (3). A pesar del gran potencial que posee esta enzima para su aplicación en diversos sectores biotecnológicos no se logró una eficientemente expresión cuando se utilizaron como sistemas heterólogos a *Saccharomyces cerevisiae* y *Pichia pastoris*, por lo que se planteó la expresión en *Trichoderma atroviride*. El género *Trichoderma* en general han sido utilizados en la expresión de diversas enzimas de importancia biotecnológica y biomédica, además de que presenta características intrínsecas que le permiten ser utilizados directamente en la degradación de compuestos tóxicos (4).

Metodología

Para la expresión del gen *Lcc* en *T. atroviride* se construyó el vector de expresión pUE10. Este plásmido entre otros elementos presenta el promotor del gen *pki1* (piruvate kinase) de *Trichoderma reesei* que va a regular constitutivamente la expresión del gen *Lcc* y un terminador del gen *blu17* que permitirá una integración sitio dirigida en el genoma de *T. atroviride*.

El gen *Lcc* fue clonado en el vector pUE10 y transformado en *T. atroviride* por el método de protoplastos. Las cepas de *T. atroviride* recombinantes fueron analizadas por actividad en placa utilizando 10 µM de ABTS (2,2'-azino-bis(3-ethylbenzthiazoline-6-sulfonic acid)) como sustrato. Las cepas recombinantes seleccionadas fueron analizadas por southern blot para verificar la integración de la construcción dentro del genoma de *T. atroviride*. Se analizaron los diversos parámetros cinéticos (K_m , V_{max} y K_{cat}) de la enzima purificada utilizando ABTS y guaiacol como sustratos. Se cuantificó por espectrofotometría la decoloración de colorantes industriales (rojo Congo, azul de bromofenol, azul de Coomassie y azul de tripano) utilizando 1.4 U/ml de enzima recombinante de la cepa Talcc3. La capacidad de la cepa recombinante para remover el disruptor endócrino bisfenol A (BPA) en medio líquido fue cuantificada por HPCL. La concentración final de BPA fue de 100 µM.

Resultados

Mediante la transformación por el método de protoplastos se obtuvieron dos cepas recombinantes estables (*Talcc1* y *Talcc3*). La integración de la construcción p*Talcc* (*Lcc*-pUE10) en la región del terminador a *blu17* fue corroborada por southern blot con al menos dos integraciones (datos no mostrados). Las actividades al sexto día de crecimiento en medio mínimo Vogel's fueron de 0.84 y 1.2 U/ml para la cepa *Talcc1* y *Talcc3* respectivamente utilizando ABTS como sustrato (ver figura 1).

En los colorantes azul de bromofenol y rojo Congo tratados con el extracto enzimático se observó una disminución en la concentración en un 67.7 y 18.01 % respectivamente. Sin embargo para el azul de Coomassie y azul de tripano no se observan cambios significativos (ver tabla 1). La cepa recombinante *Talcc3* fue capaz de remover un 95% de BPA a los cuatro días de incubación comparada con un 40% de la cepa silvestre (ver figura 2). Los parámetros cinéticos de la enzima recombinante son parecidos al de la nativa (ver tabla 2).

Conclusiones

Se logró obtener un sistema heterólogo capaz de producir una lacasa activa y que puede ser utilizado directamente para remover BPA.

Tablas

Tabla 1. Decoloración de colorantes industriales por la lacasa recombinante

Colorante	Longitud de onda (nm)	Decoloración (%)	Desviación estándar
BPB	592	67.73	± 5.83
CR	504	18.01	± 1.46
CBB	554	3.97	± 1.52
TB	598	1.38	± 0.86

Tabla 2. Parámetros cinéticos de la lacasa nativa y recombinante.

Enzima	Substrato	Km (μM)	Vmax ($\mu\text{mol}/\text{ml}^{-1}\text{min}^{-1}$)	Kcat (seg^{-1})
Native Lcc	ABTS	41.34	23.56	76.70
Recombinant Lcc	ABTS	47.08	21.415	77.41
Native Lcc	Guaiacol	40.5	5.7	18.22 seg
Recombinant Lcc	Guaiacol	98.8	4.5	17.6

Referencias

1. Yaroplov, A.I., Skorobogatko, O.V., Vartanov, S.S., and Varfolomeyev, S.D. *Appl. Biotechnol.* 49, 257-280 (1996).
2. d'Acunzo, F., Galli, C., Gentili, P., Sergi, F. *New. J. Chem.* 30, 583-591 (2006).
3. Dantán-González, E., Vite-Vallejo, O., Martínez-Anaya, C., Méndez-Sánchez, M., González, M. C., Palomares, L. A., Folch-Mallol, J. *Int. Microbiol.* 11, 163-169 (2008).
4. Hamzah, A., Zarin, M., Hamid, A., Othman, A., Sahidan, S. *Sains Malaysian.* 41, 71-79 (2012).

Figuras

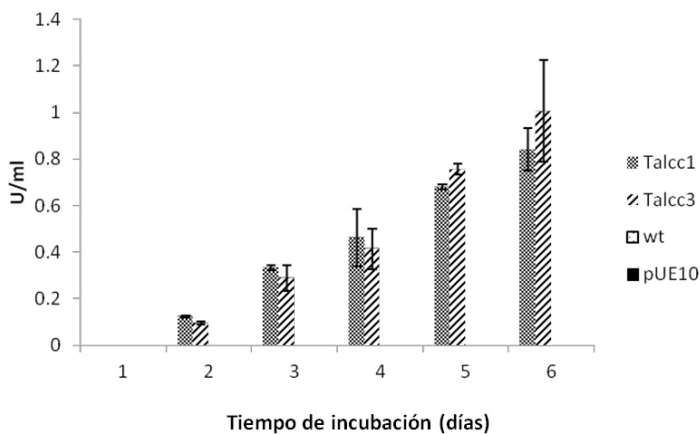


Figura 1. Producción de la lacasa recombinante a diferentes días de incubación. Talcc1 y Talcc3: cepas recombinantes, pUE10: cepa transformada con el vector pUE10 vacío, wt: cepa silvestre.

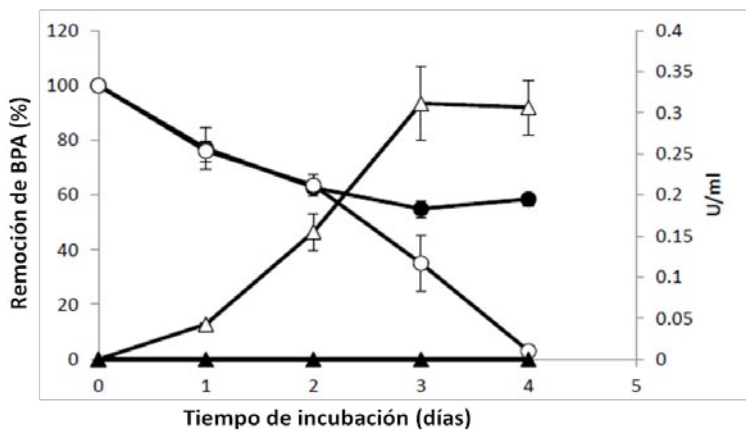


Figura 2. Remoción de BPA por las cepas recombinante Talcc3 (círculos negros) y silvestre (círculos blancos). Actividad lacasa de Talcc3 (triángulos negros) y actividad lacasa de la cepa wt (triángulos blancos).

NANOCOMPOSITO TiO_2 /POLIPIRROL FOTOACTIVO CON LUZ VISIBLE SINTETIZADO MEDIANTE POLIMERIZACIÓN EN HETEROFASE EN PRESENCIA DE DIFERENTES AGENTES TENSOACTIVOS

Blanca E. Castillo-Reyes¹, Víctor M. Ovando-Medina², Pedro A. Alonso-Davila¹, Miguel A. Corona-Rivera², Sonia H. Soriano-Perez¹, Elsa Cervantes-González²

¹Centro de Investigación y Estudios de Posgrado (CIEP), Facultad de Ciencias Químicas – Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Av. Dr. Manuel Nava No. 6 Zona Universitaria, San Luis Potosí, S.L.P., México 78210: becr_iq@yahoo.com.mx

²Departamento 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, México 78700

Introducción

Los nanocompositos de polímeros conductores/materiales inorgánicos, se consideran como una nueva clase de materiales, debido a que sus propiedades mejoradas en comparación con los materiales por separado. Las nanopartículas inorgánicas se pueden incorporar en la matriz de un polímero semiconductor por alguna ruta química o mediante una técnica electroquímica [1]. La polimerización en microemulsión es una técnica factible para sintetizar estos materiales. Las microemulsiones son sistemas termodinámicamente estables y se forman de manera espontánea mediante la mezcla de una fase orgánica y una fase acuosa en presencia de una cantidad apropiada de

tensioactivo y un co-tensioactivo; en estos sistemas, es posible obtener nanopartículas poliméricas con diámetros < 50 nm y polímeros con alto peso molecular y una variedad de microestructuras que influyen en las propiedades del polímero [2]. Por otro lado, el Polipirrol (PPy) es uno de los polímeros conductores más importantes por sus propiedades de alta conductividad eléctrica, posee una buena estabilidad térmica y estabilidad ambiental, y se ha utilizado en la preparación de nanopartículas [3]. El objetivo de este trabajo fue la síntesis y caracterización de nanopartículas de TiO_2 /Polipirrol utilizando tres surfactantes diferentes: dodecil sulfato de sodio (SDS), bromuro de cetiltrimetilamonio (CTAB) y dioctil sul-

fosuccinato de sodio (AOT) y cambiando el proceso de polimerización: lote y semi-continuo, además de estudiar su desempeño en la fotodegradación del colorante azul de metileno bajo irradiación con luz visible, que no es dañina y que es de menor costo que la luz ultravioleta.

Métodos

Síntesis de nanopartículas de TiO_2 /Polipirrol

Se mezclaron 30 g de agua con 0.8 g de tensioactivo en un vial de 60 ml. Posteriormente, se adicionó 0.25 g de TiO_2 (Degussa P25) y se ultrasonizó durante 10 min, después se adicionó 1.36 g de persulfato de amonio disuelto previamente en 10 ml de agua. En las polimerizaciones por lotes (B), se añadieron 0.4 g de pirrol. La reacción procedió con agitación magnética durante 2 horas. En la polimerización en semicontinuo (SB) el pirrol se cargó en una jeringa y se utilizó una bomba de dosificación a una velocidad de 0.0133 g/min. La reacción se dejó durante 1.5 h después de la adición del monómero. La mezcla de reacción se vertió en un matraz y se adicionó metanol para precipitar las nanopartículas TiO_2 /PPy. Posteriormente se lavó con un exceso de metanol y se decantó para ser secada a 60 °C en un horno durante 24 h. Las conversiones se determinaron gravimétricamente.

Caracterización de las nanopartículas de TiO_2 /PPy

Los materiales sintetizados se analizaron

mediante espectroscopia UV/Vis NIR de reflectancia difusa, medida entre 300 y 800 nm, análisis de FTIR-ATR y espectroscopía Raman. Para analizar la fase cristalina se utilizó Difracción de Rayos X. La conductividad eléctrica se determinó por el método de cuatro puntas. Las mediciones de voltametría cíclica se realizaron en una celda de vidrio usando un potencióstato/galvanostato utilizando electrodos de Ag/AgCl como el de referencia, disco de platino como el de trabajo y un alambre de platino como contra electrodo.

Pruebas de fotodegradación

Las nanopartículas de TiO_2 /PPy sintetizadas se probaron en la fotodegradación del colorante azul de metileno en soluciones acuosas. Con el fin de comparar con TiO_2 puro, las cantidades de nanocompositos de TiO_2 /PPy equivalentes a 80 mg de TiO_2 fueron de 150 a 190 mg, calculado a partir de las composiciones (ver Tabla 1) y se dispersaron en 50 ml de una solución acuosa de colorante azul de metileno de 20 mg/L. Las soluciones se irradiaron con una lámpara halógena con filamento de tungsteno a 40 cm de la solución para evitar la degradación por efecto térmico. Se utilizó otra fuente de luz UV para comparar. Se tomaron alícuotas de 0.5 ml a diferentes tiempos y se filtraron para determinar su concentración residual mediante espectroscopía de UV/Vis a una longitud de onda de 664 nm.

Resultados

Caracterización de las nanopartículas TiO₂/PPy

En la figura 1a y 1b, se muestran los picos de absorción de las cadenas de PPy. El pico a 1450 cm⁻¹ se atribuye al anillo C-C de estiramiento; el pico alrededor de 1540 cm⁻¹ se debe a estiramientos C=C; y los picos a 1310 y 1180 cm⁻¹ se deben a C-H en el plano y vibraciones de estiramiento C-N, respectivamente [4]. En el caso en que se usó CTAB, la señal en 1540 es insignificante, y el pico a 1580 cm⁻¹ no puede atribuirse a C=C. Los valores de conductividad y los valores de la relación de áreas de los picos de C=C/C-C de FTIR se muestran en la Tabla 1. Los valores de la conductividad se ordenan de mayor a menor como sigue: AOT-SB>SDS-B> SDS-SB>AOT-B>CTAB-B>CTAB-SB, mientras que la relación de áreas de los picos fue AOT-B>AOT-SB>SDS-SB>SDS-B; las discrepancias entre conductividades y el análisis de FTIR pueden deberse a la presencia de algunas moléculas de tensioactivo que interactúan con las cadenas de PPy, lo que afecta a las áreas integradas. Los valores de los picos anódicos y catódicos obtenidos mediante voltametría cíclica de los materiales sintetizados se muestran en la Tabla 1. Se observa el comportamiento redox típico del PPy [5], con un pico de oxidación alrededor de 1.0 V y el pico de reducción cerca de 0.4 V vs Ag/AgCl para las muestras obtenidas con SDS y AOT. Las muestras sintetizadas en presencia de CTAB presentaron una actividad redox baja.

Pruebas de fotodegradación

Las relaciones de las concentraciones a un determinado tiempo (C/C_0) de azul de metileno respecto a la concentración inicial durante la fotodegradación usando los materiales de TiO₂/PPy se muestran en la Figura 2, bajo irradiación de luz visible (2a) e irradiación UV (2b). Para la fotodegradación con luz visible, se observó una inhibición después de 5 minutos de reacción, excepto cuando se utilizó la muestra de SDS-SB, permitiendo la degradación prácticamente total. Esta inhibición en la fotodegradación no se observó bajo irradiación UV, y resultados similares se observan para la AOT-B y SDS-SB. El porcentaje de fotodegradación bajo luz visible después de 15 minutos fueron los siguientes: TiO₂=35%, CTAB-B=42%, CTAB-SB=62%, AOT-B=79%, SDS-B=87%, AOT-SB=92% y SDS-SB=99.3%; con irradiación UV después de 60 min fueron: SDS-B=64%, CTAB-SB=67%, CTAB-B=69%, TiO₂=71%, AOT-SB=86%, AOT-B=96.5 and SDS-SB=98%. Con el material SDS-SB se obtuvo la mayor eficiencia de degradación en luz visible, por lo tanto se estudió el efecto de la variación de la concentración del colorante (3a) y la variación de la carga del catalizador (3b), observando que entre menor sea la concentración de colorante la eficiencia aumenta y cuan menor sean la carga del catalizador la eficiencia de la degradación disminuye.

Conclusiones

Las nanopartículas sintetizadas TiO_2/PPy mostraron fotoactividad bajo luz visible. El tipo de agente tensioactivo y el modo de polimerización afectan fuertemente la morfología de las nanopartículas, la conductividad del polímero, y el desempeño fotocatalítico. Se observó que la mejor actividad fotocatalítica en la degradación de azul de metileno fue con las nanopartículas TiO_2/PPy sintetizados en presencia de SDS como tensioactivo y en el modo de polimerización SB logrando un 99% de la fotodegradación en comparación con el TiO_2 , que alcanzó sólo el 35% de la fotodegradación bajo irradiación con luz visible.

Agradecimientos

El CA de Ingeniería de Procesos Químicos

y Ambientales (UASLP-CA-202) agradece al PIFI 2013 por el financiamiento parcial de este trabajo. Blanca E. Castillo-Reyes agradece la Beca CONACYT para estudios de Doctorado.

Referencias

1. Rupali Gangopadhyay and Amitabha De. *Chem. Mater.* 12:608 (2000).
2. Herrera J.R., Peralta R.D., López R.G., Cesteros L.C., Mendizábal E., Puig J.E. *Polymer* 44:1795-1802 (2003).
3. Oliveira A., Oliveira H. *Polym. Bull.* 70: 579–591 (2013).
4. Liu Y, Chu Y, Yang L. *Mater Chem Phys* 98:304–308 (2006).
5. N.M. Dimitrijevic, S. Tepavcevic, Y. Liu, T. Rajh, S.C. Silver and D.M. Tiede, J. Phys.Chem. C. 117, 15540 (2013).

Tabla 1. Porcentaje de conversión de polipirrol, valores de voltametría cíclica y conductividad.

MUESTRA	% de PPy	Catódico, V	Anódico, V	C, S/cm	^{a)} $I_{C=c}/I_{C-c}$
TiO_2	----	0.33	0.55	----	---
SDS-B	58.4	1.06	0.46	3.32×10^{-3}	0.204
SDS-SB	46.5	1.00	0.46	2.05×10^{-3}	2.869
CTAB-B	57.8	1.10	1.02	5.03×10^{-6}	---
CTAB-SB	56.3	1.06	0.92	1.75×10^{-8}	---
AOT-B	58.3	1.08	0.42	4.09×10^{-5}	3.744
AOT-SB	47.5	1.04	0.44	4.19×10^{-3}	3.160

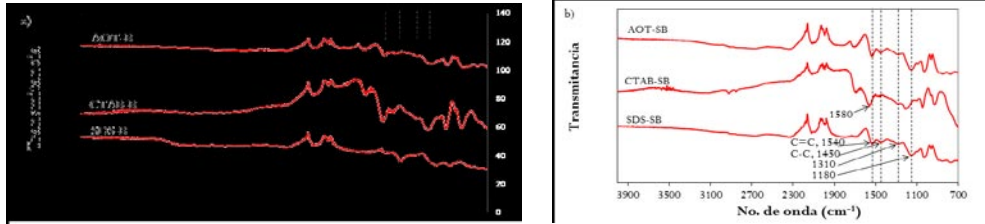


Figura 1. Espectros FTIR de las nanopartículas de TiO_2/PPy obtenidas con diferente tensioactivo en batch (a) y semibatch (b).

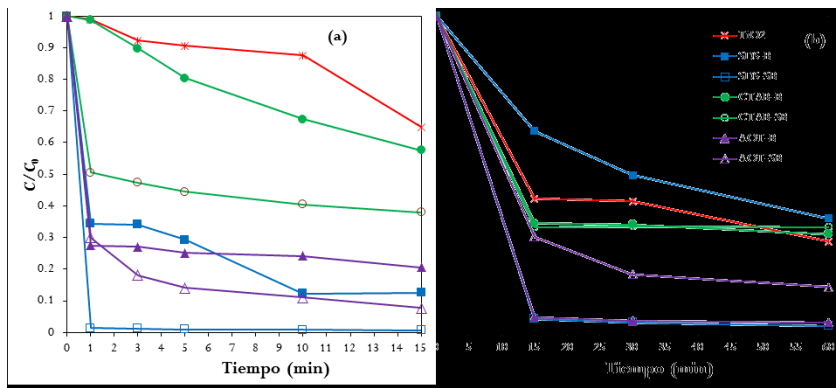


Figura 2. Cinéticas de fotodegradación del azul de metileno bajo irradiación con luz visible (a) y con luz UV (b) a distintos tiempos de reacción

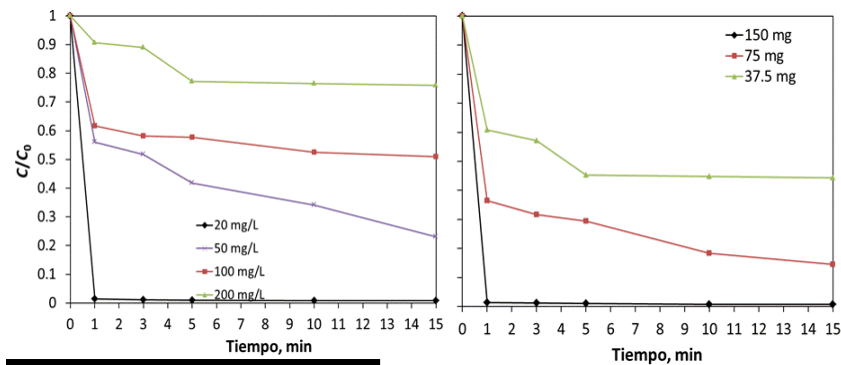


Figura 3. Cinéticas de fotodegradación del azul de metileno bajo irradiación con luz visible variando la concentración del colorante (a) utilizando TiO_2/PPy SDS-SB y variando la carga del catalizador TiO_2/PPy SDS-SB (b)

INMOVILIZACIÓN DE LACASA DE *TRAMETES VERSICOLOR* EN NANOPARTÍCULAS DE ORO

Elena Viririana Herrera¹, Lucía Amine Martínez Jothar², José Elías Pérez López², Elsa Cervantes González¹

elsa.cervantes@uaslp.mx

¹COARA, UASLP

²Instituto de Física, UASLP

Introducción

Las lacasas son enzimas oxidorreductasas multi-cobre que se encuentran en una extensa diversidad de plantas, hongos y bacterias (1), que catalizan la oxidación de un electrón de una variedad de sustratos (orgánicos e inorgánicos) con la reducción simultánea de cuatro electrones de oxígeno al agua (2). Por lo general, pueden oxidar numerosos compuestos como fenoles, orto- y para-difenoles, aminas aromáticas o alifáticas (1,3) y presentan actividad en un amplio rango de pH, de 2 a 8.5 (4). Sin embargo, la actividad de la lacasa varía dependiendo del organismo. Por ejemplo, las lacasas fúngicas tienen un pH óptimo entre 3.6 y 5.2 y tienen un punto isoeléctrico

(pI) de 3 a 7 (1), una de las lacasas fúngicas de mayor importancia es la lacasa de *Trametes versicolor*.

Características de la lacasa, tales como el alto nivel de eficiencia catalítica, el alto grado de especificidad y la ausencia de reacciones secundarias, hacen su uso ventajoso en comparación con catalizadores químicos convencionales. Las lacasas tienen aplicaciones industriales y biotecnológicas, en la industria textil, de colorantes e imprenta, se usa principalmente en el proceso de degradación de colorantes ó en la oxidación de derivados de fenol presentes en las aguas residuales industriales (1), en la industria de papel se emplea para la deslignificación

de fibras leñosas o en procesos de blanqueo (5). Su aplicación en biorremediación proporciona beneficios como el ahorro de energía en los procesos y la disminución de los costos. Sin embargo, el costo de purificación de la enzima es alto y se tienen problemas con la estabilidad de la lacasa al retirarla de su entorno natural. Con la intención de resolver esta problemática se han realizado estudios inmovilizando la enzima con el objetivo de mejorar la estabilidad, la eficiencia catalítica y la capacidad de reutilizar la enzima, se ha logrado la inmovilización de enzimas en diversos nanomateriales tales como sílice, nanotubos de carbón y nanopartículas metálicas, principalmente nanopartículas de oro (3). En el presente trabajo se pretende inmovilizar lacasa de *Trametes versicolor* sobre nanopartículas de oro y evaluar los cambios en la actividad de la enzima.

Metodología

Se inmovilizó lacasa (Lac) de *Trametes versicolor* sobre nanopartículas de oro (Nps Au) de carga superficial positiva (200µL de Nps/0.05mg de lacasa). Este sistema Lac-Nps Au fue caracterizado por técnicas como dispersión de luz dinámica y espectroscopia de fluorescencia. Para las pruebas de fluorescencia se centrifugó una muestra del sistema Lac-Nps Au a 9000rpm para recuperar el sobrenadante. La cantidad de lacasa unida a las Nps se obtuvo de manera indirecta restando la cantidad de lacasa

encontrada en el sobrenadante mediante una curva con diferentes concentraciones de lacasa.

Además, se realizaron pruebas de actividad enzimática empleando ABTS como sustrato. Para la estabilidad enzimática se trabajó con una pre-incubación de lacasa libre e inmovilizada a 50, 60 y 70°C durante 1h. Para la estabilidad al pH se pre-incubaron las muestras de lacasa libre e inmovilizada en distintos buffers $C_8H_5KO_4/HCl$ (pH 3.2), $KH_2PO_4/NaOH$ (pH 6) y $NaHCO_3/NaOH$ (pH10) durante 1h. Posteriormente se incubó a 30°C durante 30min con ABTS en buffer de acetatos a pH 5 para ambas pruebas de estabilidad. Finalmente se leyó absorbancia a 420nm.

Resultados

El sistema Lac-Nps Au tenía un tamaño de partícula de 195.6nm y un potencial zeta de -8.62mV, mientras que las Nps Au tenían un diámetro hidrodinámico de 130.5nm y la lacasa libre un potencial zeta de -17.23mV. Debido a los cambios observados tanto en el tamaño de partícula como en el potencial zeta puede suponerse la unión de la lacasa a las Nps Au, siendo estas últimas rodeadas, posiblemente, por la lacasa. Los ensayos de fluorescencia realizados para obtener, de manera indirecta, la cantidad de lacasa unida a las Nps Au muestran que se une 80% de la enzima a las Nps Au.

En las pruebas de estabilidad térmica se encontró que tanto para la lacasa libre como para la lacasa inmovilizada la actividad enzimática decrece rápidamente a 70°C perdiendo casi el 100% de la actividad lo cual puede observarse en la figura 1. A 50°C la actividad enzimática de la lacasa libre e inmovilizada es prácticamente igual, sin embargo a 60°C la lacasa inmovilizada mantiene aprox. 20% más actividad que la lacasa libre.

La lacasa de *Trametes versicolor* muestra una estabilidad a pH de 3.2-10, es decir, sigue teniendo un alto porcentaje de actividad a los diferentes pH aunque disminuye a medida que aumenta el pH tal como se observa en la figura 2, la inmovilización de la enzima no amplía el intervalo de estabilidad al pH pero conserva un mayor porcentaje de la actividad enzimática (cerca del 50% más) en el mismo rango de pH que la enzima libre.

Bajo algunas condiciones (60°C para estabilidad térmica y pH de 3.2, 6 y 10 para estabilidad al pH), la inmovilización de la lacasa favorece la actividad enzimática ya que probablemente los sitios activos de la enzima son más funcionales debido a los cambios conformacionales inducidos por la inmovilización, resultando así más accesible el sustrato.

Conclusiones

- Se logró la inmovilización de lacasa de *Trametes versicolor* sobre Nps Au en un 80%.
- La inmovilización ayuda a mantener la estabilidad de la enzima a 60°C, sin embargo la lacasa de *Trametes versicolor* no es estable a 70°C.
- La inmovilización en Nps Au mejora de manera significativa la actividad de la enzima en las pruebas de estabilidad al pH.

Agradecimientos

Esta investigación fue realizada gracias al apoyo del Dr. Francisco Castillo y M. en C. Lourdes González del Instituto de Física de la UASLP.

Referencias

1. Madhavi, V. & Lele, S.S. *Bioresources* 4, 1694-1717, (2009).
2. Xu, F. *Biochemistry* 35, 7608-7614, (1996).
3. Fernández-Fernández, M., Sanromán, M.Á. & Moldes, *Biotech. Adv.* 10.1016, (2012).
4. Leonowicz, A., Cho, N. S., Luterek, J., Wilkolazka, A., Wojtas-Wasilewska, M., Matuszewska, A., Hofrichter, M., Wessenberg, D., y Rogalski, J. *J. Basic Microbiol.* 3-4:185-227, (2001).
5. Riva, S. *Trends Biotechnol.* 24, 219-26, (2006).

Figuras

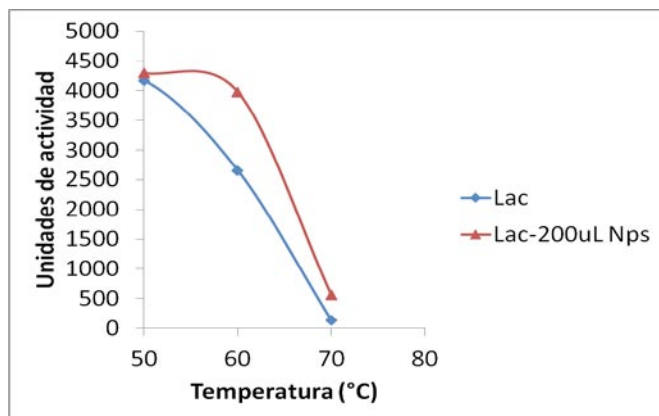


Figura 1. Estabilidad térmica de lacasa de *Trametes versicolor* libre e inmovilizada.

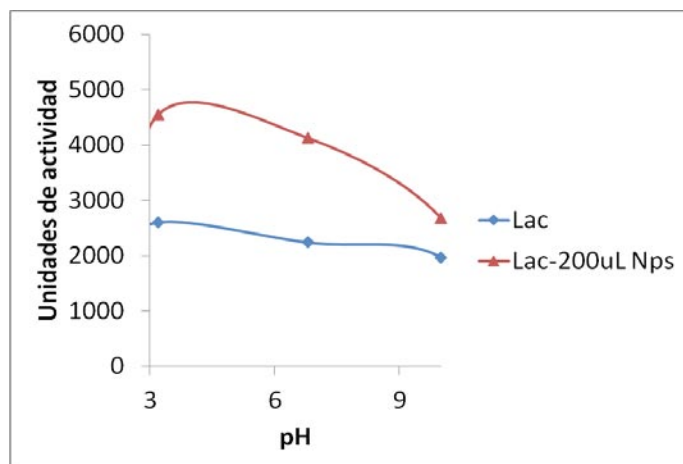


Figura 2. Estabilidad al pH de lacasa de *Trametes versicolor* libre e inmovilizada.

SÍNTESIS DE NANO-HIDROGELES DE POLIACRILAMIDA MEDIANTE POLIMERIZACIÓN EN MICROEMULSIÓN INVERSA

Cándida Anahy Cisneros-Covarrubias, Miguel Ángel Corona-Rivera,
Elsa Cervantes-González

Departamento de Ingeniería Química, COARA – Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Carretera a Cedral Km 5+600, San José de las Trojes, Matehuala, S.L.P., 78700, México.
cacc_cego04@hotmail.com

Introducción

Los hidrogeles son cadenas de polímero de origen natural o sintético unidas o entrecruzadas a través de enlaces covalentes y no covalentes, adquiriendo la forma de una red tridimensional capaz de absorber gran cantidad de líquidos a través del hinchamiento de su estructura, permaneciendo insolubles y sin perder su forma original, es decir, son sistemas que pueden almacenar en su interior moléculas de bajo peso molecular [1]. Entre sus variadas aplicaciones se encuentran: dosificación de nutrientes en plantas y cultivos, lentes de contacto, membranas de hemodiálisis, pañales y liberación controlada de fármacos, siendo ésta última una de las líneas de investigación más prometedoras hoy en día [2].

Un aspecto importante a considerar en la aplicación de los hidrogeles es el tamaño de partícula, el cual debe ser nanométrico [3], es por esto que en la actualidad se lleva a cabo la síntesis de nano-hidrogeles. Los nano-hidrogeles son dispersiones acuosas de partículas de hidrogel de tamaño nanométrico (10–1000 nm) que poseen las características de los hidrogeles macroscópicos. Los nano-hidrogeles, al igual que sus análogos macroscópicos, presentan hidrofiliidad, flexibilidad en su fabricación, versatilidad, gran capacidad de absorción de agua y biocompatibilidad [4]. En este trabajo se busca obtener nano-hidrogeles de poliacrilamida sintetizados mediante polimerización en microemulsión inversa que tengan tamaños de partícula (D_p)

nanométricos, además de distribuciones de tamaño de partículas monomodales y altas velocidades de reacción.

Metodología experimental

Se utilizó acrilamida (AAm) como monómero, N,N'-metilenbisacrilamida (NMBA) como entrecruzante y tolueno como fase continua, agua destilada, sal sódica del sulfosuccinato de bis (2-etilhexilo) (AOT) como surfactante, persulfato de amonio (APS), dihidrocloruro de 2,2-azobis(amidinopropano) (V-50), persulfato de potasio (KPS) y peróxido de benzoilo (PB) como iniciadores. Las reacciones se realizaron en proceso por lotes y semicontinuo en un reactor de vidrio con chaqueta de enfriamiento/calentamiento y con capacidad de 250 ml, empleando agitación mecánica constante y una temperatura de 70 °C. Para las reacciones en lotes, el surfactante y el tolueno fueron puestos en el reactor, posteriormente se agregó en una solución el entrecruzante, monómero y agua, se burbujeo argón durante todo el tiempo de reacción. Finalmente, se agregó el iniciador para dar inicio a la polimerización, dejándola reaccionar durante 3 horas. Además, se realizaron las reacciones en lotes con adición de hexanol como co-surfactante para estudiar el efecto de este. Para las reacciones en semicontinuo se usaron las mismas condiciones, sin embargo, el iniciador se agregó después del tolueno y AOT, posteriormente se empezó a adicionar la solución de acrilamida, entrecruzante y

agua hasta la formación del nano-hidrogel, esta adición se llevó a cabo con dos velocidades: 0.1 ml/min y 0.2 ml/min (Ver tabla 1). Las conversiones de acrilamida se obtuvieron mediante gravimetría después de dializar cada muestra y las muestras finales de los látices poliméricos fueron analizadas mediante dispersión cuasielástica de luz (QELS) para obtener el Dp.

Resultados

En las reacciones en lotes se obtuvieron microemulsiones inversas estables empleando los iniciadores V-50, APS y PB, con respecto al KPS mientras avanzaba la reacción ésta precipitaba obteniéndose un hidrogel, esto se debe a la temperatura de descomposición de los iniciadores. El KPS empieza a generar la mayor cantidad de radicales libres a 40 °C, por lo tanto, a la temperatura de reacción (70 °C) se tiene gran cantidad de radicales libres lo cual provoca que la polimerización se lleve a cabo muy rápido obteniéndose la precipitación y formación del hidrogel. En las reacciones sin hexanol se obtiene la mayor conversión con V-50 y el Dp menor con APS, sin embargo al utilizar hexanol las conversiones disminuyen y el Dp aumenta (Ver tabla 2). En las distribuciones de Dp para las reacciones con y sin hexanol se observa que para todos los casos se obtienen distribuciones monomodales, al adicionar hexanol la distribución es más amplia lo cual se debe a que el Dp varía entre cada una de las partículas, es decir, no todas tienen el

mismo Dp como en el caso de la reacción con APS sin hexanol (Ver figura 1).

En las reacciones en semicontinuo se obtuvieron microemulsiones inversas estables con V-50 y PB, sin embargo con APS se formó un hidrogel al sobrepasar la cantidad de acrilamida agregada en lotes, esto se debe de igual forma que con el KPS a la temperatura de descomposición del APS (50°C). La cantidad de adición de monómero depende del iniciador, con PB se adiciona mayor cantidad de acrilamida que con V-50 antes de obtener un hidrogel, por lo tanto se obtiene más polímero formado con PB, pero al aumentar la velocidad de adición la cantidad de monómero disminuye y con esto también el polímero formado. Se obtienen mayores conversiones cuando la velocidad de adición de monómero aumenta, siendo las más altas con V-50, además la velocidad de reacción es mayor con V-50 a una velocidad de adición de 0.2 ml/min (Ver tabla 3). Los Dp obtenidos incrementan debido al aumento de la cantidad de monómero con respecto a las reacciones en lotes, se obtuvieron distribuciones de Dp amplias lo cual indica que se tienen partículas con diferentes diámetros (Ver figura 2).

Conclusiones

Mediante la polimerización en microemulsión inversa, fue posible obtener látices estables empleando un surfactante anió-

co (AOT) y V-50 y PB como iniciadores. Se observó que al adicionar hexanol a la microemulsión se obtienen menores conversiones y el Dp aumenta, debido a que tenemos menor concentración de AOT y por lo tanto menos micelas. En las reacciones en semicontinuo se logra aumentar la relación polímero/surfactante al utilizar PB. Además se puede observar que los tamaños de partícula aumentan cuando las reacciones de polimerización fueron en semicontinuo, debido a que tenemos mayor cantidad de polímero por partícula, comparado con las reacciones por lotes.

Agradecimientos

Al proyecto CONACYT de la convocatoria Ciencia Básica: **CB-169444**.

Referencias

1. Muñoz G. A., Zuluaga F. *Rev. Acad. Colomb. Cienc.* 33. 539-548. (2009).
2. Nuño Donlucas S. M., Sánchez Díaz J. C., Rabelero M., Cortés Ortega J., Luhrs Olmos C. C., Fernández Escamilla V. V., Mendizábal E., Puig J. E. *Journal of Colloid and Interface Science.* 270. 94-98. (2004).
3. Vinogradov S. V., Bronich T. K., Kabanov A. V. *Advanced Drug Delivery Reviews.* 54. 135-147. (2002).
4. Saunders B. R., Vincent B. *Adv. Colloid Interface Sci.* 80. 1-25. (1999).

Tablas

Tabla 1. Composición de las reacciones en procesos por lotes y semicontinuo

<i>RX</i>	<i>Reacciones en lotes</i>	<i>Reacciones en lotes con hexanol</i>	<i>Reacciones en semicontinuo</i>
Tolueno	80.75 g	85.5 g	Tolueno 80.75 g
Surfactante	14.25 g	9.5 g	14.25 g
Agua	5 g	5 g	25 g
Monómero	2.5 g	2.5 g	25 g
Entrecruzante	0.025 g	0.025 g	0.25 g
Iniciador	0.025 g	0.025 g	0.25 g
Co-surfactante	-----	3.16 g	-----

Tabla 2. Resultados de las reacciones en lotes con y sin co-surfactante

<i>Rxn</i>	<i>Temperatura de descomposición</i>	<i>Sin hexanol</i>			<i>Con hexanol</i>		
		Estabilidad	Conversión (%)	Dp (nm)	Estabilidad	Conversión (%)	Dp (nm)
APS	50 °C	Si	92	39	Si	84	120
V-50	65 °C	Si	99	99.5	Si	81	150
PB	70 °C	Si	95	87	Si	80	380
KPS	40 °C	No	-----	-----	No	-----	-----

Tabla 3. Resultados de las reacciones en semicontinuo a diferentes velocidades de adición de monómero

<i>RXN</i>	<i>Velocidad de adición (AAm, entrecruzante, agua) (ml/min)</i>	<i>Polímero formado (g)</i>	<i>Estabilidad</i>	<i>Conversión (%)</i>	<i>Dp (nm)</i>
PB	0.1	14.2	Si	93.9	147.3
	0.2	9.2	Si	94.3	125.4
V-50	0.1	8.3	Si	99	208.7
	0.2	5.9	Si	100	104.5
APS	0.1	-----	No	-----	-----

Figuras

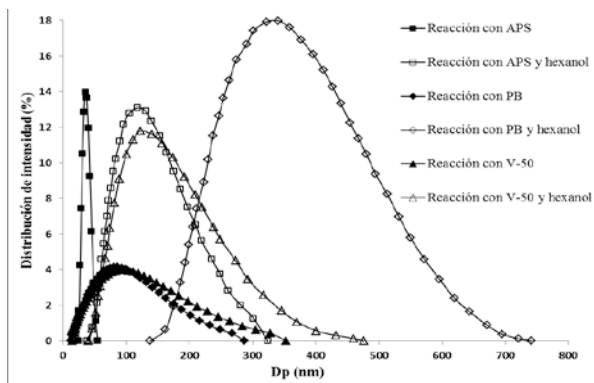


Figura 1. Distribución de tamaños de partícula de las reacciones en lotes

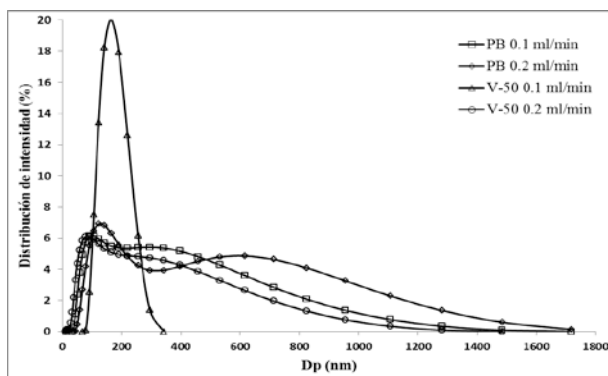


Figura 2. Distribución de tamaños de partícula de las reacciones en semicontinuo

SIMULACIÓN DINÁMICA DE UN SISTEMA DE CALENTAMIENTO MEDIANTE UN MODELO DE PARÁMETROS DISTRIBUIDOS

Víctor Alfonso Cruz Arenas, Ángel Castro Agüero

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

victor_acr@hotmail.com

Introducción

Un número importante de esos procesos son distribuidos espacialmente, de modo que su comportamiento depende tanto de la posición espacial como del tiempo. Generalmente, los modelos resultantes toman la forma de ecuaciones diferenciales parciales (EDPs) y son derivados de balances fundamentales de momento, masa y energía. Usualmente describen las variaciones de las principales variables de estado [1,2]. El modelado y la simulación computacional de un sistema permite obtener el efecto de diferentes parámetros, distribuciones de variables relevantes y el entendimiento del proceso físico [2,3,4,5]. Una forma de dar solución a las EDPs es mediante la discretiza-

ción espacial aplicando el método de líneas, para obtener un sistema de ecuaciones diferenciales con respecto a la variable temporal y que se resuelve posteriormente a través de un algoritmo de integración como Euler o Runge-Kutta [2,5,6,7,8,9].

En este trabajo, se desarrolló un modelo dinámico de parámetros distribuidos para representar la transferencia de calor en el fluido que circula a través del sistema de calentamiento y mediante la simulación se obtuvieron los perfiles de temperatura en estado estacionario y transiente. Asimismo, se realizó la optimización de los parámetros tomados de literatura y que se consideró tenían un mayor efecto en la respuesta dinámica del

modelo, mediante el método Nelder-Mead Simplex. El sistema en estudio representa la fase de precalentamiento para un reactor de polimerización y el fluido que circula a través del equipo es calentado y debe mantenerse a una temperatura de referencia, para que la reacción de polimerización se lleve a cabo. Debido a que el control automático de temperatura del calentador es fundamental, surgió la necesidad de desarrollar un modelo que describiera cualitativa y cuantitativamente su comportamiento en estado estacionario y dinámico. En este sentido, el campo de control de SPDs se han presentado diversos modelos, métodos para aproximar las soluciones de las EDPs y estrategias de control para sistemas de destilación, reacción, calentamiento, difusión-reacción [10, 11, 12, 13, 14].

Simulación del sistema de calentamiento

El sistema de calentamiento corresponde a un tubo de acero inoxidable bridado, el cual está embobinado con resistencias eléctricas que suministran el calor requerido para el calentamiento del fluido (véase Figura 1). En el desarrollo del modelo matemático, se realizaron las siguientes consideraciones: a) Flujo laminar en el sistema (fundamentado en una velocidad de flujo baja), b) perfil de velocidad en dirección axial de forma parabólica y dependiente de r (asociado al flujo laminar en el sistema), c) propiedades físicas no constantes y d) no hay gradientes de temperatura en dirección angular. Para proceder a la solución

numérica de la ecuación resultante, se aplicó el método de líneas. La discretización de las variables espaciales, se empleó el método explícito de DuFort-Frankel [15].

Se desarrollaron códigos computacionales compilados en lenguaje C. A partir de los códigos se generaron librerías dinámicas (DLL) en el software LabWindows CVI®. Posteriormente se exportaron a la interfaz de programación del software LabVIEW®, en donde se desarrolló la interfaz de usuario para la simulación del sistema. Se modeló la dinámica de las resistencias eléctricas en dos casos, como un sistema de primer orden y como un sistema de segundo orden. Finalmente se aplicó el método de optimización Nelder-Mead Simplex para obtener valores de los parámetros ajustados al sistema físico.

Resultados

Se presentan los resultados para el estado estacionario, la comparación entre los resultados experimentales para la dinámica de primer y segundo orden. En la Figura 2 se muestran los perfiles de temperatura a diferentes longitudes del calentador, es notable que los perfiles presentan forma parabólica, tal comportamiento evidencia la transferencia de calor a lo largo del calentador y que es producto del calor suministrado por las resistencias eléctricas. En la Figura 3 se muestra la comparación entre los perfiles de temperatura simulado y experimental, con una dinámica de primer orden para las resistencias eléctricas.

En la Figura 4 se muestra la comparación entre los perfiles de temperatura simulado y experimental, con la dinámica de segundo orden. En ambas Figuras los perfiles obtenidos muestran un comportamiento asintótico, que natural en este tipo de procesos. En los dos últimos casos, la respuesta es a través de la simulación con parámetros optimizados. En términos generales, la optimización resulto ser adecuada, las respuestas dinámicas de los perfiles de temperatura simulados se ajustaron de una mejor manera en comparación con los perfiles que se desarrollaron a partir de los parámetros de literatura. La dinámica de primer orden para la resistencia se aproximó aún más que la de segundo orden.

Conclusiones

Los equipos de calentamiento se utilizan con mayor frecuencia en aplicaciones académicas e industriales, por lo tanto, su análisis operativo se convierte en una necesidad.

- En este trabajo se desarrolló un modelo de parámetros distribuidos que fue empleado para representar la transferencia de calor en el fluido circulante en un calentador eléctrico que forma parte del sistema de calentamiento de un reactor de polimerización tipo batch.
- Los perfiles de temperatura que se obtuvieron en la simulación, tenían comportamiento asintótico como era de esperarse para procesos de este tipo. Fue natural que la temperatura a la salida fuese aproximada

a la temperatura física del sistema debido a que se emplearon inicialmente parámetros de literatura y por lo tanto, resultó necesario optimizar estos parámetros.

- Después de realizar la validación del modelo acorde a datos experimentales y presentar un enfoque de optimización fuera de línea, en el cual fueron optimizados los parámetros que se consideró que tenían un efecto significativo en la respuesta dinámica, es posible plantear que el modelo puede ser usado como un modelo interno dentro de un lazo de control IMC no lineal.

Referencias

1. Wouwer, A. V., Saucez, P., Schiesser, W.E. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 43, 14, 3469-3477 (2004).
2. Chu, Y.; Lou, C., Cheng, Q., Zhou, H. *Applied Thermal Engineering*, 28, 164-177 (2008).
3. Patankar, S.V. *Int. J. Heat and Fluid Flow*, 23, 222-231 (2002).
4. Demir, H., Koyun, A., Temir, G. *Applied Thermal Engineering*, 29, 224-233 (2009).
5. Qi, C., Li, H., Li, S., Zhao, X., Gao, F. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 51, 13205-13218 (2012).
6. C.A.J Fletcher, *Computational Techniques for Fluid Dynamics I - Fundamental and General Techniques* (Springer-Verlag, New York, ed. 2, 1991), pp. 17-46.
7. Carnahan, B., H.A. Luther y J.O. Wilkes, *Applied Numerical Methods* (Krieger Publishing Company, USA, ed. 1, 1969), pp. 429-530.
8. Verwer, J.G. *Applied Numerical Mathematics*, 22, 359-379 (1996).

9. van der Houwen, P.J. *Applied Numerical Mathematics*, 20, 261-272 (1996).
10. Alaeddine, M., Doumanidis, C. *Int. J. Numer. Meth Engng*, 61, 1921-1937 (2004).
11. Armaou, A., Christofides, P. D. *Proces Systems Engineering*, 47, 1, 79-106, 2001.
12. Dubljevic, S., Christofides, P.D., Kevrekidis, I.G. *Int. J. Robust Nonlinear Control*, 14, 133-156 (2004).
13. Hanczyc E.M., Palazoglu, A. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 34, 557-566, 1995.
14. Patwardhan, A.A., Wright, G.T., Edgar, T.F. *Chemical Engineering Science*, 47, 4, 721-735 (1992).
15. Wiak, S. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 24, 1421-1437 (1987).

Figuras

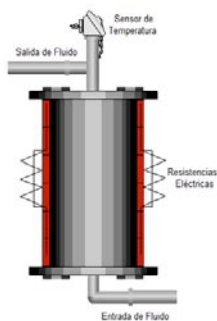


Figura 1. Sistema de calentamiento modelado.

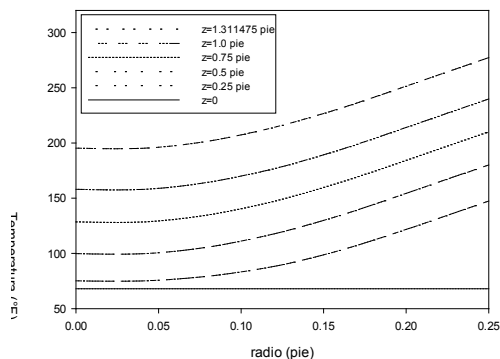


Figura 2. Perfiles de temperatura en estado estacionario para diferente longitudes del calentador.

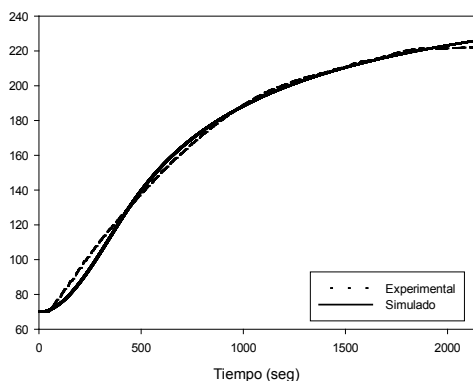


Figura 3. Perfiles de temperatura en estado transiente simulado y experimental - dinámica de primer orden con parámetros optimizados.

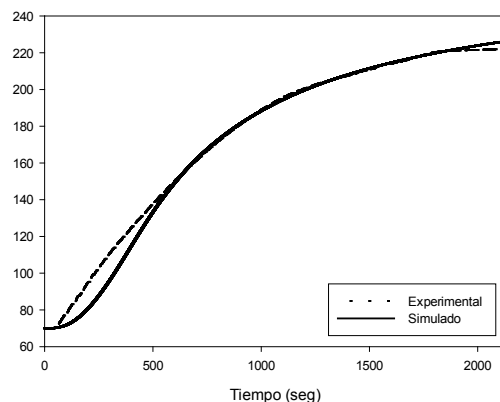


Figura 4. Perfiles de temperatura en estado transiente simulado y experimental - dinámica de segundo orden con parámetros optimizados.

DETERMINACIÓN DEL REFLUJO MÍNIMO DE UNA MEZCLA BINARIA NO IDEAL CON UN MÉTODO RIGUROSO

Elsa Hynmar Fernández Martínez, Ángel Castro Agüero

Facultad de Ciencias Básicas Ingeniería y Tecnología, Universidad Autónoma de Tlaxcala, Calzada Apizaquito S/N, Apizaco, Tlaxcala, 90300, México.
elshymar@yahoo.com.mx

Introducción

La destilación es la operación unitaria más utilizada para la separación de mezclas en los procesos industriales. Las mezclas no ideales y azeotrópicas se presentan con frecuencia en la naturaleza, pero la obtención de variables estructurales de diseño para columnas de destilación de este tipo de mezclas no es tan trivial como para el caso de soluciones ideales.

El diseño de columnas de destilación para sistemas azeotrópicos [1,2] representa un caso típico de estudio en la literatura; pero existe escasa información sobre mezclas que muestran inflexiones [3] en la curva de equilibrio líquido-vapor de diagramas de composición. La característica principal en el diseño de mezclas

no ideales radica en determinar la condición que controla el cálculo de la relación de reflujo mínimo, ya que esta puede estar controlada por la alimentación o por la tangencia (mínimos en la curva de equilibrio).

El cálculo de la relación de reflujo mínimo es una variable estructural importante en el diseño de columnas de destilación, por lo que Reyes y colaboradores [4] realizaron un estudio para la determinación del reflujo mínimo con dos metodologías propuestas, para mezclas ternarias ideales y no ideales a diferentes condiciones de operación, los resultados se compararon con métodos cortos, así como con métodos rigurosos, obteniéndose buenos resultados.

El método propuesto en este estudio emplea una generalización matemática de los conceptos del método de Ponchon-Savarit [5,6] considerado tanto gráfico como riguroso, que a diferencia del método de McCabe Thiele y de los métodos aproximados, el primero no considera flujos molares constantes, ni volatilidades relativas constantes.

El presente trabajo muestra un método de diseño no iterativo para columnas de destilación convencionales en un sistema no ideal utilizando un procedimiento basado en conceptos del método de Ponchon-Savarit, resolviendo simultáneamente las ecuaciones que caracterizan el equilibrio líquido-vapor y los balances de masa y energía, para determinar la relación de reflujo mínimo.

Metodología

El procedimiento de diseño propuesto en este trabajo, se basa en la generación de un espacio vectorial originado por los balances de materia y energía, así como de las relaciones de equilibrio de la mezcla a separar. En un diagrama bidimensional entalpía-composición se generan diferentes vectores, los cuales representan a la alimentación, líneas de equilibrio, etapas y otros. Las componentes matemáticas de cada vector son iguales al número de especies presentes en la mezcla, es decir, para una mezcla binaria, la componente en \mathbf{i} representa la composición, mientras que la componente en \mathbf{j} la energía (expresada como la entalpía); la ecuación 1

muestra el vector de alimentación para un sistema ternario.

$$\mathbf{F} = z_1\mathbf{i} + z_2\mathbf{j}$$

La aplicación de un método de diseño como el propuesto en este trabajo requiere de la generación de datos de equilibrio y la determinación de entalpías en ambas fases, por lo que los coeficientes de actividad se estimaron con el modelo de Wilson, con el fin de corregir la no idealidad empleándose la ley de Raoult modificada para determinar el equilibrio líquido-vapor de la mezcla en estudio. La presión de vapor se calculó con la ecuación extendida de Antoine, mientras que las entalpías se obtuvieron a partir de integración de una función polinomial de la capacidad calorífica a presión constante. El método plantea sumas vectoriales y la solución de sistemas de ecuaciones que al resolverse proporcionan las variables estructurales de diseño, siendo el reflujo mínimo, una de ellas.

La relación de reflujo mínimo para una mezcla no ideal se calcula en función de la condición que controla el diseño del sistema; las cuales son la alimentación y la tangencia generada por los mínimos en la curva de equilibrio y debida por la no idealidad de la mezcla. El diseño de una columna para un sistema no ideal depende de las condiciones de alimentación y la especificación de composiciones en los productos. En el caso de que domine la condición de tangencia, el reflujo mínimo es mayor que el reflujo producido por la alimentación.

Para localizar la composición de tangencia se emplearon cálculos de flash adiabático característicos del método propuesto.

Resultados

Una mezcla binaria con el 40% en mol de Benceno (1) y 60% de Etilendiamina es separada en una columna convencional para determinar su relación de reflujo mínimo mediante el uso de un procedimiento matemático riguroso basado en el método de Ponchon-Savarit. El flujo de alimentación se fijó en 100 kgmol/h y la composición del destilado y fondos en 0.999 y 0.01 fracción mol, respectivamente. La alimentación entra a la columna como líquido saturado.

Para llevar a cabo una comparación del equilibrio líquido-vapor utilizando el modelo de Wilson con los datos experimentales, se determinó la desviación porcentual con respecto a la composición en la fase vapor ($\% \Delta y = 3.39$) y la desviación absoluta para la temperatura ($\Delta T = 0.68$). Observándose que la predicción en el equilibrio es adecuada para obtener la relación de reflujo mínimo.

La figura 1 muestra un diagrama entalpía-composición de la mezcla Benceno-Etilendiamina, la curva inferior representa los datos de saturación en el líquido, mientras que la superior es la saturación en el vapor, en el gráfico están representadas varias líneas de reparto (isotermas) del equilibrio líquido-vapor y se esquematizan los vectores (líneas

1 y 2) que determinan la relación de reflujo mínimo. Bajo las condiciones de alimentación (línea 1) la extensión de la línea de reparto hasta la composición de destilado indica la energía mínima para calcular el reflujo, mientras que la línea 2 representa la energía de reflujo mínimo, determinada por la tangencia; los valores obtenidos respectivamente fueron de 0.961 y 3.587. Estos resultados se compararon con los obtenidos por Doherty y Malone [3], donde emplean un método de diseño aplicado a sistemas con comportamiento cercano al ideal.

Conclusiones

La obtención de la relación de reflujo mínimo es una variable de suma importancia para el diseño de columnas de destilación, en este trabajo se empleó un procedimiento matemático basado en el método de Ponchon-Savarit, así como una serie de cálculos basados en el flash adiabático para determinar la relación de reflujo mínimo, con las especificaciones pertinentes, donde la tangencia controla esta variable estructural; los resultados son adecuados al compararse con otro método que emplea flujos molares constantes y volatilidades relativas constantes, restricciones que no aplican para el caso de mezclas no ideales. Además se comprobó que la relación de reflujo mínimo es mayor que el reflujo de la alimentación, cuando domina la condición de tangencia. El método de diseño propuesto requiere de bajo esfuerzo computacional y evita cálculos iterativos tediosos.

Agradecimientos

Los autores agradecen el apoyo económico de CONACyT en la generación de conocimiento para el área de procesos de separación en el diseño de columnas complejas de destilación del Proyecto N ° 135146 - CB-2009-01.

Referencias

1. Julka, V y Doherty, M. F., *Chem. Eng. Sci.*, 45, 7, 1801-1822, (1990).
2. Julka, V. y Doherty, M. F., *Chem Eng Sci.*, 48, 8, 1367-1391, (1993).
3. Doherty, M. F. y Malone, M. F. *Conceptual Design of Distillation Systems* First edition, (Mc Graw-Hill editorial, USA, 2001).
4. Reyes, J. A., Gómez, A., et al, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 39, 3912-3919, (2000).
5. Henley, E.J. y Seader J.D. *Operaciones de separación por etapas de equilibrio en ingeniería química*, (Editorial Reverté, España, segunda edición, 1990).
6. Marcilla, A. *Introducción a las operaciones de separación. Cálculo por etapas de equilibrio*. (Publicaciones de la universidad de Alicante, España, primera edición, 1998).

Figuras

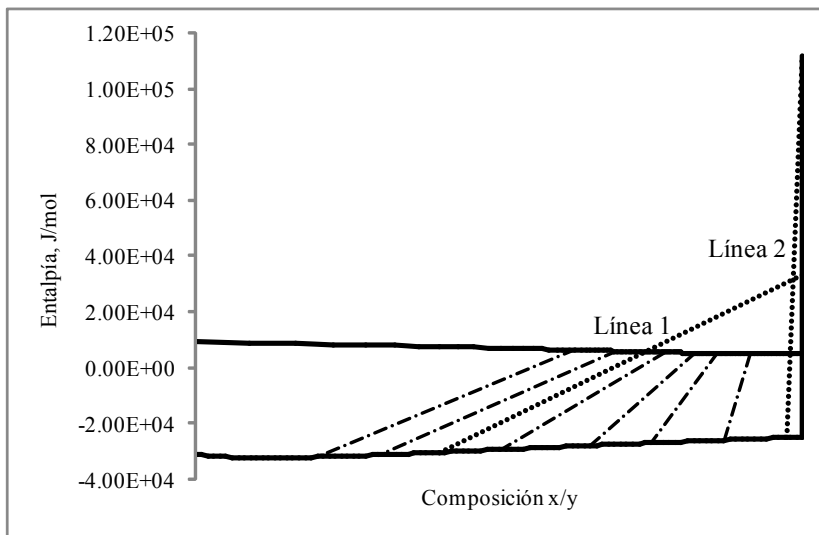


Figura 1. Localización de reflujos en función de la alimentación y de la tangencia en un diagrama entalpía-composición.

ESTUDIO DEL POTENCIAL DE HABITABILIDAD DEL OCÉANO DEL SATÉLITE EUROPA

Perla Abigail Figueroa González, Sandra I. Ramírez Jiménez

perlabi@gmail.com

Centro de Investigaciones Químicas

Introducción

Los extremófilos son organismos que se desarrollan en ambientes extremos, aquellos donde los organismos mesófilos no podrían sobrevivir. Los extremófilos se clasifican de acuerdo al factor físico o químico que requieren para desarrollarse de manera óptima. De acuerdo a esta clasificación existen organismos termófilos, psicrófilos, barófilos, entre otros (Rothschild y Mancinelli, 2001). De nuestro interés son los organismos halófilos, es decir aquellos que viven de manera óptima en medios con una alta concentración salina, específicamente cloruro de sodio (NaCl) la sal dominante en los océanos terrestres. Además de los halófilos existen los organismos halotolerantes, que son aquellos que

no requieren la presencia de NaCl en su medio para sobrevivir pero pueden hacerlo en caso de que esta esté presente (González-Hernández y Peña, 2002). Los extremófilos son modelos de estudio ideal en el desarrollo de experimentos de sobrevivencia de vida terrestre en ambientes análogos a los presentes en otros cuerpos del Sistema Solar.

Uno de los objetos de mayor interés para la Astrobiología es el satélite helado Europa. Esta luna presenta un océano líquido salado debajo de una gruesa capa de hielo. Las evidencias que soportan la existencia de ese océano líquido son los datos recabados por la sonda Galileo. Entre estos datos se encuentran fotografías de la superficie del

satélite las cuales muestran una gran cantidad de fracturas ocasionadas por el movimiento de la capa de hielo al encontrarse sobre una superficie no sólida. También detectó la presencia de un campo magnético inducido, consecuencia de su interacción con el campo magnético de Júpiter. La presencia de este campo magnético inducido sólo se explica si el satélite cuenta con una capa conductora global interna y un océano salado es la posibilidad más factible (Chyba y Phillips, 2002; Pappalardo *et al.*, 2003).

La presencia de agua líquida en un planeta o satélite es importante porque es uno de los tres requerimientos que se han identificado para el posible desarrollo de la vida como la conocemos. Los otros dos requerimientos son la presencia de moléculas orgánicas y una fuente de energía. En Europa se han detectado en su superficie carbono, además presenta hidrógeno y oxígeno, consecuencia de la fotólisis que sufren las moléculas de agua de su superficie. Se han detectado otras impurezas mezcladas con el hielo de la superficie del satélite, que pueden ser sales hidratadas entre las que destacan el sulfato de magnesio ($MgSO_4$), como la sal más abundante, seguida del sulfato de sodio (Na_2SO_4); ambas pueden también estar presentes en el océano salado subterráneo (Korablev *et al.*, 2010; Hand *et al.*, 2009).

El enfoque de este estudio es determinar la posible habitabilidad del satélite Euro-

pa sometiendo a diferentes bacterias a un ambiente análogo al del océano salado, con bajas temperaturas y bajos niveles de oxígeno. Además se pretende evaluar el efecto que pueden llegar a tener sales distintas al NaCl en el desarrollo de las bacterias. Para este fin se estudiará el efecto de la serie de Hofmeister, la cual indica que hay ciertos iones que ayudan a la estabilidad de algunas biomoléculas denominados iones cosmotrópicos; pero que también existen iones que tienden a desestabilizar a esas biomoléculas identificados como iones caotrópicos (Collins, 2004). Combinando algunos de los iones de la serie de Hofmeister se tienen cuatro sales en estudio: NaCl, la sal principal de los océanos terrestres; $MgSO_4$, la sal primordial en el satélite Europa; Na_2SO_4 , otra sal presente en el satélite y $MgCl_2$, cuarta sal en estudio.

Métodos

En este estudio se trabaja con las bacterias *Halomonas halodurans* (halófila) y *Bacillus pumilus* (halotolerante). *H. halodurans* tiene un crecimiento óptimo en 1.36 M de NaCl y 30 °C (Hebert y Vreeland, 1987). Para *B. pumilus* se debe determinar la concentración salina óptima.

Utilizando las sales en estudio, se modifican los medios nominales de cada bacterias. El crecimiento se evalúa realizando cinéticas de crecimiento por triplicado. Con las cinéticas de crecimiento, se obtiene el valor de la velocidad específica de crecimiento (μ)

que corresponde al valor de la pendiente al realizar un ajuste lineal a la fase exponencial de la cinética. Al comparar los valores de las velocidades específicas de crecimiento, se puede comparar el efecto que tiene cada sal sobre el crecimiento bacteriano.

Para cada concentración de NaCl, se determina la cantidad de cada una de las otras sales necesaria para alcanzar un valor equivalente de actividad de agua (a_w). La a_w es una estimación de la cantidad de moléculas de agua libres que el organismo en cuestión puede utilizar para su metabolismo. A medida que la concentración de solutos aumenta, el valor de a_w disminuye. Para calcular a la a_w se utiliza la siguiente ecuación:

$$a_w = n_1/n_1 + n_2$$

Ec. 1

donde n_1 corresponde al número de moles del disolvente, mientras que n_2 es el número de moles del soluto (Grant, 2004). Además se utiliza un higrómetro de punto de rocío para medir el valor de a_w . Mediante una prueba estadística se determina si ambos valores (calculado y medido) difieren significativamente.

Para someter a las bacterias a bajos niveles de O_2 y bajas temperaturas se construirá un reactor que permita implementar éstas condiciones. Dentro del reactor se modificará la atmósfera de forma que se disminuya el nivel

de O_2 . En el caso de las bajas temperaturas, se utilizarán baños refrigerantes que permitan alcanzar un valor de baja temperatura que pueda mantenerse constante durante el experimento.

Resultados preliminares

B. pumilus ha logrado crecer hasta 1.54 M de NaCl, además de que ha presentado crecimiento en 1.62 M de $MgSO_4$, 1.05 M de Na_2SO_4 y 0.24 M de $MgCl_2$. *H. halodurans* ha crecido en una concentración de 3.42 M de NaCl. En el caso de su concentración óptima (1.36 M de NaCl), se realizaron las cinéticas de crecimiento además de los cálculos para determinar el valor de a_w calculada y las concentraciones de las otras sales en función de éste. Estos cálculos dan un valor de a_w calculada de 0.973. A partir del número de moles de NaCl, se puede obtener la concentración de las otras sales para modificar el medio de las bacterias en función del mismo valor de a_w calculado (Tabla 1).

Conclusiones preliminares

Se debe determinar la concentración salina de crecimiento óptimo de *B. pumilus* (Tabla 2). Pruebas preliminares de su crecimiento en las sales en estudio, indican que es capaz de crecer en medios modificados con las cuatro sales. Pero al observar las concentraciones, la sal que más afecta su crecimiento de manera negativa es el $MgCl_2$, sal de naturaleza mas caotrópica que las otras tres sales. Al realizar las cinéticas de crecimiento se podrá evaluar con certeza el

efecto cosmotrópico y caotrópico que cada sal presente sobre la bacteria. De acuerdo a la serie de Hofmeister, se espera que se obtenga un mejor crecimiento en presencia de Na_2SO_4 . Lo mismo se esperaría para *H. halodurans*, aunque en este caso se espera que tolere mayores concentraciones salinas por tratarse de una bacteria halófila. Debido a las diferencias significativas entre los valores de a_w calculado y medido, se puede decir que la contribución molar de los componentes orgánicos del medio es importante.

Referencias

Revistas

1. Rothschild L. J; Mancinelli, R. L. 2001. *Nature*. Vol. 409: 1092-1101.
2. González-Hernández, J. C; Peña, A. 2002. *Rev. Lat. Amer. Microbiol.* Vol. 44 (3-4): 137-156.

3. Chyba, C. F; Phillips, C. B. 2002. *Origins Life Evol B.* 32: 47-68.
4. Pappalardo, R. T; Head, J. W; Greeley, R. 2003. *Sci Am.* 64-73.
5. Korablev, O; Gerasimov, M; Dalton, J.B; Hand, K; Lebreton, J; Webster, C. *ASR.* 48:702-717.
6. Collins, K. D. 2004. *Methods.* 34: 300-311.
7. Hebert, A.M; Vreeland, R.H. 1987. *Int J Syst Bacteriol.* 37 (4): 347-340.
8. Grant, W. D. 2004. *Phil. R. Soc. Lond B* 359: 1249-1267.

Libros

1. Hand, K. P; Chyba, C. F; Priscu, J. C; Carlson, K. H; Nealson, K. H. in *Europa*, Pappalardo, R.T; McKinnon W.B; Khurana, K. Eds. (Univ. Arizona Press, 2009), pp 589-629.

Tablas

Tabla 1. Valores de a_w , concentración salina y velocidad específica de crecimiento para *H. halodurans*. * Por determinar.

		Sales en estudio							
Molar	a_w	NaCl		MgSO ₄		Na ₂ SO ₄		MgCl ₂	
(mol/L	calculad	g/L	μ (h ⁻¹)	g/L	μ (h ⁻¹)	g/L	μ (h ⁻¹)	g/L	μ (h ⁻¹)
)	a								1)

Tabla 2. Determinación de la concentración de óptimo crecimiento para *B. pumilus* en NaCl.

Molar (mol/L)	a_w calculada	Velocidad específica de crecimiento (μ h ⁻¹)
0.17	0.997	0.115
0.68	0.988	0.085
1.02	0.981	*
1.54	0.975	*

* Por determinar.

ASIGNACIÓN DE LATE EMBRYOGENESIS ABUNDANT (LEA4-5) POR RMN

Leidys French Pacheco¹, Alejandra Covarrubias², César Cuevas², Carlos Amero Tello¹

leidysfrench@gmail.com

¹Centro de Investigaciones Químicas, UAEM

²Instituto de Biotecnología, UNAM

Introducción

Las plantas sometidas a déficit hídrico ocasionado por cambios de temperatura, salinidad, o sequía pueden sufrir pérdida intracelular de agua. En respuesta, producen diversas proteínas, entre las que se encuentran las proteínas conocidas como *Late Embryogenesis Abundant* (LEA) (1). Estas proteínas no se acumulan en las plantas ante la carencia de agua ocasionada por factores abióticos, sino también a la limitación de agua en determinadas condiciones fisiológicas de la planta como el desarrollo de las semillas, polen y algunos estados de desarrollo de las raíces (2).

A pesar del bajo porcentaje en identidad de secuencia entre las proteínas LEA, han

sido agrupadas en 7 grupos (LEA1-LEA7) diferenciados por motivos característicos y únicos dentro de cada grupo, (2). En solución, según estudios espectroscópicos, la mayoría de las proteínas LEA se hayan en forma de *random coil*, por lo que se han clasificado como proteínas intrínsecamente desplegadas, (IUPs por sus siglas en inglés). Sin embargo en presencia de solventes que inducen plegamiento (SDS, TFE, glicerol) o en condiciones de sequía pueden sufrir transiciones de IUP a conformaciones plegadas (3).

Perspectivas de trabajo

Aunque la caracterización estructural y funcional de las proteínas LEA se ha abordado mediante diferentes técnicas, poco se conoce

de los mecanismos moleculares que median la interacción de LEA con sus ligandos, de sus propiedades termodinámicas, ni las escalas de tiempo en los que ocurren estos procesos. Establecer estos aspectos resulta importante si se quiere inferir la funcionalidad de las LEA. En este sentido la utilización de RMN permitiría abordar estos estudios. En este proyecto se plantea realizar asignación de las señales de RMN de la proteína, como un paso imprescindible para abordar aspectos como el plegamiento bajo diferentes condiciones experimentales y la interacción con distintos ligandos.

Métodos

Expresión y purificación de LEA4-5

La expresión de la proteína se realizó a partir del plásmido pTrc99A clonado con el gen At5g06760. La cepa bacteriana *E. coli* D3 se utilizó como sistema de expresión de LEA4-5. Se creció una colonia en 20 mL de medio LB (Luria Bertani) (NaCl: peptona: extracto de levadura 1:1:0.5%) toda la noche a una temperatura de 37°C (precultivo). El precultivo se centrifugó y el sedimento se adicionó a 250mL de medio mínimo M9 (Na₂HPO₄·7H₂O, KH₂PO₄, NaCl, NH₄Cl, MgSO₄, CaCl₂, MnCl₂, FeCl₃, ZnSO₄ y vitaminas). Se utilizó ¹⁵NH₄Cl y ¹³glucosa marcada isotópicamente. Se adicionó antibiótico ampicilina (0.1 mg/mL). El cultivo

bacteriano se dejó crecer hasta que alcanzó una absorbancia a 600 nm entre 0.6-0.7. Se indujo con IPTG 0.3 mM durante toda la noche a 25°C.

La purificación se realizó según la metodología propuesta por Campos et al., la cual se basa en la precipitación diferencial de la proteína con ácido tricloroacético(4).

Experimentos para asignar la proteína

Para el estudio de proteínas por RMN se requiere de la asignación de las señales, esto consiste en la identificación de los residuos que generan cada señal en el espectro de RMN. Se tomaron espectros de 3D (HSQC 2D, HNCACB, HNCOCACB, HN(CA)NH, HNN). Los experimentos de triple resonancia permitirán obtener una correlación selectiva entre protones, carbonos y nitrógenos.

Referencias

1. Battaglia M, Covarrubias A a. *Front Plant Sci.* 4,190-95(2013).
2. Battaglia M, Olvera-Carrillo Y, Garciarrubio A, Campos F, Covarrubias A. *Plant Physiol.* 148,6–24(2008).
3. Soulages JL, Kim K, Walters C, Cushman JC. *Plant Physiol.* 128,822–32(2002).
4. Campos F, Guillén G, Reyes JL, Covarrubias A. *Protein Expr Purif.* 80,47–51. (2011).

ANÁLISIS TÉRMICO POR CFD DE UN EVAPORADOR EN ARREGLO CUADRADO AIRE-AGUA ACOPLADO A UN SISTEMA DE REFRIGERACIÓN POR ABSORCIÓN

Yuridiana Rocio Galindo Luna¹, Rosenberg J. Romero D²

¹Posgrado en Ingeniería y Ciencias Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos

²Centro de Investigación en Ingeniería y Ciencias Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos

rosenberg@uaem.mx

Introducción

El calentamiento global es un término utilizado para referirse al aumento de temperatura media global de la atmósfera terrestre y de los océanos, lo que provoca el efecto invernadero; el cual se define como la absorción de ciertos gases atmosféricos principalmente CO₂, debido al uso excesivo de combustibles fósiles en las actividades humanas. Por otro lado se reconoce el fin de la explotación rentable de las reservas de energía fósil tales como: petróleo, gas natural, carbón y yacimientos de uranio, por lo que es necesario conducir nuestras actuales prácticas energéticas hacia modelos de generación más limpios, una de estas opciones son las denominadas bombas de calor.

Se denomina bomba de calor a un grupo de tecnologías que transfieren calor de un nivel de temperatura a otro mayor [1]. Las bombas de calor se clasifican en dos tipos:

- Tipo I: donde la temperatura del evaporador (TEV) es menor a la temperatura del condensador (TCO) (en esta clasificación se encuentran bombas de calor por compresión y bombas de calor por absorción).
- Tipo II: donde la temperatura del evaporador es mayor a la temperatura del condensador (transformadores térmicos por absorción).

La bomba de calor tipo I se puede emplear para el acondicionamiento de espacios ya

sea suministrando energía térmica a una temperatura mayor de la ambiente (en el caso de calentamiento) o extrayendo energía térmica a una temperatura menor que el medio ambiente (caso de enfriamiento). Los componentes principales de una bomba de calor por absorción tipo I son: generador, absorbedor, condensador, evaporador, válvula de expansión y bomba; las mezclas de trabajo están compuestas por un fluido de trabajo (refrigerante) y un absorbente [2].

El en presente trabajo se realiza un análisis térmico de un evaporador de tubos aletados utilizando dinámica de fluidos computacional (CFD) en ANSYS Fluent ® este software es ampliamente aplicado en los campos de la ingeniería por ejemplo en el análisis de elementos finitos, dinámica de fluidos, electrónica, electromagnetismo y la optimización de diseños. Sandar y Gross[3], realizaron una comparación con condiciones de flujo de aire, entre un haz de tubos de arreglo cuadrado con respecto a un arreglo triangular, simulando aletas anulares en el software Fluent ® y un modelo $k-\epsilon$, sus resultados demuestran que el gradiente de temperatura para un arreglo en cuadrado es mayor con respecto al arreglo triangular. Wais [4] analiza la transferencia de calor a través de aletas anulares de espesor constante, el tubo y las aletas se modificaron para calcular la transferencia de calor a diferentes condiciones, los resultados muestran perfiles de velocidad, contornos de temperatura y presión para cada condición

propuesta. En 2013 Bilirgen et al. [5] reporto los efectos sobre la altura, el grosor, el material y el espaciamiento de las aletas utilizando dinámica de fluidos computacional (CFD), el autor concluye que el efecto del espesor de la aleta en la transferencia de calor y la caída de presión es despreciable en comparación con la altura y el espaciamiento de la aleta.

Métodos

El análisis térmico utilizó tres software especializados, la geometría del evaporador ha sido propuesta por Galindo [6] y diseñada con apoyo del paquete SolidWorks® versión 2012. El proceso de discretización del dominio se llevó a cabo en el software Gambit® versión 2.4.6, la malla se encuentra constituida por elementos cuadrados y triangulares. Finalmente la simulación en 2D se realizó con apoyo del software ANSYS Fluent ®, bajo el modelo $k-\epsilon$, simulando un flujo de entrada del aire de 1 m/s.

Resultados

El diseño de la geometría se observa en la Figura 1, en esta se aprecia la vista en isométrico del evaporador, la cual posee 24 tubos de aluminio en un arreglo cuadrado, con aletas de mismo material bajo las siguientes dimensiones: espesor de aleta 3.81×10^{-4} m, altura de aleta 0.018 m y 350 aletas por metro de tubo, la discretización de la geometría se aprecia en la Figura 2, la malla posee 137, 846 celdas, la discretización al contorno de las aletas es mayor, debido al interés de los

fenómenos de transferencia de calor que se presentan en esta zona. La Figura 3 se muestra el contorno de temperaturas en el evaporador, en la cual se puede observar la transferencia de calor a través del haz de tubos, los resultados de la simulación muestran una disminución de temperatura de 17°C en promedio. El comportamiento de la temperatura a lo largo del evaporador, mostrado en la Figura 4; dentro del cual se puede apreciar que el gradiente de temperatura es homogéneo en un 80% del equipo.

Conclusiones

Se llevó a cabo un análisis térmico por *CFD* de un evaporador aire – agua, integrado a una máquina de climatización por absorción. La geometría propuesta consta de un evaporador con 24 tubos aletados de 1 m de largo, en arreglo cuadrado, construidos de aluminio y con espesor de aleta 3.81×10^{-4} m, altura de aleta 0.018 m y 350 aletas por metro de tubo. Los resultados muestran que el gradiente de temperatura del aire fue de 17°C , homogéneo a través de la altura del equipo en un 80%.

Referencias

1. - Herold K. E., Radermacher R., Klein S. A., “*Absorption chillers and Heatpumps*”, CRC press”, 1996.
- 2.- Ibarra Bahena Jonathan, “Determinación del potencial de recuperación de calor de desecho industrial con un DSHT”. Tesis de maestría, UAEM, México (2011).
- 3.- Sandar Mon Mi, Gross Ulrich, “*Numerical study of fin-spacing effects in annular-finned tube heat exchangers*”, International Journal of Heat and Mass Transfer, 47, pp. 1953-1964, (2004).
- 4.- Wais Piotr, “Fin Tube Heat Exchanger Optimization”, (Heat Exchanger, InTech, Croacia, Marzo 2012), capítulo 13, Libro de edición libre en www.intechopen.com.
- 5.- Bilirgen Harun, Dunbar Stephen, K. Levy Edward, “*Numerical modeling of finned heat exchangers*”, Applied Thermal Engineering, 61, pp 278-288, (2013).
- 6.- Galindo Luna Yuridiana Rocio, “Diseño y análisis de un evaporador aire-agua en un ciclo termodinámico por absorción para acondicionamiento de espacios”, Tesis de maestría, UAEM, México (2012).

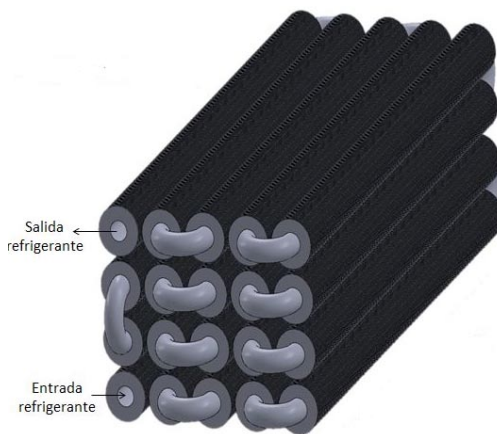


Figura 1. Evaporador en arreglo cuadrado (SolidWorks).

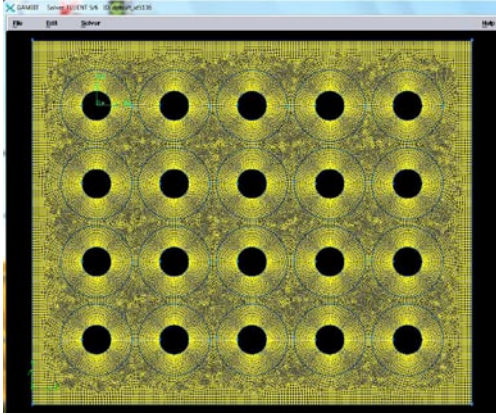


Figura 2. Discretización del dominio.

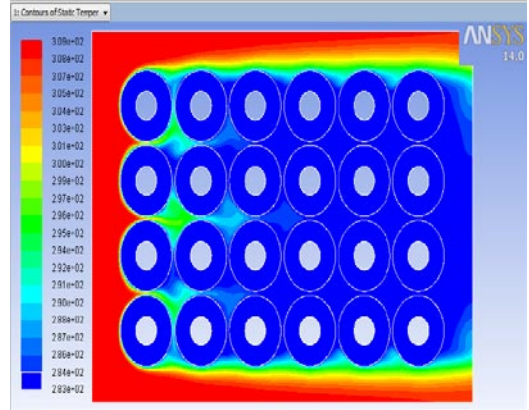


Figura 3. Contornos de temperatura en arreglo cuadrado

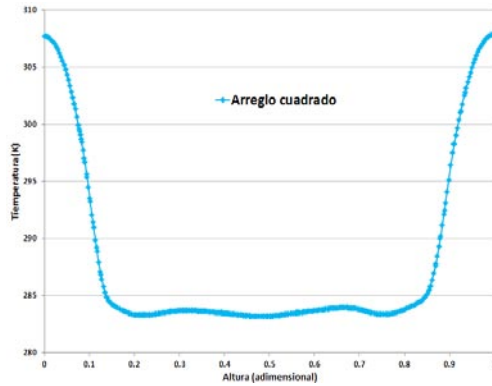


Figura 4. Comportamiento de la temperatura.

CONTROL DE LA MICROESTRUCTURA DE UN COPOLÍMERO SINTETIZADO A PARTIR DE MONÓMEROS (ACRILONITRILO Y ACETATO DE VINILO) CON AMPLIA DIFERENCIA DE REACTIVIDADES CONTROLANDO LA VELOCIDAD DE ADICIÓN

Samuel Rodríguez Baruch¹, Shirley Carro Sánchez¹, Humberto Vázquez Torres, Pedro R. García Morán¹

¹Universidad Autónoma de Tlaxcala

²Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa
pedrogarciamoran@gmail.com

Introducción

Cuando dos monómeros con gran diferencia en sus relaciones de reactividad, se ponen juntos a reaccionar, la composición del copolímero lleva a una desviación de la composición de la alimentación [1]. El monómero con la mayor reactividad reacciona primero y, una vez que se ha consumido éste, empezará a reaccionar el segundo. Eventualmente se insertarán algunas unidades del segundo monómero en el bloque del primero pero, básicamente, se tendrá un copolímero formados por dos bloques con una pequeña zona de transición. Estas desviaciones de la composición traen como consecuencia una inhomogeneidad en la composición final del producto, la cual es inaceptable si se

consideran las condiciones de aplicación del copolímero. Se han probado varias estrategias para preparar copolímeros con una composición fija, pero además con un control en la distribución de las unidades monoméricas a lo largo de la cadena; este problema ha sido abordado empleando un proceso de polimerización semicontinuo [1, 2, 3].

Se han propuesto varias estrategias para controlar la microestructura, entre las que se encuentran las siguientes: alimentación bajo condiciones de semiescases, la cual consiste en que el reactor se carga con todos los monómeros menos reactivos más una cantidad del monómero más reactivo, necesaria para formar un copolímero con la composición

deseada; el resto del monómero se debe agregar a una velocidad variable, proporcional a la cantidad de los monómeros menos reactivos que aún prevalecen en el reactor. De esta manera se permite que se forme un pequeño bloque de cada monómero; así, en promedio, la cadena mostrará una microestructura alterna o aleatoria. La velocidad a la que se debe alimentar el monómero más reactivo restante debe ser calculada a través de un modelo matemático, esto es ideal pero tiene la limitación que no siempre se tienen todos los parámetros necesarios. Sin embargo, es la estrategia que puede asegurar una composición más homogénea en un tiempo corto.

Otra estrategia considera la alimentación de monómero a velocidad constante, una vez que se ha hecho la primera adición del monómero más reactivo, el resto del monómero se alimenta a una velocidad constante, similar a la primer adición, esta estrategia conlleva un mayor tiempo y produce un material más heterogéneo cuando se compara con la primera estrategia.

Otra más consiste en alimentar, en condiciones de escasas, ambos monómeros. Si se alimentan ambos monómeros y se permite se consuman se conseguirá que cada monómero forme un pequeño bloque; el tamaño del bloque dependerá de la cantidad de monómero alimentado y de la cantidad de radicales activos. La velocidad de adi-

ción se puede hacer tan fina como se quiera para conseguir un copolímero homogéneo. Esta estrategia tiene el inconveniente de que el monómero menos reactivo se podría ir acumulando debido a que los periodos de adición son constantes y al final de la reacción formar un bloque que sea distinguible de modo que provoque heterogeneidad en el material final. Se sabe que el copolímero más homogéneo se obtiene manteniendo una rapidez de alimentación por abajo de la velocidad de reacción de los monómeros, el inconveniente es que el tiempo requerido para producir un copolímero con una masa molecular similar al obtenido por la primer estrategia es el triple [4, 5].

En general, se reconoce para controlar la microestructura entre monómeros con una amplia diferencia de reactividades que la alimentación de monómero R_m , debe estar por debajo de la velocidad de polimerización, R_p .

En este trabajo se propone controlar la microestructura en un copolímero de acrilonitrilo y acetato de vinilo; la estrategia a seguir consiste en mezclar los dos monómeros y hacerlos reaccionar por un proceso semicontinuo, en el que R_m esté por debajo de R_p .

La temperatura de transición vítrea (T_g) del poli(acrilonitrilo) es de 87 °C y la del poli(acetato de vinilo) de 30 °C. Un copolímero con microestructura homogénea de

AN y VAc deberá presentar una T_g con un valor de $44.6\text{ }^\circ\text{C}$ de acuerdo con la ecuación de Fox para una fracción molar de 0.5 para ambos monómeros. El interés en controlar la microestructura de un copolímero de AN y VAc radica en que este copolímero tiene un gran valor comercial debido a que son empleado para producir fibras de carbono, pero además, los grupos funcionales nitrilo y acetato ofrecen una amplia gama de posibilidades de ser modificados para conferirle nuevas propiedades fisicoquímicas; especialmente si se trabaja para convertirlo en un polielectrolito.

Metodología experimental

Sustancias químicas

Los monómeros utilizados son acrilonitrilo (AN) y acetato de vinilo (VAc); como iniciador se utilizó persulfato de potasio (KPS) y como tensoactivo dodecilsulfato de sodio (DOSS). Todos los reactivos fueron adquiridos de la compañía Sigma Aldrich. Para preparar la emulsión se utilizó agua desionizada.

Procedimiento

Los monómeros fueron tratados con carbón activado para retirar el inhibidor, luego se filtraron y se usó sulfato de magnesio para retirar la humedad; posteriormente se filtraron y fueron destilados a presión reducida antes de usarlos. El KPS y el DOSS se utilizaron como se recibieron. Las reacciones se llevaron a cabo en un matraz de tres bocas, en el que se acopló un con-

densador de vapores, un termómetro y un embudo de adición; la agitación se realizó con una barra magnética y la atmósfera se controló purgando con una corriente ligera de nitrógeno. Las reacciones se llevaron a cabo a $60\text{ }^\circ\text{C}$. La mezcla de monómeros se puso en una. La evolución de la reacción se siguió por gravimetría. El polímero fue recuperado precipitándolo en acetona, luego fue secado a vacío a $50\text{ }^\circ\text{C}$. La calorimetría diferencial de barrido fue realizada bajo un flujo de nitrógeno ($50\text{ cm}^3/\text{min}$) en un equipo MDSC2920, usando una rampa de calentamiento de $5\text{ }^\circ\text{C}/\text{min}$ con una amplitud de $\pm 1.06\text{ }^\circ\text{C}$ y un periodo de 40 segundos en un intervalo de -20 a $140\text{ }^\circ\text{C}$. La T_g fue obtenida luego de la segunda o tercera corrida para evitar el ruido.

Resultados preliminares

En las primeras corridas realizadas para copolimerizar acrilonitrilo y acetato de vinilo se observaron dos T_g 's, o en algunos casos solo una, alrededor de $88\text{ }^\circ\text{C}$, la cual corresponde al poli(acrilonitrilo), (Fig. 1); en tanto que para el poli(acetato de vinilo) no se tiene la certeza que la inflexión que aparece entre 0 y $20\text{ }^\circ\text{C}$ sea la que le corresponde, ya que su valor se encuentra en $30\text{ }^\circ\text{C}$. Por otro lado la T_g que le corresponde a un copolímero de acrilonitrilo y acetato de vinilo, con una microestructura homogénea, cuando se calcula por la ecuación de Fox, es de $44.6\text{ }^\circ\text{C}$ cuando la fracción molar es de 0.5 para cada monómero.

Perspectivas del trabajo

Dado que el trabajo se encuentra en su etapa inicial se puede establecer lo siguiente:

- Se ha empezado por establecer la estrategia de adición de monómero. Se ha trabajado adicionando la mezcla de monómeros por goteo, sin embargo cuando se ha determinado la temperatura aparecen dos temperaturas de transición vítrea, lo cual indica que el copolímero se encuentra en forma de bloque, o que tiene dominios donde es posible distinguir un homopolímero.
- Cuando solo aparece una T_g , la del poli(acrilonitrilo), se debe a que la velocidad de adición fue muy rápida, y las partículas de polímero se encuentran en condiciones de exceso de monómero, de modo que solo reaccionó el acrilonitrilo.
- Para evitar la heterogeneidad de la cadena de polímero se intentó alargar el tiempo entre adiciones, pero no mejoró la situación, dado que aún se distinguían dos T_g 's.
- La mezcla de monómeros se agrega desde una bureta, lo cual puede provocar que al paso del tiempo ocurra una segregación de monómeros debido a la diferencia de densidades; por esta razón se espera adicionar la mezcla de monómeros desde un embudo de adición en el cual sea posible aplicar agitación para asegurar que la mezcla sea homogénea.

- Se espera crear un conjunto de datos en los que solo se observe una sola T_g , de modo que sirvan de base para modelar el proceso de polimerización semicontinuo en el cual sea posible predecir adecuadamente la velocidad de adición de los monómeros.

Referencias

1. Canu, P., Canegallo, S., Morbidelli, M., Storti, G. Composition Control in Emulsion Copolymerization. I. Optimal Monomer Feed Policies. *Journal of Applied Polymer Science*, Val. 54, 1899-1917 (1994)
2. Canegallo, S., Canu P., Morbidelli, M., Storti, G. Composition Control in Emulsion Copolymerization. 11. Application to Binary and Ternary Systems. *Journal of Applied Polymer Science*, Val. 54, 1919-1935 (1994).
3. Arzamendi, G., Asua, J. M. Monomer Addition Policies for Copolymer Composition Control in Semicontinuous Emulsion Copolymerization. *Journal of Applied Polymer Science*, Vol. 38, 2019-2036 (1989)
4. Arzamendi, G., Asua, J. M. Copolymer composition control during the seed emulsion copolymerization of vinyl acetate and methyl acrylate. *Makromolekulare Chemie. Macromolecular Symposia*. 35/36, 249-268, (1990).
5. Van Doremale, G. H. J., Schoonbrood, H. A. S., Kurja, J., German, A. L. Copolymer Composition Control by Means of Semicontinuous Emulsion Copolymerization. *Journal of Applied Polymer Science*, Vol. 45, 957-966 (1992)

6. Peter A Lovell., Mohamed S El-Aasser. Emulsion polymerization and emulsion polymers. (John Wiley and sons, New York, 1997) Cap. 7.

Agradecimientos

A la Universidad Autónoma de Tlaxcala por su apoyo financiero.

Figuras

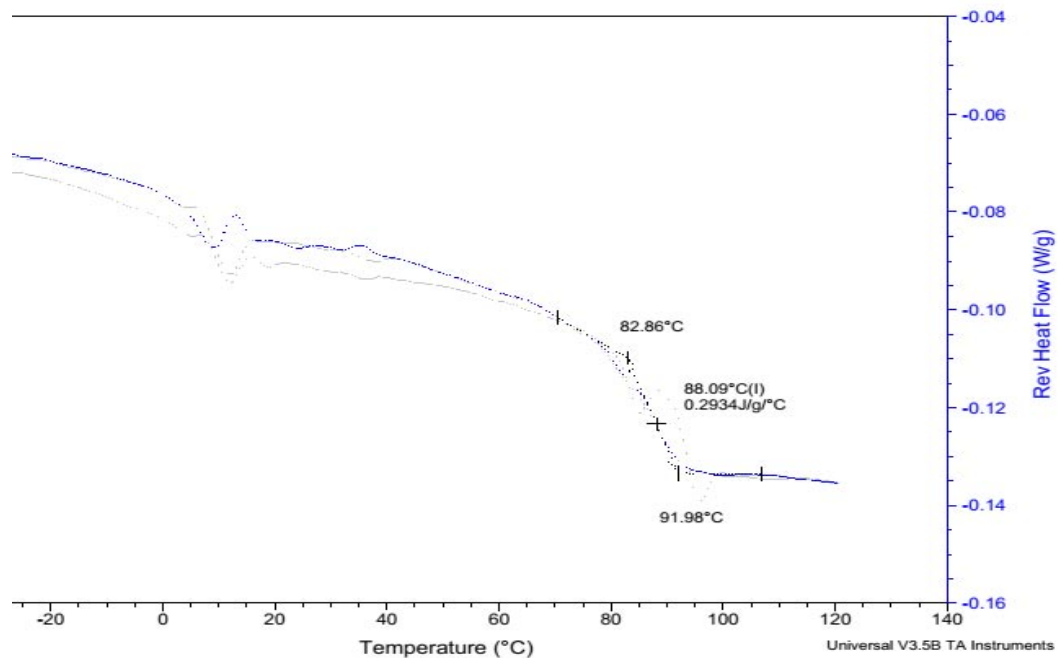


Figura 1. Termograma de un copolímero de acrilonitrilo acetato de vinilo.

MODELADO Y SIMULACIÓN DE UN REACTOR A ESCALA PILOTO PARA LA PRODUCCIÓN DE PROPILENGLICOL

**Enedina Flores¹, Luis Domínguez¹, Javier R. Morales¹, Misael González¹,
Ángel Castro Agüero²**

¹Universidad Politécnica de Tlaxcala, Av. Universidad No. 1, San Pedro Xalcaltzinco, Tlaxcala, 90800, México.

misael.gonzalez@uptlax.edu.mx

²Facultad de Ciencias Básicas Ingeniería y Tecnología, Universidad Autónoma de Tlaxcala, Calzada Apizaquito S/N, Apizaco, Tlaxcala, 90300, México.

El modelado y simulación en estado dinámico es una actividad común para los ingenieros de control. Mediante simulaciones dinámicas se pueden probar diferentes estrategias de control antes de su elección e implementación, se logran examinar el comportamiento en presencia de perturbaciones y optimizar los parámetros de sintonización de controladores por retroalimentación.

Existen muchos esfuerzos por generar la cultura del modelado y simulación en ingeniería química. Muchos autores mediante sus obras aportan metodologías para la formulación, construcción y simplificación de modelos matemáticos además de la forma de dar solución a partir de la aplicación de métodos numéricos [1,2,3].

En muchas ocasiones el modelado en estado estable es suficiente, por ejemplo, Kiss y col. [4] usan modelos adimensionales en estado estacionario para el diseño y control de procesos con reacción y separación, y muestran metodologías para elegir las estructuras de control que garanticen la operación deseada de una planta. Vadapalli y Seader [5] analizan un reactor CSTR para la producción de propilenglicol a partir de óxido de propileno y agua en presencia de metanol y muestran que en función del flujo de este último el sistema puede presentar múltiples estados estacionarios, solo algunos de estos estados muestran estabilidad del proceso. Sin embargo, si se pretende analizar un proceso en operación batch, la naturaleza de dichos procesos no

permite el análisis en estado estable ya que la dependencia del tiempo se encuentra explícita en el modelado. Además, si se presenta la necesidad de controlar estos procesos, los modelos dinámicos son indispensables.

En este trabajo se presenta el modelado dinámico de un reactor batch a escala piloto el cual será empleado para la producción de propilenglicol a partir de la hidrólisis en fase líquida del óxido de propileno. La reacción se puede llevar a cabo a condiciones cercanas a las ambientales con un exceso de agua y adicionando metanol para evitar la separación de fases ya que la solubilidad del óxido en agua es baja. La reacción es exotérmica y para mantener la reacción en fase líquida es fundamental mantener controlada la temperatura del reactor y evitar que se alcance el punto de burbuja de la mezcla. El objetivo de modelar y simular en estado dinámico el reactor con las dimensiones reales es probar diferentes configuraciones de control antes de su implementación en la planta piloto. La simulación es realizada usando el paquete computacional

gPROMPS y se compara el desempeño de tres estrategias de control. Se evalúa el comportamiento dinámico de cada estrategia y se investiga el efecto de la concentración de metanol sobre la estabilidad del proceso. Los resultados de esta investigación pueden ser usados como base para la indagación sobre el uso de controladores no lineales basados en modelos en este tipo de sistemas.

Referencias

1. Rice R. C. y Do D. D., *Applied Mathematics and Modeling for Chemical Engineers*, (John Wiley & Sons., 1995).
2. Luyben W., *Process Modeling, Simulation, and Control for Chemical Engineers*, (McGraw-Hill., 1996).
3. Rasmuson A., Andersson B., Olsson L. y Andersson R., *Mathematical Modeling in Chemical Engineering*, (Cambridge University Press., 2014).
4. Kiss A. A., Bildea C. S. y Dimian A. C., *Comput Chem Eng*, 31, 601-61, (2007)
5. Vadapalli, A. y Seader J. D., *Comput Chem Eng*, 25, 445-464 (2001).

OBTENCIÓN Y ANÁLISIS DE EXTRACTOS DE *PSITTACANTHUS CALYCVLATUS* Y *PHORADENDRON TOMENTOSUM* CON POTENCIAL HIPOGLUCEMIANTE E HIPOTENSOR

María Hernández González¹, Ma. Guadalupe Rodríguez Acosta¹, Ana Sofía Salinas Martínez¹, Mildred Inna Marcela Flores Verastegui¹, Hugo Sánchez Ruiz¹, Dolores Gabriela Martínez Vázquez¹, María Catalina Pérez Berúmen²

Maryhg12@yahoo.com

¹Universidad Autónoma Agraria Antonio Narro

²Facultad de Ciencias Químicas Universidad Autónoma de Coahuila

Introducción

Phoradendrum tomentosum y *Psittacanthus calyculatus* son plantas semihepiftas, conocidas comúnmente como muérdagos o parásitos y se alojan en diferentes especies de árboles, entre ellas mezquites. Estas plantas son utilizadas para la preparación de té como un tratamiento alternativo para la diabetes tipo 2 (1).

La secuencia empleada en el estudio de las plantas con actividad antidiabética es generalmente la misma que se sigue con cualquier planta medicinal. Una vez que se conocen los antecedentes acerca de las propiedades medicinales de una planta determinada por medio de investigación etnobotánica, se procede a la extracción, caracterización y cuantificación

de los principios activos responsables de la actividad de interés para posteriormente realizar estudios de farmacología experimental en diferentes animales de laboratorio (2).

El principal factor etiológico implicado en la pobre regulación de la diabetes y sus complicaciones, por ejemplo, la retinopatía, neuropatía, nefropatía y la microangiopatía, es la liberación de radicales libres. Para el tratamiento de la diabetes sería de utilidad contar con compuestos con propiedades antioxidantes (3). El sistema antioxidante es el encargado de la remoción de especies reactivas o radicales libres generados en el organismo como consecuencia de procesos fisiológicos o patológicos. Dado que la pro-

ducción excesiva de estas moléculas puede inducir muerte celular, un adecuado balance entre los sistemas oxidante y antioxidante es vital para la función, regulación y adaptación de las células a diversas condiciones (4).

La presente investigación tiene como objetivo la identificación y cuantificación de compuestos activos reconocidos por su actividad hipoglucemiante e hipotensora presentes en los extractos de *Psittacanthus calyculatus* y *Phoradendron tomentosum* para determinar si éstos pueden ser aplicados dentro de la formulación de algún fármaco o alimento funcional para diabéticos tipo 2.

Métodos

Para la presente investigación se recolectaron muestras de *Psittacanthus calyculatus* procedentes del municipio de Tonalá, Jalisco y otra parte en la Ciudad de Querétaro. *Phoradendron tomentosum* se encontró en las inmediaciones de del ejido El Tunal, en General Cepeda, Coahuila, las cuales fueron identificadas en el herbario de la Universidad Autónoma Agraria Antonio Narro. Posteriormente fueron secadas y almacenadas en lugar fresco y seco, hasta el momento en que se llevó a cabo el proceso de extracción.

Se realizó la extracción de los compuestos de interés mediante diferentes técnicas; arrastre por vapor, uso de solventes orgánicos; etanol y metanol, y mediante un proceso de infusión simple.

Los extractos fueron secados en un condensador de aire seco frío, hasta la obtención de una mezcla viscosa, que fue posteriormente liofilizada; para ser sometida a pruebas cualitativas para identificar la presencia de compuestos fitoquímicos de interés, y la posterior cuantificación de fenoles totales, usando el reactivo de Folin-Ciocalteu y flavonoides, mediante la técnica propuesta por Cheng-Chung (5); finalmente se realizó un análisis de espectroscopia infraroja, con la finalidad de identificar la presencia de bandas asociadas a la presencia de grupos funcionales características de los compuestos de interés.

Resultados

A partir de las pruebas cualitativas, fue posible apreciar que el material obtenido mediante la técnica de arrastre por vapores, no presentaba, los compuestos fitoquímicos de interés para la presente investigación, por lo que se procedió a realizar las pruebas cuantitativas solo en el resto de los extractos obtenidos.

Del análisis de medias ($p \leq 0.05\%$) efectuado para el contenido de fenoles totales, fue posible apreciar que la muestra obtenida en medio acuoso presentó la mayor concentración con 0.52 mg/ml para la muestra de *P.calyculatus* y 0.53 mg/ml para *Ph. tomentosum*.

Para el contenido de flavonoides totales, la muestra obtenida en medio acuoso presentó los valores mas elevados con respecto a los demás medios extractores, con medias de

1.22 mg/ml para *P. calyculatus* y 2.03 mg/ml para *P. tomentosum* de acuerdo al ANNOVA realizado ($p \leq 0.05\%$).

Las figuras 1 y 2 muestran los espectros infra rojos para los extractos acuosos de *Phoradendrum tomentosum* y *Psitacanthus calyculatus* respectivamente, de donde es posible apreciar bandas correspondientes a los grupos hidroxilo de los compuestos fenólicos en el rango de los 3300-3140 cm^{-1} , bandas correspondientes a los grupos carbonilo de las flavonas, e isoflavonas en el rango de los 1660-1650, se observa además la presencia de señales correspondientes a las sales de antocianidinas, en los rangos entre 3200-3100, 1720-1700 y bandas anchas a los 1020-1080 cm^{-1} , así como la posible existencia de grupos alquilo, carbonilo y aromáticos por la presencia de banas en las zonas de 3375, 3000-2980, 1656, 1610, 1600, 1569 y 1519 cm^{-1} .; lo cual con cuerda con lo presentado por Márquez, 1999 (6).

Conclusiones

La Obtención de compuestos fitoquímicos de interés a partir de *Psitacanthus calyculatus* y *Phoradendrum tormentosun* se puede llevar a cabo de manera efectiva mediante extracción en medio acuoso, presentando concentraciones de 0.52 mg/ml y 0.53 mg/ml para cada una de las plantas respectivamente, en cuanto al contenido de fenoles totales y de 1.22mg/ml y 2.03mg/ml, para cada una de las plantas, respectivamente, en cuanto al contenido de flavonoides totales.

El espectro infra rojo confirmó la presencia de grupos funcionales correspondientes a flavonoides y compuestos fenólicos presentes en los extractos acuosos de ambas plantas.

Los antioxidantes presentes en los extractos acuosos pueden ser los responsables del efecto hipoglucemiante en personas con diabetes tipo II que ingieren infusiones a base de estas plantas.

Referencias

1. Andrade-Cetto Adolfo & Heinrch Michael. Mexican plants with hypoglycaemic efecto used in the treatment of diabetes. Journal of Ethnopharmacology. 2005 325-348.
2. Alarcón Aguilar Franciaco (1990). Investigación del efecto hipoglucémico de plantas usadas por la población mexicana para el control de la diabetes mellitus. UAM, Iztapalapa, México, DF.
3. Naga Vamsi Krishna, B.V. Raman, B. Narasimha Rao, M. Pardha Saradhi, M. V. Baseveswara Rao. Plants with antidiabetic activities and their medicinal values. International research jornal of pharmacy. 2012 3 (3). 11-12.
4. Nordberg, J., Arner, E. Reactive oxygen species, antioxidants, and the mammalian thioredoxin system. Free Radical Bology & Medicine, 201; 31:1287-1312.
5. Ming-Yen Juan, Chen-Chun Chou. Enhancement of antioxidant activity, total phenolic and flavonoide content of black soybeans by solid state fermentation with

bacillus subtilis ELSEVIER Food Microbiology. 2010, 587.

6. Marquez Hernández I., Cuellar Cuellar Armando, Martínez Pérez Jorge, Alemán

Sánchez Alejandro, Lora García Janette y Vélez Castro Hermán. Estudio fitoquímico de la especie Hibiscus elatus S.W. SCIELO Revista Cubana de Farmacia. 1999

Figuras

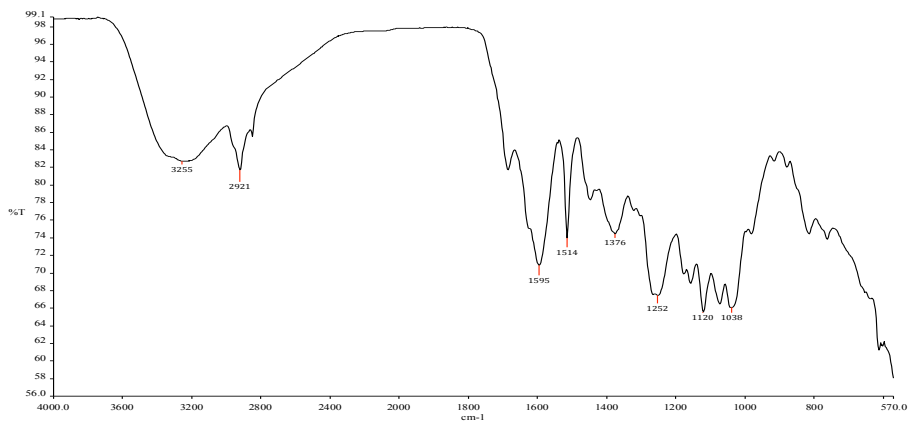


Figura 1. Espectro infrarojo del extracto acuoso de *Phoradendrum tomentosum*

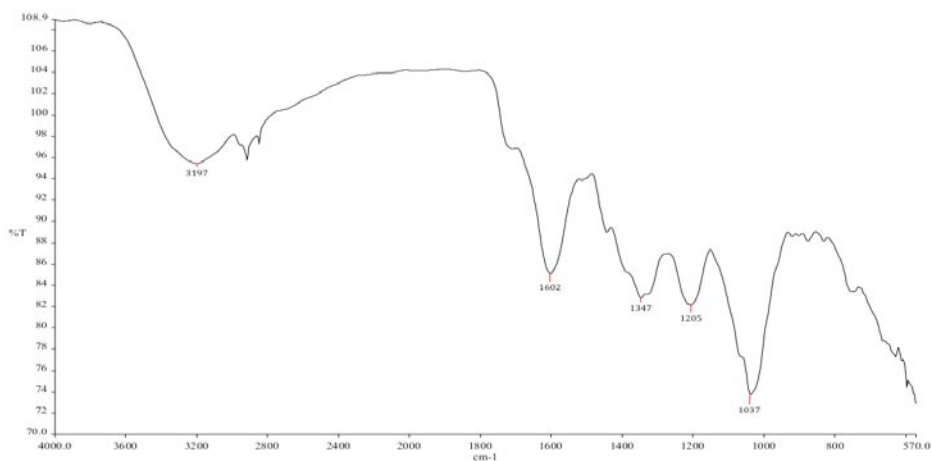


Figura 2. Espectro infrarojo del extracto acuoso de *Psittacnathus calyculatus*

BIOSÍNTESIS DE LA ENZIMA TANASA EN FERMENTACIÓN EN MEDIO SÓLIDO EMPLEANDO BIORREACTOR DE COLUMNA

Mario Cruz Hernández¹, Lorena Hernández Hernández¹, Ruth Belmares Cerda², Susana González Morales¹, Armando Robledo Olivo¹

myke13_80@hotmail.com

¹Universidad Autónoma Agraria Antonio Narro

²Universidad Autónoma de Coahuila

Introducción

Dentro de los compuestos polifenólicos se encuentran los taninos; compuestos que tienen la capacidad de aglomerar y precipitar soluciones de proteínas, lo que puede ocasionar la turbidez del té instantáneo o de los jugos de frutas, además de generar un sabor astringente o amargo. Características indeseables desde el punto de vista nutricional y de procesamiento de alimentos. Estos efectos de los taninos han encabezado diversos proyectos de investigación para la obtención de la enzima tanasa, que favorezca la degradación de este compuesto. La tanasa o tanin-acil-hidrolasa (TAH) es la enzima (E.C. 3.1.1.20) que cataliza la hidrólisis de los enlaces éster presentes en taninos hidrolizables, taninos complejos y ésteres del ácido gálico (Aguilar, y col., 2007). Los hongos de los géneros *Aspergillus* y *Penicillium* así como bacterias de los géneros *Bacillus* y *Lactobacillus* son los microorganismos que han sido ampliamente utilizados para la producción de la enzima tanasa.

Debido al alto interés industrial por la tanasa, en sectores como los alimentos, bebidas, farmacéutica y química (Lekha y Lonsane, 1997; Belmares y col., 2004), actualmente existe una constante búsqueda de microorganismos capaces de degradar altas concentraciones de taninos y en mayores títulos de producción de la enzima. Así como procesos que incrementen los niveles de obtención, con una mejor

comprensión de los aspectos de ingeniería bioquímica, especialmente en el modelado y diseño de biorreactores (fermentadores). Es por ello, que en el presente trabajo se realizó un estudio de la biosíntesis de la enzima tanasa en fermentación en estado sólido empleando un biorreactor de columna y residuos de orégano como soporte-sustrato.

Métodos

Sistema de producción enzimático

Para la producción de enzima se emplearon 15 g de residuos de orégano como soporte-sustrato, humedecido con 10 mL de medio Czapek-dox (g/L: NaNO₃ 7.65; KH₂PO₄ 3.04; MgSO₄ 1.52; KCl 1.52). El orégano fue pre-tratado (Mussatto y col., 2009) para ser empleado como soporte. El material húmedo, fue inoculado con 1×10^7 esporas de *Aspergillus tubingensis* 1234 (código de acceso KF435033.1) por gramo de soporte seco (gss) e incubado a 30 °C en columnas de vidrio (4 cm dia x 20 cm de altura) con una aireación de 0.3 Lpm. La evaluación cinética se realizó cada 24 h, hasta un tiempo de 120 h. Del fermentado en sólido, se tomaron muestras para la determinación de biomasa (Robledo y col., 2008) empleando glucosamina. Posteriormente se realizó una extracción de la tanasa del material vegetal fermentado, según el método reportado por Maciel y col., (2010). Al extracto crudo, se le determino actividad tanasa (Sharma 2000) y fenoles hidrolizables totales (Robledo y col., 2008). La unidad de actividad se definió

como la cantidad de enzima necesaria para liberar 1 μ mol de ácido gálico por min. Se aplicaron diferentes modelos matemáticos para determinar los diferentes parámetros cinéticos (Robledo y col., 2014) relacionados a la fermentación en estado sólido en biorreactor de columna.

Análisis estadístico

Para las determinaciones de biomasa, tanasa y fenoles hidrolizables totales, se llevaron a cabo los experimentos por triplicado, los resultados mostrados en las cinéticas presentan los promedios obtenidos de dichos experimentos. Las pruebas de medias se realizaron con Minitab 16 y se empleó el análisis de Tuckey con un alfa = 0.05 cuando fue necesario. A fin de lograr el mejor ajuste de los datos experimentales, el modelo de ajuste y estimación de parámetros se realizó mediante la minimización del error de suma de cuadrados entre los valores experimentales y pronosticados por el modelo, utilizando el método no lineal de mínimos cuadrados proporcionado por el software Polymath® 6.0.204.

Resultados

Para la evaluación cinética de la producción de enzima tanasa se determinó biomasa, producto y sustrato ajustando los datos experimentales a las ecuaciones logística, de Luedeking y Piret y de Pirt, respectivamente y de esta forma se obtuvieron los parámetros cinéticos (Tabla 1).

La Figura 1 muestra el comportamiento de biomasa (mg/gss) monitoreada durante las 120 h; que a las 24 horas de fermentación presento crecimiento micelial, a las 48 horas alcanzo un nivel de biomasa de 855 mg/gss adaptándose más al modelo matemático haciéndose notorio las fases crecimiento y estacionaria. La Figura 2 muestra la producción de tanasa obtenida a partir de las 24 horas, teniendo como máximo 36 U/gss a las 24 horas, a las 72 horas disminuyo la generación de producto, esto se debe a la formación de biomasa y utilización de la glucosa liberada y posteriormente el incremento del producto. En relación al ajuste de la ecuación logística se obtuvo una coeficiente de producto (k) positivo, indicando que la producción de la enzima tanasa está relacionada a la producción de biomasa.

El consumo de fenoles hidrolizables se muestra en la Figura 3. Se muestra que a partir de las 24 horas inicia un consumo de fenoles hidrolizables del 91 % que va decreciendo hasta las 120 horas alcanzando un consumo de 24 %, considerando que el consumo de fenoles hidrolizables está relacionado con la formación de producto y generación de biomasa.

Conclusiones

Se estableció el protocolo de la FMS con orégano, utilizando éste residuo como fuente de carbono y energía, además de carbohidratos y proteínas que se encuentran en el soporte vegetal. La cepa de *A. tubingensis* 1234, logró sintetizar la enzima tanasa bajo

las condiciones de operación establecidas. Es recomendable optimizar las condiciones de producción de la enzima tanasa en FMS utilizando el soporte vegetal (orégano), y de esa manera obtener mejores resultados de actividad enzimática.

Referencias

- Aguilar, CN, Rodríguez R, Gutiérrez-Sánchez G, Augur C, Favela-Torres E, Prado-Barragán LA, Ramírez- Coronel A, Contreras-Esquivel JC. *Appl Microbiol Biotechnol*. Vol. 76, No. 1, pp. 47–59. (2007).
- Belmares R, Contreras-Esquivel JC, Rodríguez-Herrera R, Ramírez- Coronel A, Aguilar CN. *Lebensm. Wiss. U.- Technol*. 37:857–864. (2004).
- Lekha, P., and Lonsane, B. *Adv Appl Microbiol* 44:215-260 (1997)
- Mussatto S.I., Aguilar C.N., Rodrigues L.R. Teixeira J.A. *Carbohydrate research* 344(6): 795-800. (2009).
- Robledo A., Aguilera-Carbó A., Rodriguez R., Martinez J.L., Garza Y. Aguilar C.N. *Journal of industrial microbiology & biotechnology*. 35(6): 507-513. (2008).
- Maciel G., Souza Vandenbergh L., Fendrich R., Bianca B., Haminiuk C. Soccol C. *Biotechnology and Bioprocess Engineering* 14(6): 748-755. (2009).
- Sharma S., Bhat T.K. Dawra R.K. *Anal Biochem* 279(1): 85-89. (2000).
- Robledo A., Aguilar C.N., Belmares-Cerda R.E., Contreras-Esquivel J.C., Cruz-Hernández M.A. Montañéz-Sáenz J.C. *International Journal* 1(6): 16-23. (2014).

Tablas y figuras

Tabla 1 Parámetros cinéticos asociados a la producción de tanasa por la cepa *A. tubingensis* 1234 en fermentación en estado sólido.

Parámetro	Valor calculado
μ	0.15 (mg/gds)
X_{\max}	751.01 (mg/gss)
$Y_{P/X}$	0.0675 (U/mg X)
k	0.0001

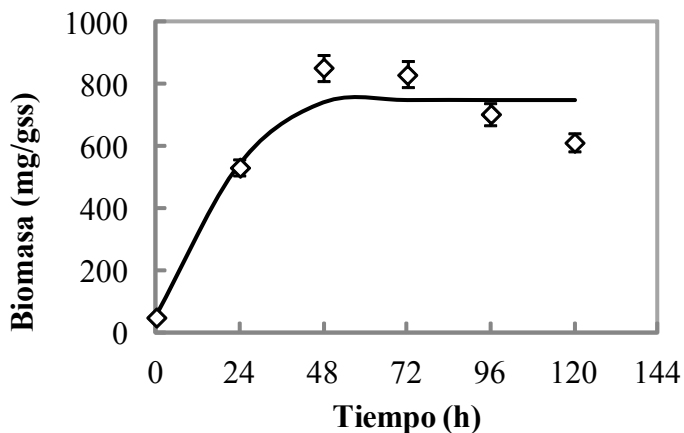


Figura 1 Cinética de crecimiento de *A. tubingensis* 1234 en FES con soporte de orégano, (\diamond) experimental, (—) valores estimados con la ecuación logística.

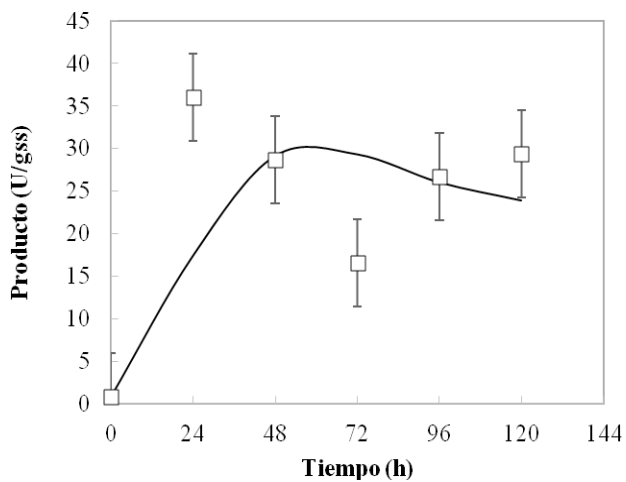


Figura 2 Cinética de producto de *A. tubingensis* 1234 en FES con soporte de orégano, (□) experimental, (—) valores estimados con la ecuación logística

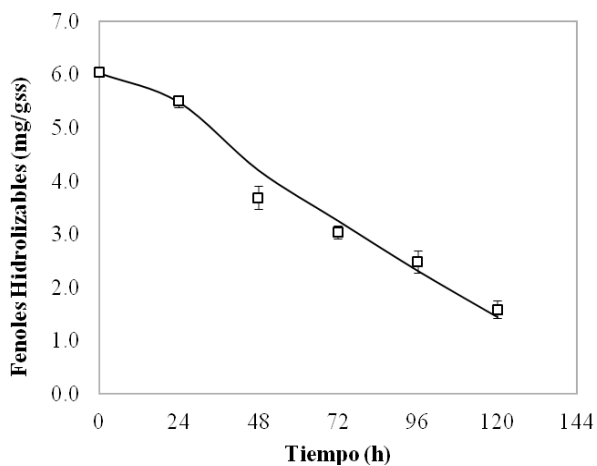


Figura 3 Consumo de fenoles hidrolizables por *A. tubingensis* 1234 en FES con soporte de orégano, (□) experimental, (—) valores estimados con la ecuación logística

EQUILIBRIO LÍQUIDO-VAPOR DE MEZCLAS DE METANOL-ETANOL Y ETANOL-AGUA EN PRESENCIA DE CLORURO DE SODIO

José Miguel Huerta Carmona

Universidad Autónoma de Tlaxcala

maik_99@hotmail.com

Introducción

La separación de una mezcla en la industria química es comúnmente realizada con el proceso de destilación, el principio básico de éste es aprovechar la diferencia de los puntos de ebullición de los componentes de la mezcla, y así mediante un equilibrio de fases (p.e. equilibrio líquido-vapor) lograr su separación.

La naturaleza de las mezclas, tiende a explicar algunas complicaciones con las que se enfrenta un ingeniero en el diseño del proceso de destilación, de allí podemos clasificarlas en mezclas ideales, mezclas no ideales y mezclas azeotrópicas^[1].

Las mezclas entre solventes (alcoholes, agua, etc.) generalmente, se caracterizan por ser

mezclas altamente no ideales o azeotrópicas. La destilación extractiva salina es un proceso alternativo que facilita la separación y reduce el consumo de energía^[2], se caracteriza por añadir un agente salino, el cual es afín con alguno de los componentes de la mezcla, y así lograr una separación con purezas elevadas para sus componentes.

La destilación extractiva salina se basa en investigaciones sobre el comportamiento de una sal en mezclas de solventes^{[3],[4]}, de las cuales se dice que un agente salino puede afectar la actividad de los componentes a través de la formación de complejos y asociados, este tipo de efectos se les llama *salting out* si el agente permanece en una fase acuosa y *salting in* si el

agente permanece en una fase orgánica de la solución. Estos efectos describen interacciones selectivas a uno de los solventes de la mezcla y esto causa que la volatilidad relativa de los componentes cambie drásticamente y facilite la separación de mezclas de solventes con puntos de ebullición cercanos (curvas de equilibrio cerradas) o incluso la ruptura de azeótropos.

Las investigaciones experimentales de este proceso se han realizado en un destilador Othmer^[5], que ha evolucionado con modificaciones realizadas para su eficacia y practicidad en la toma de datos de equilibrio, es el más utilizado gracias a la facilidad de funcionamiento y diseño, además que proporciona datos de equilibrio líquido-vapor (EVL) en tiempos relativamente cortos^[6]. Las primeras modificaciones para trabajar con soluciones salinas fueron realizadas por Johnson y Furter^[7].

Coello^[8] desarrollo un estudio experimental para identificar el efecto de haluros de sodio en el EVL sobre la mezcla etanol-agua, desarrollando su investigación en un destilador Othmer modificado, el cual se caracterizaba por un monitoreo de la temperatura y una toma de muestra del vapor, obteniendo la ruptura del azeótropo de la mezcla etanol-agua a una concentración 5% en peso de cloruro de sodio.

Se ha analizado que en diversas investigaciones la toma de muestras común para un destilador Othmer es en la parte del vapor y de allí mediante modelos termodinámicos se calcula

el valor de la fase líquida, por lo que en este trabajo se realizará un ajuste al destilador utilizado por Coello, añadiendo una toma de muestra líquida para identificar el efecto que tiene el cloruro de sodio en la separación de las mezclas metanol-etanol y etanol-agua.

Modificación del destilador

Un destilador Othmer debe de contar con una cámara de ebullición, una de condensación y con puertos para la toma de muestras, tanto en los fondos como en el destilado (líquido y vapor respectivamente).

Se desarrollarán modificaciones a un destilador Othmer basándose en las realizadas por Johnson y Furter^[7], quienes para trabajar con soluciones salinas decidieron quitar el puerto de drene de la fase líquida, ya que existía acumulación de sal y obstrucción a la salida. Para este trabajo se pretende colocar un agitador magnético, que homogenizara la solución en caso de una re-cristalización en la sal y se colocará una salida de líquido en la parte posterior baja, ésta será controlada con una llave inmediata, que al alcanzar el EVL facilitara la toma de muestras de la fase líquida.

Así mismo, ellos mencionan que para evitar el reflujo en la parte alta de la cámara de ebullición es necesario tener una temperatura 2-3 °C mayor que el punto de ebullición de la solución, por lo tanto se colocará una chaqueta alargada en la salida inmediata del vapor junto con una resistencia eléctrica para su calentamiento.

Para la cámara de condensación, se transportará el vapor a dos condensadores el primero de ellos cuenta con una llave de tres orificios que por su diseño facilita la recirculación del vapor condensado hasta alcanzar el equilibrio y una vez alcanzado ésta cambia su posición para el paso a la toma de muestras de la fase vapor.

Se monitoreará la temperatura del líquido y del vapor, ya que dependiendo de la estabilización de la misma considerará el equilibrio de fases del sistema. El calentamiento del sistema se hará mediante una parrilla eléctrica y la resistencia eléctrica añadida en la parte superior. El equipo descrito y las modificaciones mencionadas se pueden observar en la Figura 1.

Perspectivas del trabajo

Con las modificaciones realizadas al destilador Othmer y la medición de muestras en la fase líquida, es la manera en que se pretende corroborar el trabajo de Coello y con ello continuar con investigaciones acerca del efecto que tienen los electrolitos sobre las mezclas de solventes en el EVL, en el mismo contexto, se pretende dar pie a nuevas investigaciones con mezclas complejas de tres componentes contando con un instrumento de medición eficaz y amigable con su funcionamiento experimental.

Agradecimientos

Agradezco al Dr. Fernando Pérez Villaseñor por su asesoramiento y apoyo en el proyecto, y al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología por financiar el proyecto así como fomentar la investigación en el país.

Referencias

1. E. J. Henley, J. D. Seader, *Operaciones de Separación por Etapas de Equilibrio en Ingeniería Química*, Ed. (Reverté, México, D.F., 2000), cap. 3.3-3.8.
2. Pinto R.T.P., et al., *Elsevier Comp. Chem. Eng.* 24, 1689-1694 (2000).
3. Jaques D., Furter, W. F., *Ind. Eng. Chem.* 13, 238-241 (1974).
4. Dhanalakshmi J., et al., *J. Chem. Eng. Data*, 58, 560-569 (2013).
5. Othmer D. F., *Ing. Eng. Chem.* 20, 763 (1948).
6. Morrison J. F., et al., *J. Chem. Eng. Data*, 35, 395-404 (1990).
7. Johnson A. I., Furter W. F., *Can. J. Technol.* 34, 413 (1957).
8. Coello T.R.T., “Efecto de haluros de Na en el equilibrio líquido vapor del sistema [etanol+agua]” M.C. Tesis, Universidad Autónoma de Tlaxcala (2014).

Figuras

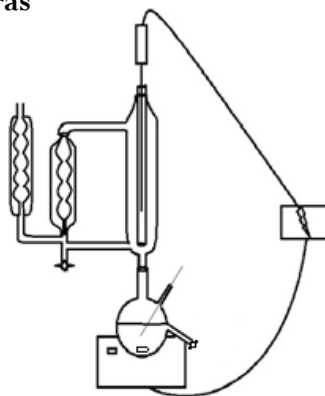


Figura 1. Destilador Othmer modificado.

CONDUCTIVIDAD EFECTIVA DE UN MATERIAL 1-3

Eduardo López López

Facultad de Ciencias Básicas, Ingeniería y Tecnología

Universidad Autónoma de Tlaxcala

elopez@ingenieria.uatx.mx edlopezmx@yahoo.com.mx

Introducción

Dentro de la amplia gama de materiales compuestos se encuentran los reforzados de fibras (también llamados materiales 1-3); que son de especial interés debido a que, en general, su característica fundamental es la de disminuir el peso del compuesto o reforzar un material blando. Una de las propiedades que son de interés científico es la conductividad térmica de dichos materiales. Su determinación es de vital importancia en un sinnúmero de aplicaciones; que van desde la electrónica (compuestos usados como aislantes, intercambiadores de calor, disipadores) hasta geofísica (determinación del gradiente geotérmico de temperatura); resonadores de microondas, capacitores.

Diferentes técnicas y numerosos estudios se han desarrollado para predecir el comportamiento de dichos materiales. Willis (1983) las clasificó estos métodos en cuatro categorías: asintóticos, autoconsistentes, variacionales y simulaciones. Entre estas técnicas, la teoría de medio efectivo está considerada como la más poderosa aproximación para estimar las propiedades efectivas de los compuestos (Milton, 2002).

La aproximación más simple toma la media geométrica y la armónica, de las propiedades de los constituyentes, para proporcionar cotas superiores e inferiores. Esta aproximación no asume nada sobre la forma o tamaño de las inclusiones. Evidentemente, esta aproximación

no es suficiente. Cotas más rigurosas fueron obtenidas por Hashin y Shtrikman (1962) usando principios variacionales. No obstante que la derivación original fue hecha para susceptibilidad magnética, estas cotas pueden ser aplicadas a problemas de permitividad, conductividad y problemas elásticos. Otras técnicas, como las reglas de mezclado, son clásicas la determinación de las propiedades efectivas de compuestos (Maxwell-Garnett, 1904; Bruggeman, 1935; Looyenga, 1965, etc.). Estas técnicas han probado su valía en materiales con constituyentes isótropas; sin embargo, no son suficientes para predecir propiedades efectivas cuando las fases son anisótropas. En este trabajo se propone una aplicación del Método de Homogeneización Asintótica para determinar la conductividad efectiva de un compuesto reforzado de fibras circulares, distribuidas en un arreglo periódico cuadrado con eje de simetría material ortogonal al eje de las fibras

Métodos

El Método de Homogeneización Asintótica consiste en encontrar ecuaciones “apropiadas” (homogeneizadas), las cuales describen los procesos físicos que ocurren en un material heterogéneo, cuando la escala de las heterogeneidades tiende a cero. Es decir, se “toma” la ecuación diferencial que contiene coeficientes que cambian rápida y periódicamente y se “devuelve” una ecuación diferencial homogénea, con coeficientes constantes. Dichos coeficientes, son conocidos

como los coeficientes efectivos del material compuesto. Estos coeficientes tienen una expresión analítica, resultado de la solución de problemas locales, lo que representa una gran ventaja con respecto a los métodos numéricos, pueden ser usadas como cotas o herramientas de comparación y verificación en casos límite.

Para estudiar el compuesto se supone que éste ocupa una región Ω del espacio (\mathbf{R}^3), tiene un volumen $|\Omega|$ y además es teselación de una celda unitaria, la cual está formada por dos conjuntos o fases S_1 y S_2 , de fracciones volumétricas V_1 y V_2 , respectivamente. Es decir, el compuesto está formado únicamente por dos elementos, los cuales se pueden distinguir uno del otro.

Sea $D(x)$ el flujo de calor y supongamos que está relacionado linealmente con el gradiente de temperatura $E(x)$ por medio del tensor de segundo rango de conductividad térmica $\kappa_{ij}(x)$ mediante la relación

$$D_i(x) = \kappa_{ij}(x) E_j(x),$$

donde se ha usado notación suma sobre índices repetidos, que toman valores en $\{1,2,3\}$. Las ecuaciones que gobiernan al fenómeno (Cioranescu and Donato, 1999) son:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left[\kappa_{ij}^{(y)}(y) \frac{\partial T^{(y)}(x,y)}{\partial x_j} \right] = 0 \text{ en } \Omega$$

donde Γ denota la interfase entre las constituyentes, $\partial\Omega$ la frontera del compuesto y el superíndice (y) está asociado con la interfase S_1 o S_2 . Debe notarse que los coeficientes $\kappa_{ij}^{(y)}$ tiene dependencia de las pequeñas variaciones del material, lo cual es expresado mediante la variable $y=x/\varepsilon$, con ε siendo un parámetro pequeño que relaciona las escalas en el compuesto. Por otro lado, el potencial $T(x,y)$ depende tanto de las pequeñas variaciones como de la escala global.

Siguiendo la metodología clásica de la teoría de perturbaciones clásica, se supone que la ecuación tiene una solución asintótica en términos de un parámetro pequeño, " ε ", de la forma:

$$\kappa_{ip} = \int_S \kappa_{ip} + \kappa_{ik} \frac{\partial_p \theta(y)}{\partial y_k} dy,$$

De esta forma es posible obtener fórmulas para los coeficientes efectivos del material, mediante una promediación sobre la celda periódica S :

$$\frac{\partial}{\partial y_i} \left[\kappa_{ip}^{(y)} \frac{\partial_p \theta(y)}{\partial y_j} \right] = \frac{\partial \kappa_{ip}}{\partial y_j} \text{en} S,$$

donde las funciones θ_p es son la solución del problema local L

$$\partial_p \theta(y) = 0 \text{en} \Gamma,$$

$$\kappa_{ip}^{(y)} \frac{\partial_p \theta(y)}{\partial y_j} n_i = - \kappa_{ip} n_i \text{en} \Gamma.$$

Ademas θ_p debe ser una función doblemente periódica a fin de satisfacer la condición de doble periodicidad de las inclusiones

Perspectivas del trabajo

Se pretende caracterizar un material compuesto reforzado de fibras con constituyentes anisótropas que sea biomimético, relativo al hueso compacto, mediante la obtención de sus propiedades efectivas, utilizando un modelo diferencial con una formulación fuerte y métodos asintóticos basados en un desarrollo a doble escala. Los problemas asociados a la obtención de dichas propiedades son, en general, ecuaciones diferenciales parciales (EDP) con condiciones de frontera y de interfase. Se presume que las ecuaciones resultantes pueden resolverse analíticamente mediante la teoría del potencial complejo. La teoría resultante contribuirá expandiendo la frontera del conocimiento, ya que, a la fecha, se ha escrito muy poco con respecto a materiales con inclusiones anisótropas.

Agradecimientos

A PROMEP por financiamiento para realizar el proyecto *Determinación de propiedades efectivas de un material 1-3 con constituyentes anisótropas*; a la Universidad Autónoma de Tlaxcala; a Cuerpos Académicos, calidad y productividad para su internacionalización CACyPI-UATx-2014 y al Cuerpo Académico de Procesos Químicos y Medio Ambiente, por todo su apoyo brindado.

Referencias

- Bruggeman, D. A. G. Berechnung verschiedener physikalischer konstanten von heterogenen substanzen, *Ann. Physik* 24, 636-679, (1935).
- Cioranescu, D. and Donato, P. *An Introduction to Homogenization*. Oxford University Press, 1999.
- Hashin, Z. and Shtrikman, S. A variational approach to the theory of the effective magnetic permeability of multiphase material, *J. Appl. Phys.* 33, 3125-3131, (1962).
- Looyenga, H. Dielectric constants of heterogeneous mixtures, *Physica* 31, 401-406, 1965.
- Maxwell-Garnett, J.C. Colours in metal glasses and in metallic films, *Philos. Trans. R. Soc. Lond. A*, 203, 385-420, 1904.
- Milton, G.W. *The Theory of Composites*, Cambridge University Press, 2002.
- Willis, J.R. The overall elastic response of composite materials, *Trans. ASME, J. Appl. Mech.* 50 1202-1209 (1983).

ANÁLISIS DE UN MODELO CINÉTICO CATALÍTICO HETEROGÉNEO EN ESTADO DINÁMICO PARA EL PROCESO DE REFORMACIÓN CATALÍTICA DE NAFTA (C₇)

Elvira López Sánchez¹, Arturo Ortiz Arroyo¹,
César Abelardo González Ramírez²

elvira.lopezs@gmail.com

¹Universidad Autónoma de Tlaxcala

²Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo

Introducción

El proceso de reformación catalítica de naftas está fundamentado típicamente en factores como, el número de especies reactivas y el tipo de modelo cinético que lo describe. La cinética de la reacción, en la mayoría de los casos, puede ser de mayor complejidad para su modelamiento. Debido a lo anterior y, para mitigar esta complicación, los reactivos en la mezcla son clasificados en grupos limitados llamados “Lumps”, éstos se clasifican en un conjunto más pequeño de grupos cinéticos, que se definen por sus propiedades físicas, como los intervalos del punto de ebullición, o por sus características químicas.

En este trabajo se estudia la **cinética de reformación catalítica de hidrocarburos de cadenas de 7 carbonos (C₇) en un reactor tubular**. Dicha cinética fue propuesta por Van Trimont en 1988 [1] y en este modelo cinético se define un *Lump* de 7 reacciones. **Las reacciones de reformación se describen mediante ecuaciones de cinética heterogénea de velocidad de reacción tipo Hougen-Watson, las cuales corresponden a una reacción en la superficie de un solo sitio en la función ácida como el paso determinante**. El modelo cinético del presente trabajo incluye el análisis de las velocidades de reacción y, pos-

teriormente, se propone un modelo dinámico para un reactor tubular [2], en el cual se desarrollan los balances de materia y energía acoplados a las velocidades de reacción provenientes del modelo cinético. El modelo matemático es resuelto mediante el método numérico de líneas.

Metodología

Se llevó a cabo en tres fases: inicialmente se estudió un modelo cinético (ver Figura 1) para el proceso de Reformación Catalítica de naftas, el cual consta de un agrupamiento (*Lump*) para los hidrocarburos de C_7 , en esta parte se revisaron las velocidades de reacción correspondientes al mecanismo propuesto [1]; posteriormente se estudió un modelo dinámico del reactor donde se obtuvieron balances de materia [3] y finalmente se lleva a cabo la discretización numérica de las ecuaciones obtenidas para su solución mediante el método de líneas, se aplica la aproximación por diferencias finitas hacia atrás y la longitud de cada reactor se dividió en segmentos separados, para finalmente aplicar el método de Runge- Kutta de cuarto orden para resolver, simultáneamente, el conjunto de ecuaciones a lo largo del reactor y a través del tiempo. Este procedimiento se repite para todos los puntos del reactor, de manera que los resultados de cada punto se utilizan como las condiciones de entrada para la siguiente iteración.

Resultados

El modelo que se obtuvo del análisis se compo-

ne de un conjunto de ecuaciones diferenciales parciales (EDP) derivadas de los balances de materia (ver Tabla 1), así como ecuaciones algebraicas no lineales que provienen del modelo cinético y correlaciones auxiliares.

En las Figuras 3-6 se muestran los perfiles de concentración obtenidos en las simulaciones a diferentes pasos de tiempo, solo se muestran los perfiles de los compuestos de mayor relevancia: n-heptano (Parafinas), metilciclohexano (naftenos), tolueno (aromáticos) e hidrógeno. Para las Figura 3 y 4 que corresponde al grupo de las parafinas y naftenos respectivamente la concentración de éstas disminuye a lo largo de los reactores debido a la formación de compuestos aromáticos (Figura 5), los perfiles de concentración del metilciclohexano el cual pertenece al grupo de los naftenos, éstos generalmente reaccionan con relativa facilidad y son muy selectivos hacia la formación de compuestos aromáticos a través de deshidrogenación, por lo que los convierte en una de las familias de reactantes más deseables en la reformación. Por otra parte en el proceso de reformación catalítica es de importancia la producción de hidrógeno ya que este es utilizado para otros procesos y a su vez como alimentación de éste mismo, en la Figura 6 se observa la formación de H_2 .

Conclusiones

En este trabajo se estudió un modelo cinético riguroso de reformación catalítica de naftas

del proceso semiregenerativo empleando un modelo dinámico para su resolución. En el modelo se analizaron las particularidades cinéticas y se obtuvieron las velocidades de reacción, posteriormente se desarrollan los balances de materia para cada compuesto. El esquema cinético se toma en cuenta siete reacciones basadas en el método de formación de grupos para una mejor gestión del proceso, ya que la química de las reacciones de reformado es bastante compleja desde el punto de vista de investigación.

Se obtuvieron perfiles de concentración de cada uno de los compuestos los cuales proporcionan información sobre el grado de conversión de cada uno de los reactores

Tablas

Tabla 1. Conjunto de ecuaciones diferenciales parciales del modelo del reactor catalítico de reformación de naftas.

$-F_T \frac{\partial y_1}{\partial w_{cat}} + (-r_1 - r_5) = \frac{\varepsilon p_T}{\rho_{cat} RT} \frac{\partial y_1}{dt}$	$-F_T \frac{\partial y_5}{\partial w_{cat}} + (2r_3 + 2r_4 - r_6) = \frac{\varepsilon p_T}{\rho_{cat} RT} \frac{\partial y_5}{dt}$
$-F_T \frac{\partial y_2}{\partial w_{cat}} + (r_1 - r_2 - \frac{12}{7} r_3) = \frac{\varepsilon p_T}{\rho_{cat} RT} \frac{\partial y_2}{dt}$	$-F_T \frac{\partial y_6}{\partial w_{cat}} + (\frac{7}{5} r_5) = \frac{\varepsilon p_T}{\rho_{cat} RT} \frac{\partial y_6}{dt}$
$-F_T \frac{\partial y_3}{\partial w_{cat}} + (r_2 - \frac{12}{7} r_4) = \frac{\varepsilon p_T}{\rho_{cat} RT} \frac{\partial y_3}{dt}$	$-F_T \frac{\partial y_7}{\partial w_{cat}} + (\frac{5}{7} r_6 - r_7) = \frac{\varepsilon p_T}{\rho_{cat} RT} \frac{\partial y_7}{dt}$
$-F_T \frac{\partial y_4}{\partial w_{cat}} + (-r_3 - r_4 + r_5 + 2.5r_7) = \frac{\varepsilon p_T}{\rho_{cat} RT} \frac{\partial y_4}{dt}$	$-F_T \frac{\partial y_8}{\partial w_{cat}} + (r_7) = \frac{\varepsilon p_T}{\rho_{cat} RT} \frac{\partial y_8}{dt}$

Agradecimientos

Al Fondo de Hidrocarburos, proyecto No. 166571 financiado por el Fondo Sectorial SENER-CONACYT-HIDROCARBUROS

Referencias

1. Van Trimpont, P., Marin, G., & Froment, G. "Reforming of C7 Hydrocarbons on a Sulfided Commercial Pt/AL2O3 Catalyst". *Industrial Engineering Chemical Res.*, Vol.27, p.51-57,2005.
2. Arani, H., Shokri, S., & Shirvani, M. "Dynamic Model and Simulation of Catalytic Naphtha Reforming", *International Journal of Chemical Engineering and Applications*, Vol. 1, p. 159-164, 2010.
3. Antos, G., & Aitani, A. "Catalytic Naphtha Reforming". *Taylor & Francis*, 2005

Figuras

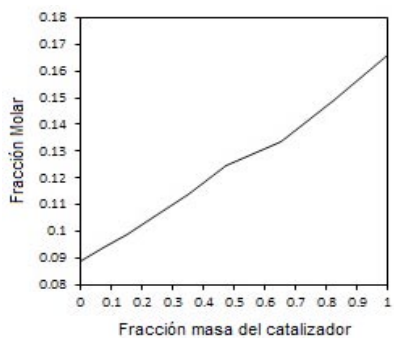


Figura 1. Esquema cinético de reacción.

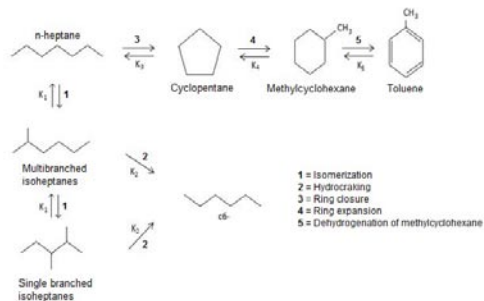


Figura 2. Perfil de concentración del n-heptano en estado estacionario

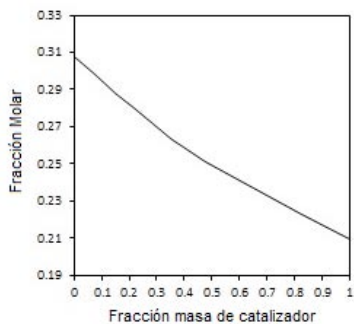


Figura 3. Perfil de concentración del metilciclohexano en estado estacionario.

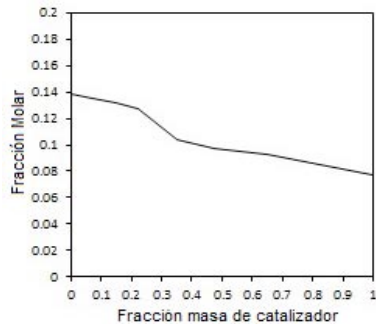


Figura 4. Perfil de concentración del tolueno en estado estacionario

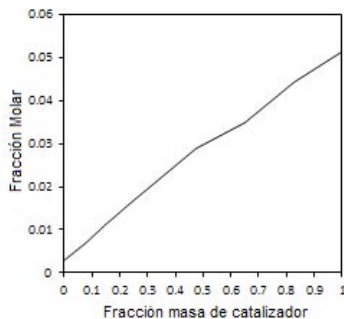


Figura 5. Perfil de concentración del hidrógeno en estado estacionario

BIOSÍNTESIS DE NANOPARTÍCULAS DE ORO USANDO PROTEÍNAS DE RESERVA PRESENTES EN SEMILLA DE *Jatropha curcas*

Silvia Rodríguez-Sánchez¹, Valentín López Gayou², Francisco Castelán³,
Alba Mónica Montiel González³, Abdú Orduña⁴

¹Universidad Autónoma de Tlaxcala. Doctorado en Ciencias Biológicas, Centro Tlaxcala Biología de la Conducta, Tlaxcala, México.

E-mail: srodriguez_ross@hotmail.com

²CIBA-IPN, Tepetitla Tlaxcala, México.

³Universidad Autónoma de Tlaxcala. Tlaxcala, México

⁴CIBA-IPN, Tepetitla Tlaxcala, México.

Introducción

La síntesis biológica ha surgido como una opción para obtener materiales a escala nanométrica, se ha reportado que el uso de extractos de plantas como agentes reductores, puede ser una vía más rápida para la preparación de nanopartículas. En estos procesos las sustancias que actúan como estabilizadores, controlan tanto la velocidad de reducción de los iones metálicos como el proceso de agregación de los átomos metálicos al neutralizar las fuerzas electrostáticas. Las proteínas de reserva de semillas sirven como almacén de aminoácidos y son metabolizadas durante la germinación para fungir como fuente de N, C y S para las etapas iniciales del desarrollo de la nueva

plántula y son las de mayor proporción [1]. En 1924 Osborne [2] clasifica a las proteínas de reserva presentes en semillas debido a su abundancia, importancia económica y alimentaria en cuatro grupos de acuerdo a su solubilidad en los diferentes agentes extractantes quedando de la siguiente manera: albúminas, globulinas, prolaminas y glutelinas.

En este trabajo el organismo por elección es *Jatropha curcas* debido no solo a la importancia económica por ser una fuente de biodiesel sino debido a que después de la extracción del aceite se obtiene un residuo sólido con un alto contenido proteico que es empleado para determinar el efecto que

tienen, en la biosíntesis de nanoestructuras de oro, a través de los extractos proteicos que componen la harina de semilla de esta planta.

Métodos

Se realizó un fraccionamiento proteico en base al criterio de solubilidad reportado por Montiel [3], las cuatro fracciones proteicas fueron probadas en la síntesis de nanopartículas de oro usando soluciones al 5% mezclando cada una de ellas con una solución acuosa de oro [1mM] a temperatura ambiente durante 24 horas a 35 rpm. Las AuNP's sintetizadas se caracterizaron por espectrofotometría UV-Visible y FTIR además de microscopía electrónica de transmisión (TEM).

Resultados

En primera instancia la obtención de las AuNP's es corroborada a simple vista mediante el cambio de coloración de la solución inicial conteniendo los iones Au^{+3} , a una coloración que va del rojo hasta el morado (ver Figuras 1 a y b). Estos cambios se deben a la excitación de vibraciones del plasmón superficial con las AuNP's [4]. Esta técnica no requiere un agente reductor adicional ya que la misma solución (proteica) reduce las especies metálicas. A partir de técnicas espectroscópicas, (Fig. 1c) se observó un cambio en las señales representativas correspondientes al plasmón de resonancia, atribuidas a la generación de AuNP's. Por

espectroscopia infrarroja se identifican los grupos funcionales presentes en la superficie de las nanoestructuras (Fig. 2). La forma y el tamaño de la AUNP de se determinaron utilizando TEM donde se observó partículas de forma cuasi esférica con un tamaño promedio de 60 nm (Fig. 3).

Conclusiones

La metodología desarrollada, permitió obtener las fracciones proteicas presentes en la semilla de *Jatropha curcas*, donde la fracción soluble en agua (albúmina) es responsable de la obtención de AuNP's cuasi-esféricas con tamaño promedio de 60 nm.

Agradecimientos

Los autores agradecen al Consejo de Ciencia y Tecnología (CONACYT) el apoyo para la realización de este proyecto a través de la beca de Doctorado.

Referencias

1. Fukushima D. *S Agricultural and Food Chemistry*. Food Review. 44, 6-29 (2001).
2. Osborne T.B. *The vegetable protein*. (Longmans Green and Co, New York 1924).
3. L. Montiel, "Obtención y caracterización de películas biodegradables elaboradas a partir de proteínas de semillas de *Jatropha curcas L.*" Tesis de grado CIBA-IPN. (2012).
4. Praveen, K., Willi, P., Sharma, Ch. *Process Biochemistry*. 46, 2007–2013 (2011).

Figuras

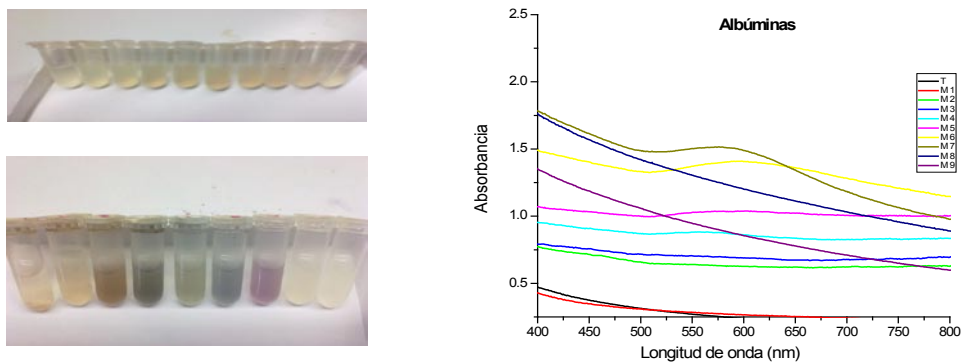


Figura 1. Biosíntesis de AuNP's a) Reacción inicial b) después de agitar durante 24 horas c) Espectros de absorción de AuNP's sintetizadas con Albúminas a temperatura ambiente.

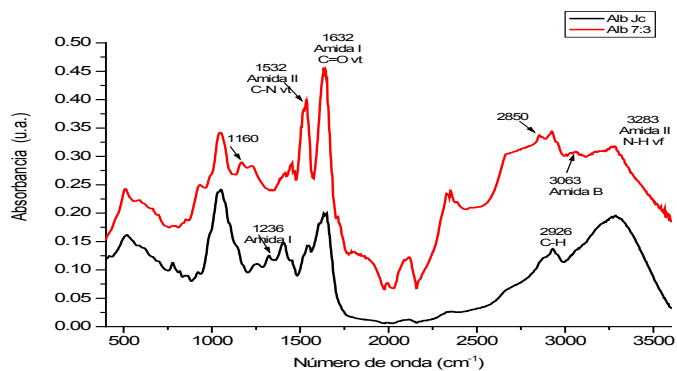


Figura 2. Espectro de IR de albúmina y AuNP's sintetizadas a temperatura ambiente

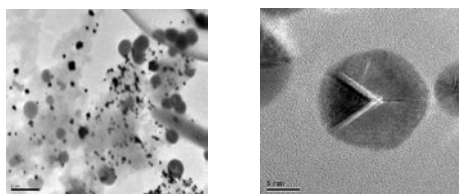


Figura 3. Micrografías de AuNP's sintetizadas a temperatura ambiente utilizando albúmina

SÍNTESIS DEL DERIVADO 2-(2-FLUOROFENILAMINO)-1,4-NAFTOQUINONA PARA SU POSIBLE UTILIZACIÓN COMO ANTIBACTERIANO. PRUEBAS BIOLÓGICAS

María Auxiliadora Macías López¹, Lluvia Itzel López López¹, Sonia Yesenia Silva Belmares¹, Dra. Mariana Salgado Bustamante²

¹Maestría en Ciencia y Tecnología Química. Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Coahuila

lluvialopez@uadec.edu.mx

²Facultad de Medicina, Universidad Autónoma de San Luis Potosí

Introducción

Las infecciones son la primera causa de muerte a nivel mundial, en México se encuentra en el sexto lugar. En 1998 la Organización Mundial de la Salud también reconoció que el 84% de determinados tipos de cáncer son causados por virus, bacterias y parásitos (1). Aunado a esto el uso indiscriminado de antibióticos y la automedicación ha generado cepas de bacterias que desarrollan resistencia a estos medicamentos teniendo la necesidad de generar nuevos fármacos para su combate.

Por otro lado la obtención de nuevos productos de origen natural es importante ya que además de la multiresistencia a los fármacos creada ya sea por el uso contralado o

indiscriminado de medicamentos de origen químico genera en si problemas subyacentes tales como las reacciones secundarias. Por esto se propone la síntesis química de un compuesto de origen natural derivado de las naftoquinonas para su uso potencial como antibacteriano.

El grupo de las quinonas son compuestos orgánicos de gran importancia en sistemas biológicos y en aplicaciones industriales (2). Dentro de este grupo se encuentran las naftoquinonas, que se han descrito por poseer buenas actividades biológicas como antibacterianos, anticancerígenos y antiparasitarios, se han encontrado en diferentes partes de los vegetales (espárragos, brócoli, entre otros)

como la raíz y el tallo de las plantas (ejemplo las Bignoniaceae). Químicamente son compuestos del tipo α,β insaturados, derivados del naftaleno una de sus características principales son sus dos grupos funcionales carbonilo en uno de sus anillos aromáticos (3). En el presente trabajo se describe la síntesis del derivados 2-(2-fluorofenilamino)-1,4-naftoquinona y las pruebas biológicas de determinación de la Concentración Mínima Inhibitoria (CMI) utilizando diferentes cepas bacterianas, determinación de la toxicidad por el modelo de *Artemia salina* y viabilidad celular sobre células monoclonales para describir su potencial uso como agente antibacteriano.

Métodos

Síntesis química

En un matraz fondo redondo se puso la 1,4-naftoquinona (5 mmol) en 50 mL de metanol, se añadió el $\text{CeCl}_3 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ (0.1 mmol), se agitó por 30 min después se agregó la 2-fluoroanilina (5 mmol). Se dejó en agitación con protección de la luz a una temperatura promedio de 25 °C. Terminado el tiempo de reacción, se filtró y se secó a presión reducida (5). El derivado se caracterizó por infrarrojo, se utilizó un espectrofotómetro FT-IR Perkin Elmer Spectrum GX, con dispositivo de ATR con punta de diamante, usando 20 barridos para la obtención del espectro a temperatura ambiente.

Pruebas biológicas

Se determinó la citotoxicidad del compuesto por el modelo de *Artemia salina*, para ello se

realizó la eclosión de huevecillos de *A. salina* en medio artificial marino. Una vez eclosionados los nauplios de *A. salina*, se procedió a colocar en cantidad de 10 individuos por pocillo en una placa multipozos, donde se le agregó agua y la cantidad del compuesto necesaria para tener la concentración a la cual se expusieron completando un volumen total de 200 μL . Después de 24 horas se contaron los organismos vivos y muertos en cada pozo, determinando la mortalidad y la concentración letal 50 (CL_{50}).

Para la actividad antibacteriana se utilizaron las cepas *Staphylococcus aureus*, *Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa* y *Salmonella choleraesuis* con tipificación por la ATCC (American Type Culture Collection). Se utilizó la técnica de microdilución en placa para determinar la Concentración mínima inhibitoria (CMI) (5,6).

Además se determinó la viabilidad celular en células monocucleares (CMN). Siguiendo el siguiente procedimiento: se extrajeron 20 mL de sangre completa heparinizada (0.5 U.I./10 mL de sangre). Se colocó la sangre en un tubo de 50 mL, se agregó PBS hasta un volumen de 40 mL, se dividió en 4 tubos de 15 mL (10 mL/tubo) a estos se les agregó 3.5 mL de Ficoll-Hypaque, colocando la punta de la pipeta hasta el fondo, se debe notar la capa de Ficoll al fondo y la sangre por encima. Se centrifugó a 2500 rpm por 20 min. Se separó la interface y se colectaron en tubos de 15 mL. Se agregó PBS hasta 15

mL, se centrifugó 1500 rpm por 10 min. Se desechó el sobrenadante y se resuspendieron las células en 10 mL de medio RPMI completo. Se realizó el conteo por la técnica de azul de tripano.

Una vez conocida la concentración de células se dividieron en concentraciones iguales de células en tantos pozos como sean necesarios para ser expuestas al compuesto. Se realizó un conteo de viabilidad celular mediante cámara de Neubauer a las 8 y 12 horas.

Resultados

El compuesto 2-(2-fluorofenilamino)-1,4-naftoquinona se sintetizó mediante una metodología a temperatura ambiente con un rendimiento del 92%. En el espectro de IR se pueden observar las bandas características del grupo N-H en 3178 cm^{-1} valor correspondiente a una amina secundaria, además de la aromaticidad (C=C, 1506), el enlace C=O en 1673 y el del C-F en 1154 cm^{-1} (figura 1).

En la determinación de la toxicidad por el modelo de *A. salina* se obtuvo una CL_{50} de 1796 ppm lo cual indica que entra en un rango de baja toxicidad. La bacteria *P. aeruginosa* fue la más susceptible mostrando una CMI de 0.10 ppm y un porcentaje de inhibición del 45%. La viabilidad en CMN después de 12 horas de incubación fue del 60% para la Concentración mayor (C1) que corresponde a una dilución 1:100 de la CI_{50} . Datos mostrados en la figura 2.

Conclusiones

Es posible la obtención del derivado en buenos rendimientos con el método de síntesis utilizado. El espectro de IR nos demostró que la síntesis fue efectiva.

En base a los resultados de las pruebas biológicas podemos decir que el derivado 2-(2-fluorofenilamino)-1,4-naftoquinona se perfila como un buen candidato para su utilización como antibacteriano.

Agradecimientos

A las Dras. Sonia Yesenia Silva y Mariana Salgado Bustamante por su tiempo y disponibilidad para la realización de las pruebas biológicas. Al CONACyT por la beca No. 353474, de estudios de Maestría. Al proyecto SEP-CONACyT CIENCIA BÁSICA No. 167668 CB-2011-01. Al departamento de Química Orgánica de la Facultad de Ciencias Químicas de la UAdeC.

Referencias

1. Kosmidis, C., Schindler, B. D., Jacinto, P. L., Patel, D., Bains, K., Seo, S. M., Kaatz, G. W. *Int. J. Antimicrob. Ag.* 40, 204-209 (2012).
2. López, L. I., Leyva, E., García, R. *Rev. Mex. Cienc. Farm.* 42, 6-17 (2010).
3. Cantú, R., Palomo, L., Nery, S., López, L. I., Barajas, L. *Biológicas.* 14, 49-57 (2012).
4. Osorio, R., Di Salvo, A. *Multiciencias.* 8, 11-17 (2008).

5. Tapia, R. A., Cantuarias, L., Cuéllar, M. Villena, J. J. *Braz. Chem. Soc.* 20, 999-1002 (2009).
6. J. A. García-Rodríguez, R. Cantón, J. E. García-Sánchez, M. L. Gómez-Lus, L.

Martínez-Martínez, C. Rodríguez-Avial, J. Vila. 11. *Métodos básicos para el estudio de la sensibilidad a los antimicrobianos.* En: J. J. Picazo, editor. *Procedimientos en Microbiología Clínica.* 1a ed., (2000). Disponible en: <http://www.seimc.org/>

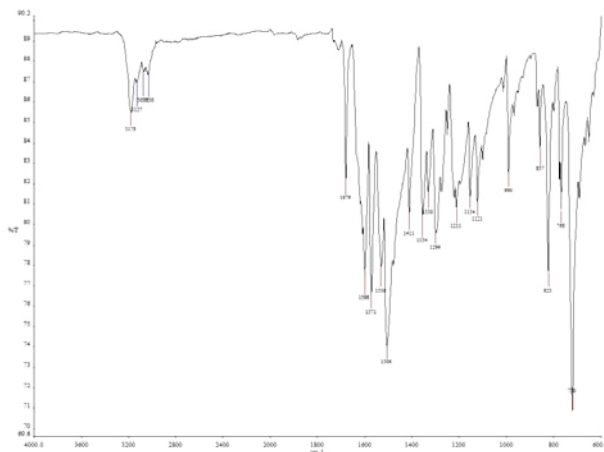


Figura 1. Espectro de IR del derivado 2-(2-fluorofenilamino)-1,4-naftoquinona.

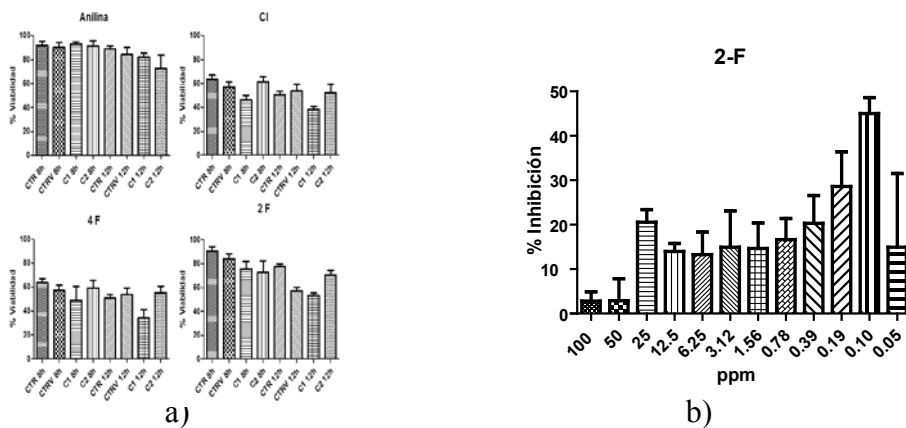


Figura 2. a) % Inhibición contra *Pseudomonas aeruginosa* y b) % de Viabilidad en CMN por el derivado 2-(2-fluorofenilamino)-1,4-naftoquinona.

EVALUACIÓN DE LA EXPRESIÓN GÉNICA DE *SALINIBACTER RUBER* BAJO CONDICIONES DE ESTRÉS SALINO

Ricardo Miranda Blancas, Sandra I. Ramírez Jiménez

Centro de Investigaciones Químicas, UAEM

mirandab@uaem.mx

Introducción

A partir de la propuesta de Carl Woese en 1977, los organismos vivos se agrupan en 3 dominios filogenéticos: Bacteria, Archaea y Eucarya¹. En estos tres dominios se han encontrado organismos extremófilos, los cuales pueden clasificarse en función de las características del medio en el que se desarrollan. De esta manera tenemos a los hipertermófilos, psicrófilos, acidófilos, alcalófilos, barófilos, xerófilos y los halófilos^{2,3}. Los halófilos son organismos adaptados para vivir en condiciones de alta salinidad, típicamente definida en función de la cantidad de cloruro de sodio (NaCl) de su medio. De acuerdo a la cantidad de NaCl que requieren para su desarrollo, los halófilos se clasifican en 3

categorías. Los organismos halotolerantes crecen en condiciones de alta salinidad, pero éstas no son un requisito indispensable para su desarrollo; los halófilos moderados que requieren entre 0.5 y 2.5 M de NaCl y los halófilos extremos que requieren más de 2.5 M de NaCl.

Dentro del dominio Bacteria, se han encontrado halófilos en los grupos Firmicutes, Cyanobacteria, Proteobacteria y Bacteroidetes⁴. En el grupo de los Bacteroidetes encontramos a la bacteria halófila *Salinibacter ruber*, aislada en 2002 de las salinas de Alicante y Mallorca en España. La bacteria *S. ruber* es una halófila extrema que puede crecer en ambientes con concentraciones salinas del 15 al 30% de

NaCl, con una temperatura óptima ubicada entre los 37 y los 47 °C⁵.

Los organismos halófilos han desarrollado diferentes estrategias para contender al estrés osmótico. Una de estas estrategias, utilizada por bacterias halófilas, es la acumulación de solutos compatibles⁶, estos solutos pueden ser sintetizados o transportados al interior de la célula bacteriana desde el medio extracelular y su acumulación es de vital importancia para dar estabilidad a las proteínas, ya que actúan como chaperonas químicas. Una de las características de los solutos compatibles es que no interfieren con las funciones celulares⁷. Otra estrategia utilizada es la acumulación de KCl, esta es llevada a cabo principalmente por archaeas del grupo de las Halobacterias, que acumulan grandes cantidades de KCl para tener un equilibrio osmótico entre su citoplasma y el medio externo. El proteoma de estos organismos es muy ácido y la mayoría de sus proteínas se desnaturalizan cuando se resuspenden en bajas concentraciones de sal⁶.

Las bacterias halófilas aerobias se caracterizan por utilizar preferentemente la estrategia de acumulación de solutos compatibles para equilibrar la presión osmótica entre el medio intracelular y el medio externo. Sin embargo, *S. ruber* utiliza la estrategia de acumulación de KCl manteniendo niveles altos de iones potasio (K⁺) en su medio intracelular lo que le permite tener una concentración iónica

cercana a la encontrada en Halobacterias⁶. Se conocen algunos mecanismos de adaptación para ambientes con altas concentraciones de NaCl. Sin embargo, información acerca de cómo reaccionan los organismos halófilos cuando la sal mayoritaria del medio es de distinta naturaleza química, es escasa. Por lo tanto, las implicaciones de estudiar los efectos de medios hipersalinos que contienen mayoritariamente sales distintas al NaCl son muy relevantes, ya que estas condiciones pueden encontrarse en entornos naturales en la Tierra y fuera de ella, tal es el caso del océano del satélite Europa, en el que predominan el sulfato de magnesio (MgSO₄) o el subsuelo de Marte, rico en cloruro de magnesio (MgCl₂). Por esta razón, los organismos extremófilos y en particular los halófilos se convierten en organismos modelo para analizar el potencial de habitabilidad de algunos objetos planetarios del sistema solar.

Métodos

Las cinéticas de crecimiento se realizaron utilizando el medio nominal para *S. ruber* modificándolo con 2.05, 3.33 y 4.62 M de NaCl. Cada concentración se evalúa por triplicado. Las cinéticas permiten identificar el tiempo que la bacteria requiere para llegar a la fase exponencial.

El valor de a_w de cada uno de los medios modificados con NaCl se determina utilizando un higrómetro de punto de rocío. Los valores obtenidos se utilizan para determinar la con-

centración de MgSO_4 que debe adicionarse al medio base para tener valores de a_w equivalentes a los obtenidos en medios con NaCl. La cantidad de proteína de *S. ruber* presente en cada condición experimental se determinará utilizando el método de Bradford.

Se prepararán geles para realizar ensayos de electroforesis tipo SDS-PAGE para identificar cambios en la expresión de proteínas. Con base en esta información se prepararán geles para realizar ensayos de electroforesis 2D que permitirán visualizar la expresión diferencial de proteínas en cada una de las condiciones a estudiar. En estos geles de electroforesis 2D serán localizadas las proteínas que presentan los cambios de expresión más significativos. Utilizando espectrometría de masas MALDI-TOF se obtendrán las relaciones masa/carga (m/z) de los polipéptidos resultantes de una digestión con tripsina. Esta información se utilizará para determinar de manera parcial la secuencia de las proteínas analizadas.

Posteriormente se realizará un análisis bioinformático para obtener información sobre las rutas metabólicas o vías de señalización que se activan cuando *S. ruber* necesita adaptarse a altas concentraciones de NaCl o de MgSO_4 .

Resultados

Se realizó la cinética de crecimiento de *Salinibacter ruber* de acuerdo a las condiciones

óptimas de crecimiento reportadas por Anton y colaboradores⁵. El crecimiento de la bacteria se monitoreó mediante cambios en la densidad óptica (D. O.) en intervalos de 12 horas, utilizando un espectrofotómetro (*Agilent* 8453). La cinética resultante se muestra en la Figura 1.

Los valores de D. O. se utilizaron para calcular los parámetros de crecimiento bacteriano (Tabla 1). La velocidad específica de crecimiento (μ) se calculó realizando un ajuste lineal a la región correspondiente a la fase exponencial de la cinética de crecimiento. Una vez obtenida μ se puede calcular el tiempo de duplicación (t_d).

Se hizo crecer a *S. ruber* en medios modificados con 12.0 % (2.05 M) y 27.0% (4.62 M) de NaCl, hasta un valor de D. O.₆₃₀ de 0.35. Estos cultivos se utilizaron para realizar geles SDS PAGE y comenzar a explorar si existen diferencias en las proteínas expresada por la bacteria en estas dos distintas concentraciones de NaCl. Los geles resultantes se muestran en la Figura 2.

Conclusiones

Salinibacter ruber es una bacteria hiperhalófila que puede crecer en medios modificados con 4.62 M de NaCl.

Se han detectado diferencias en la expresión de proteínas cuando *S. ruber* crece en distintas concentraciones de NaCl.

Referencias

1. Woese, C., Fox, G., Proc Natl Acad Sci U S A. 74(11): 5088-5090 (1977)
2. Rothschild, L. J., Mancinelli, R. L., Nature. 409(6823): 1092-1101 (2001)
3. Ramírez, S. I., La genesis de la cultura universitaria en Morelos. 11: 57-66 (2010)
4. Oren, A., Saline Systems 4(4): 1-13 (2008)
5. Anton, J., Oren, A., Int J Syst Evol Microbiol 52(Pt 2): 485-491 (2002).
6. Oren, A., FEMS Microbiol Lett 342(1): 1-9 (2013).
7. Roberts, M. F., Saline systems (2005).

Tablas

Tabla 1. Velocidades específicas de crecimiento y tiempo de duplicación de *Salinibacter ruber* en distintas condiciones de salinidad.

Concentración de NaCl (mol/L)	Velocidad específica de crecimiento (hr ⁻¹)	Tiempo de duplicación (hr)
2.05	0.0195	35.54
3.33	0.0148	46.08

Figuras

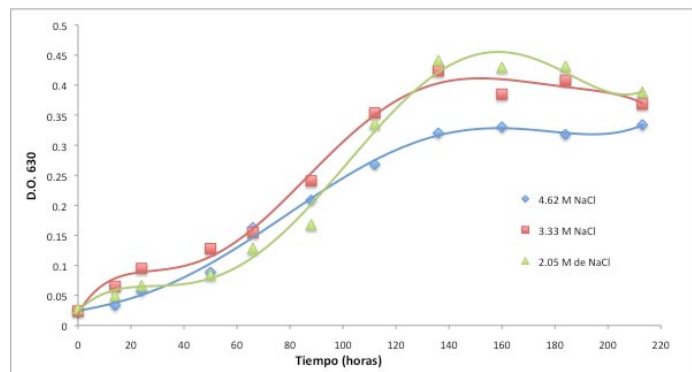


Figura 1. Cinéticas de crecimiento de *Salinibacter ruber* en diferentes concentraciones de NaCl.

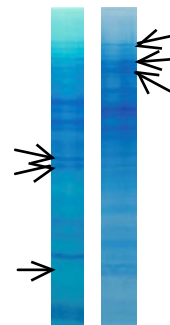


Figura 2. SDS PAGE de *Salinibacter ruber* en 2.05 M (izquierda) y 4.62 M de NaCl (derecha) en un gel al 12% de poliacrilamida, teñido con azul de Coomassie. Las flechas negras indican las bandas en las que se detectan los mayores cambios entre cada una de las concentraciones salinas.

SIMULACIÓN DEL PROCESO SEMIREGENERATIVO DE REFORMACIÓN CATALÍTICA DE NAFTA

Oswaldo Montiel Juárez, Ángel Castro Agüero

Facultad de Ciencias Básicas, Ingeniería y Tecnología, Universidad Autónoma de Tlaxcala, Calzada Apizaquito s/n, Apizaco, Tlaxcala, 90300, México.
osvaldo_1805@hotmail.com

Introducción

La nafta obtenida directamente de la columna de destilación atmosférica del crudo es una mezcla de parafinas (hidrocarburos alifáticos saturados), naftenos (hidrocarburos cíclicos saturados conteniendo al menos una estructura anillada) y aromáticos (hidrocarburos con uno o más anillos poliinsaturados) en el rango de C5-C12 con un rango de ebullición entre 30 y 200°C, constituyendo del 15 al 30% en peso del crudo con un poco de azufre y con una pequeña cantidad de nitrógeno. La reformación catalítica de nafta es uno de los procesos clave en la refinación del petróleo, convirtiendo hidrocarburos con bajo número de octano a gasolina con un alto número de octano, 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 [1].

En el presente trabajo se modeló y simuló en estado estacionario un reformador catalítico semiregenerativo. El modelo cinético de las reacciones que ocurren en los tres reactores de cama fija conectados en serie es la parte más significativa de la simulación. La nafta alimentada es caracterizada por naftenos, parafinas y aromáticos en el rango de C₆-C₉, número de carbonos, teniendo un total de 26 componentes y 47 reacciones. Asimismo, se realizó la optimización de los parámetros cinéticos tomados de literatura, mediante el

método Nelder-Mead y también se empleó un separador flash isotérmico para converger la corriente de reciclo.

Metodología

Un proceso de reformación catalítica semiregenerativo (ver Figura 1), usualmente tiene tres o cuatro reactores en serie con un sistema de cama fija de catalizador y operando continuamente de seis meses a un año. La mayoría de las reacciones de reformación son endotérmicas, varios calentadores son empleados para mantener la temperatura del reactor en los valores deseados (400 a 500°C). La reacción principal es la de deshidrogenación de naftenos a aromáticos, la cual es rápida y altamente endotérmica, resultando en un gran decremento de la temperatura dentro del reactor. El producto del primer reactor es recalentado y alimentado al siguiente reactor. Como la alimentación pasa alrededor de los reactores en serie, las velocidades de reacción disminuyen y los reactores se hacen más grandes, las reacciones se hacen menos endotérmicas, y la temperatura diferencial a través de ellos disminuye, por lo cual la cantidad de calor requerida entre los reactores también disminuye. El producto que sale de los reactores de reformación entra a un separador el cual divide la corriente en reformado y gases de reciclo. El trabajo principal del separador de productos es separar el hidrogeno del efluente del reactor. Parte del hidrogeno separado es reciclado y mezclado con la

alimentación fresca para mantener la presión parcial de hidrogeno en el reactor. La nafta alimentada es caracterizada por naftenos (alquilciclohexanos (ACH) y alquilciclopentanos (ACP)), parafinas (parafinas normales (NP) e isoparafinas (IP)) y aromáticos (A) en el rango de C6-C9 número de carbonos [2]. La alimentación se combina con el gas de reciclo que contiene gases con número de carbonos de C1-C5 e hidrogeno, teniendo un total de 26 componentes y 47 reacciones [3]. El separador de productos es modelado como una operación flash isotérmico. La parte computacional involucra resolver un conjunto de balances de materia y energía simultáneamente con las ecuaciones de equilibrio liquido-vapor. En este trabajo los balances de materia y energía se resolvieron con el método de colocación ortogonal, empleando polinomios de Legendre para el cálculo de los puntos de colocación; las propiedades fisicoquímicas necesarias para poder resolver los balances se obtuvieron de la literatura [4]. El equilibrio se modelo empleando la ecuación de estado de Soave-Redlich-Kwong [5], la cual es comúnmente empleada para describir el equilibrio termodinámico de una mezcla de hidrocarburos y también se emplea para el cálculo de las constantes de equilibrio mediante la formulación fi-fi.

Resultados

En el perfil de temperatura para los tres reactores (ver Figura 2) se observa que la

temperatura descende en mayor cantidad que para los otros dos reactores, debido a que en el primer reactor se llevan a cabo las reacciones endotérmicas y en el último se llevan a cabo las reacciones exotérmicas de craqueo y la de hidrodealquilación. El perfil de flujo de hidrogeno (ver Figura 3), muestra que en el primer reactor se produce en mayor cantidad porque es donde se procesa lo que viene del reciclo y en el último reactor se observa que ya no se produce demasiado. Los flujos totales de los tres grupos principales (ver Figura 4), son parafinas (P), naftenos (N) y aromáticos (A), como se observa los naftenos se consumen casi en su totalidad, mientras que los aromáticos se producen ya que es lo que se pretende para aumentar el número de octano, y las parafinas en un principio se consumen en menor cantidad ya que en el primer reactor se tiene una producción de isoparafinas para posteriormente consumirse.

Conclusiones

El modelo que se desarrolló consta de 26 componentes y 47 reacciones dando un total de 27 ecuaciones diferenciales ordinarias con condiciones iniciales, las cuales se resolvieron con el método de colocación ortogonal con condiciones iniciales utilizando 14 puntos internos de colocación, al mismo tiempo se resolvió la optimización de los parámetros cinéticos con el método de Nelder-Mead. Los perfiles de flujo como los de temperatura se obtuvieron haciendo

uso de los parámetros optimizados del factor pre-exponencial y la energía de activación, así como también se emplearon los valores para el cálculo de las constantes de equilibrio dados en la literatura.

Referencias

1. Ancheyta, J., "Chapter 4, Modeling of Catalytic Reforming", *Modeling and Simulation of Catalytic Reactors for Petroleum Refining*, John Wiley, New Jersey, p. 313-367, (2011).
2. Fazeli, A. y Col., "Mathematical Modeling of an Industrial Naphtha Reformer with Three Adiabatic Reactors in Series", *Iran. J. Chem. Chem. Eng.*, Vol. 28, No. 3, p. 97-102, (2009).
3. Padmavathi, G. y Chaudhuri, K. K., "Modeling and Simulation of Commercial Catalytic Naphtha Reformers", *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, Vol. 75, No. 10, p. 930-937, (1997).
4. Sinnott, R. K., "Appendix C, Physical Property Data Bank", *Chemical Engineering Design, Coulson and Richardson's Chemical Engineering*, Elsevier, Vol. 6, 4th Edition, p. 937-957, (2005).
5. Soave, G., "Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation state", *Chemical Engineering Science*, Vol. 27, p. 1197-1203, (1972).

Figuras

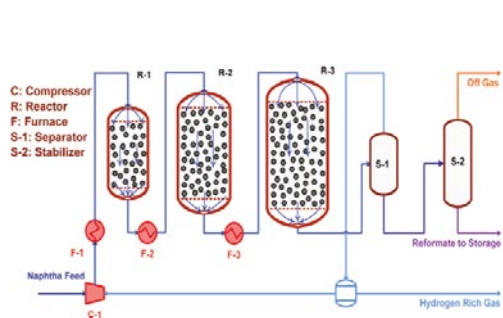


Figura 1. Proceso semiregenerativo convencional de reformación de nafta con flujo en dirección axial.

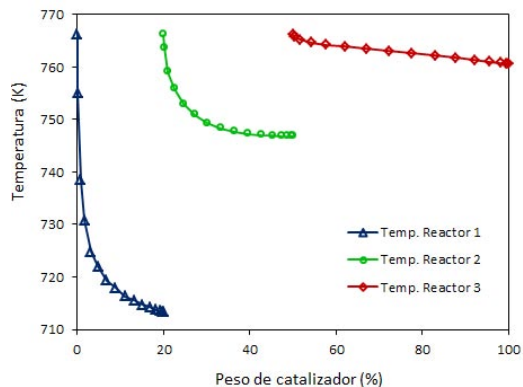


Figura 2. Perfil de temperatura a través de los tres reactores

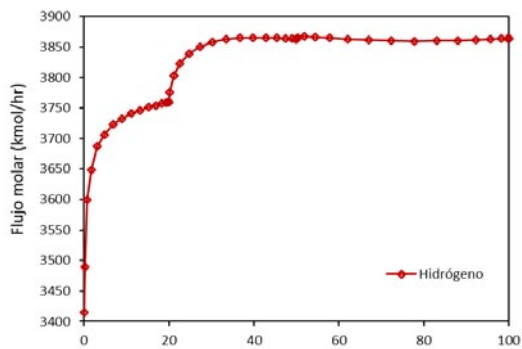


Figura 3. Flujo molar de hidrógeno.

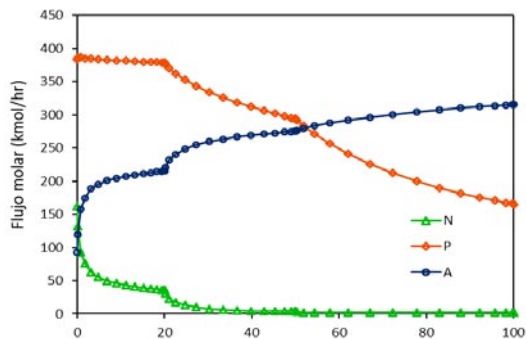


Figura 4. Flujo molar de los grupos principales del reformado (Parafinas (P), Naftenos (N), Aromáticos(A)).

UN MODELO MATEMÁTICO ASINTÓTICO PARA LA CARACTERIZACIÓN DE MATERIALES COMPUESTOS BAJO FENÓMENOS ACOPLADOS

C. Yuliana Morales Espinoza, Eduardo López López

Universidad Autónoma de Tlaxcala

carolyuliana@hotmail.com

eduardo@mym.iimas.unam.mx

Introducción

La predicción teórica de propiedades efectivas de materiales compuestos, como función de sus propiedades geométricas y físicas de sus constituyentes, es una guía importante en la experimentación y, por lo tanto, una vía de ahorro de recursos cuando se desea obtener nuevos materiales con característica globales específicas.

En general, en un compuesto, las heterogeneidades son pequeñas comparadas con su dimensión global. De esta forma, se tienen dos escalas que caracterizan al material: la microscópica, la cual describe la heterogeneidad, y la macroscópica, que describe el comportamiento global del compuesto.

Cuando se pretende analizar un compuesto con inclusiones periódicas (cuya longitud característica es muy pequeña, en relación a aquella del compuesto al que pertenecen), se tiene como modelo matemático, generalmente, una ecuación diferencial parcial con coeficientes que cambian rápidamente de manera periódica, lo que complica en extremo encontrar su solución. En este caso, se elige el Método de Homogeneización Asintótica (MHA) para caracterizar el compuesto mediante la obtención de sus propiedades efectivas (Bakhvalov and Panasenko (1989); Cioranescu and Donato (1999); Jikov et al. (1994)).

Método de Homogeneización Asintótica

El MHA consiste en encontrar ecuaciones

“apropiadas” (homogeneizadas), las cuales describen los procesos físicos que ocurren en un material heterogéneo, cuando la escala de las heterogeneidades tiende a cero. Es decir, se “toma” la ecuación diferencial que contiene coeficientes que cambian rápida y periódicamente y se “devuelve” una ecuación diferencial homogénea, con coeficientes constantes. Dichos coeficientes, son conocidos como los coeficientes efectivos del material compuesto y tienen una expresión analítica, resultado de la solución de problemas locales, lo que representa una ventaja obvia, con respecto a los métodos numéricos.

Para estudiar el compuesto se supone que éste ocupa una región Ω del espacio (\mathbf{R}^3), tiene un volumen $|\Omega|$ y además es teselación de una celda unidad, la cual está formada por dos conjuntos o fases S_1 y S_2 , de fracciones volumétricas V_1 y V_2 , respectivamente. Es decir, el compuesto está formado únicamente por dos elementos, los cuales se pueden distinguir físicamente uno del otro (ver figura 1).

Consideraremos un compuesto donde sus constituyentes responden a un fenómeno acoplado; *e.g.* la piezoelectricidad, cuyas relaciones constitutivas están dadas por (Ikeda, 1990):

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}^E S_{kl} - e_{kij} E_k, D_i = e_{ikl} S_{kl} - \kappa_{ik}^t E_k.$$

En las ecuaciones anteriores y en lo que sigue, se usa la notación suma sobre los índices latinos repetidos i, j, k , los cuales toman valores

desde 1 hasta 3. Aquí el tensor de esfuerzos σ_{ij} y el vector de desplazamiento eléctrico D_i están linealmente relacionados con el vector de campo eléctrico E_k y el tensor de deformación S_{kl} . Las propiedades del material están dadas por el tensor de módulos elásticos de cuarto orden medido en un campo eléctrico constante (indicado por el superíndice E , en lo siguiente omitido) C_{ijkl}^E , el tensor piezoelectrico de tercer orden e_{kij} y el tensor de permitividad eléctrica de segundo orden κ_{ik}^t , el cual está medido bajo una deformación constante (indicado por el superíndice t , omitido en lo sucesivo).

Las ecuaciones de gobierno para este tipo de materiales son: las ecuaciones de movimiento de Cauchy (Lai *et al.*, 1993; Jackson, 1999).

Como se ha dicho, el fenómeno en estudio es un problema con variaciones a dos escalas. La macroscópica L , la cual caracteriza a las partes que varían lentamente en el sistema, y la escala microscópica l , asociada a las heterogeneidades; es decir, a la microestructura del sistema (el límite de interés para los propósitos de la teoría de materiales compuestos es cuando $l \ll L$). Estas escalas se relacionan por medio de un parámetro pequeño: $\epsilon = l/L$, que caracteriza las fluctuaciones rápidas en la microestructura cuando $\epsilon \ll 1$. Las escalas se analizan utilizando una variable lenta o global X y una variable rápida o local Y , las cuales se suponen relacionadas

a través del parámetro pequeño

$$\left(y = \frac{x}{\varepsilon} \right)$$

Sustituyendo las relaciones constitutivas en las ecuaciones de Cauchy y cuasiestáticas de Maxwell, se tiene:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(c_{ijkl}(y) \frac{\partial u_k(x, y)}{\partial x_l} + e_{kij}(y) \frac{\partial \varphi(x, y)}{\partial x_k} \right) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(e_{ikl}(y) \frac{\partial u_k(x, y)}{\partial x_l} + \kappa_{kij}(y) \frac{\partial \varphi(x, y)}{\partial x_k} \right) = 0$$

donde Ω es la región ocupada por el compuesto y Γ es el conjunto de interfase fibramatriz del compuesto.

Con el propósito de tener una solución única del problema (4) se supone que el desplazamiento $\mathbf{U} = (u_1, u_2, u_3)$, el potencial eléctrico (φ), la tracción (t_i) y el desplazamiento eléctrico normal $\mathbf{D} = (D_1, D_2, D_3)$ son funciones continuas en la interfase y además, se deben establecer condiciones de frontera adecuadas (condiciones tipo Robin).

El problema (2) es una ecuación diferencial parcial elíptica, con coeficientes periódicos que varían rápidamente por lo que no es posible resolverla analíticamente ni mediante métodos numéricos; sin embargo, para solucionar estas ecuaciones, es posible aplicar una técnica matemática rigurosa la cual, en su interpretación más básica, transforma un

material heterogéneo a uno homogéneo mediante una técnica asintótica a doble escala.

Utilizando un desarrollo asintótico a doble escala (Kevorkian and Cole, 1996) en términos del parámetro pequeño, usando teoría del potencial complejo, se llega a las siguientes expresiones de los coeficientes efectivos:

$$\acute{C}_{ijpq} = C_{ijpq} + C_{ijklpq} M_{k,l} + e_{kijpq} N_{,k} ,$$

$$\acute{e}_{ipq} = e_{ipq} + e_{iklpq} M_{k,l} - \kappa_{kijpq} N_{,k} ,$$

$$\acute{e}_{pij} = e_{pij} + C_{ijklp} P_{k,l} - e_{kijp} Q_{,k} ,$$

$$\acute{\kappa}_{pij} = \kappa_{pij} + e_{iklp} P_{k,l} - \kappa_{kijp} Q_{,k} ,$$

Donde las funciones $N_{,pq}$, $M_{,pq}$, $P_{,p}$ y $Q_{,p}$ son soluciones de los problemas locales asociados (no mostrados), la notación de coma es usada para denotar la derivada con respecto a y_i ; es decir, $D_{1,2} = \partial D_1 / \partial y_2$.

Perspectivas del trabajo

Por el momento se tienen resultados para el caso de fenómenos simples, por ejemplo la caracterización térmica o dieléctrica de un compuesto (López, 2013); así como su permeabilidad magnética o sus coeficientes de difusión.

Se espera obtener resultados para problemas acoplados piezoeléctricos y magneto-electroelástico. Observando la forma de los problemas locales, se propone resolverlos mediante teoría del potencial complejo, si-

guiendo las ideas de la teoría de Lekhnitskii (1981), para sólidos elásticos anisótropos. Se espera obtener expresiones analíticas simples y cerradas para los coeficientes efectivos del material en cuestión.

Agradecimientos

A CONACyT por la beca para realizar esta investigación, a la Universidad Autónoma de Tlaxcala; a Cuerpos Académicos, calidad y productividad para su internacionalización CACyPI-UATx-2014 y al Cuerpo Académico de Procesos Químicos y Medio Ambiente, por todo su apoyo brindado.

Referencias

1. N. Bakhvalov and G. Panasenko. *Homogenization: Averaging processes in periodic media*. Kluwer Academic, 1989.
2. V. Berdichevsky, V. Jikov, and G. Papanicolaou. *Homogenization*. World Scientific, Singapore, 1999.
3. D. Cioranescu and P. Donato. *An Introduction to Homogenization*. Oxford University Press, 1999.
4. T. Ikeda. *Fundamentals of Piezoelectricity*. Oxford University Press, Oxford, 1990.
5. W. Michael Lai, David Rubin, and Erhard Kreml. *Introduction to Continuum Mechanics*. Pergamon Press, Oxford, 1993.
6. J.D. Jackson. *Classical Electrodynamics*. 3rd Ed. Wiley, NY, 1999.
7. E. López, et al. *Effective permittivity of a fiber-reinforced composite with transversely isotropic constituents*. Journal of Electrodynamics 71 (2013) 791-800
9. S.G. Lekhnitskii. *Theory of Elasticity of an Anisotropic Body*. Mir Publishers, 1981

Figuras

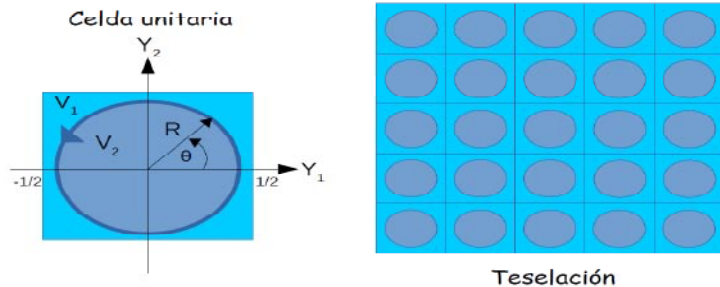


Figura 1. Esquema de a) celda unitaria y b) un compuesto bifásico, donde se observa una matriz reforzada de fibras cilíndricas distribuidas periódicamente en un arreglo cuadrado.

ESTUDIO DE LA DEGRADACIÓN DE LA POLIACRILAMIDA POR FOTÓLISIS DIRECTA

Edgar Oropeza Cruz, Marileydi López Rivera, Rosa Romano Ramírez,
Eneida Reyes Pérez

eneidarp2009@gmail.com

Universidad Autónoma de Tlaxcala

Introducción

La fotólisis directa es una vía de eliminación de los contaminantes presentes en la atmósfera mediante, la cual, es posible romper moléculas del compuesto en fase acuosa debido a la absorción de energía que experimenta su estructura química.

Antecedentes

Los estudios sobre la fotólisis directa en fase acuosa son numerosos, Burrows y colaboradores en 2002, los refieren según el tipo del estudio (identificación de productos, estudio cinético o estudio toxicológico). Yujing y colaboradores en 2000, fueron los pioneros en el estudio de contaminantes en el aire, estudiaron compuestos con relación

a las Cetonas. Feigenbrugel y colaboradores en el 2005 realizaron estudios para determinar los coeficientes de absorción y los espectros de absorción molar para pesticidas. En 2009, Reyes Pérez utilizó un dispositivo experimental parecido al de Feigenbrugel pero con dos celdas de absorción de 10 cm y 23.7 mL, acopladas a un detector CCD, para determinar los valores absolutos de los coeficientes de absorción molar de 5 herbicidas (Alacloro, Mecoprop-P, Pendimetalina, Propanil y Trifluralina), utilizó metanol como solvente. Es importante estudiar la degradación de los compuestos que se utilizan hoy en día para saber, cuál es su comportamiento en el medio ambiente. El presente trabajo tiene como *objetivo* estudiar la degradación

de la poliacrilamida por fotólisis directa en fase acuosa.

Metodología

El dispositivo experimental utilizado para la determinación del coeficientes de extinción molar y los espectros de la poliacrilamida se muestran en la Figura 1, está constituido de una lámpara de mercurio [CAL-2000], o bien una lámpara de Deuterio, 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 fibras ópticas con doble bifurcación [QBIF400-1-UV-VIS], un espectrómetro [USB4000-UV-VIS] y una estación de adquisición de datos (Contreras, 2013). Primeramente se conecta la lámpara de mercurio para calibrar y obtener el coeficiente de extinción molar y posteriormente la lámpara de deuterio para obtener los espectros de absorción para el rango de concentraciones entre 1.2×10^{-3} a 2×10^{-3} mg/L. Se determinaron las intensidades $I_{0,A1}$ y $I_{0,B1}$ transmitidas a través de las dos celdas (A y B) la celda A contiene agua destilada con el fin de determinar la relación $I_{0,B1} / I_{0,A1}$, mientras que la celda B se llenó con poliacrilamida (IB_2) es importante mencionar que el contenido de la celda A se mantuvo llena de agua mientras que para la celda B con poliacrilamida o bien agua para determinar $IB_2 / I_{0,A2}$. Durante la experimentación la intensidad de luz emitida por la lámpara puede variar por la intensidad de luz de referencia, por lo que se calculó $I_{0,B2}$ y de $I_{0,B1}$ de acuerdo a las Ecuación (1)

$$I_{0,B2} = I_{0,B1} (I_{0,A2} / I_{0,A1}) \quad (1).$$

Como el coeficiente de absorción molar depende de la longitud de onda se utilizó la ley de Beer - Lamber (Ecuación 2).

$$A = \log(I_{0,B2}) / IB_2 = \epsilon LC \quad (2).$$

Donde A es la absorbancia (adimensional), L es la longitud de la celda (cm) y C es la concentración de la disolución (mol.L^{-1}).

Resultados

EL coeficiente de extinción molar para el poliacrilamida se obtiene graficando la absorbancia respecto a la concentración por la longitud de la celda (cm) como se muestra en la Figura 1. La pendiente de los datos graficados corresponde al coeficiente de extinción molar para la poliacrilamida de $\epsilon = 18.3 \text{ M}^{-1}\text{cm}^{-1}$.

El espectro se obtuvo con una lámpara de deuterio para la poliacrilamida entre el rango de 200 a 700nm como se muestra en la Figura 2, se observa que presenta un pico máximo a 230 nm ($\epsilon \approx 30000 \text{ M}^{-1}\text{cm}^{-1}$, esta máxima absorción se le atribuye al grupo carbonilo $\text{C}=\text{O}$ presente en la molécula de la poliacrilamida. Los pesos moleculares antes y después de la irradiación son: 558427.2994 y 539627.9376 respectivamente, observando una diferencia del 3% respecto al peso molecular final con el inicial. Se observa que existe una disminución del peso molecular

de la poliacrilamida no tan significativa pero muestra una pequeña alteración después de la irradiación.

Conclusiones

La información obtenida en este trabajo proporciona información útil para estimar el potencial por fotólisis directa en fase acuosa.

Agradecimientos

PROMEP. Redes Temáticas de Colaboración Académica. ID - 13555. Segundo año.

Referencias

1. Burruws, H.D., Canle, L. M., Santaballa, J.A., Steenken, S. *Jour. of Photochemi. and Photobi.* 67, 71-108 (2002).
2. Yujing, M., Mellouki, A. *Jour. of Photochemi. and Photobi.* 134, 31-36 (2000).
3. Feigenbrugel, V., Le Calvé, S., Mirabel, P. *Photoch. and Photobi. A: Chem.* 174, 76-81 (2005).
4. R.P. Eneida, "Chemie multiphasique des pesticides dans l'air: distribution et photoreactivite". Thèse Docteur. L'Universite De Strasbourg (2009).
5. C. J. Omar, "Degradación de los pesticidas: 2,4-D, Diclorvos y clorotalonil por fotoreactividad". Tesis Maestría. Universidad Autónoma Tlaxcala (2013).

Figuras

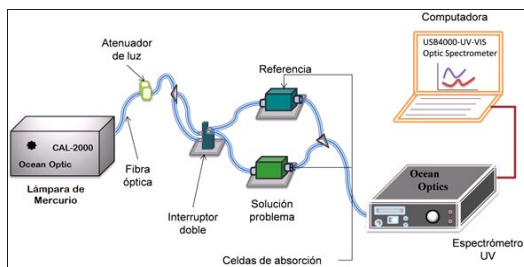


Figura 1. Dispositivo experimental.

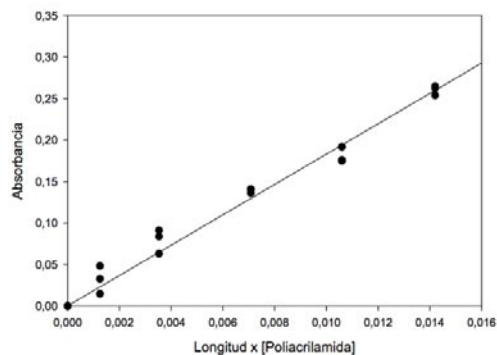


Figura 2. Absorbancia para el poliacrilamida a 253.7 nm.

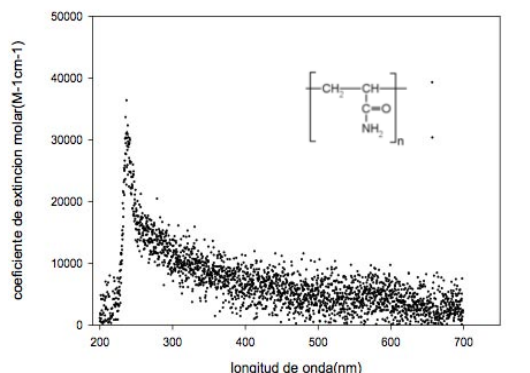


Figura 3. Espectro de la poliacrilamida

ANÁLISIS NORMATIVO DEL RIESGO AMBIENTAL A NIVEL ESTATAL

Claudia Yazmín Ortega Montoya, Alfredo Ávila Galarza, Israel Razo Soto,
Roberto Briones Gallardo

yazminortegam@gmail.com

Universidad Autónoma de San Luis Potosí

Introducción

La normatividad mexicana para la prevención de los accidentes industriales relacionados con actividades riesgosas, clasifica a éstas en dos tipos principales (Artículos 146 y 149 de Ley General del Equilibrio Ecológico y la Protección al Ambiente, LGEEPA): a) las actividades altamente riesgosas (que son reguladas en el ámbito federal) y b) las actividades riesgosas (que las entidades federativas deben definir y regular).

Los establecimientos comerciales, industriales y de servicio que realizan actividades altamente riesgosas, son sujetos a regulación para la prevención de accidentes industriales mayores por la Secretaría de Medio Ambiente

y Recursos Naturales (SEMARNAT), con fundamento en el artículo 5°, fracción VI de la LGEEPA. Una actividad se considera altamente riesgosa cuando maneja cantidades iguales o superiores a las de reporte, asentadas en: 1) El Primer Listado de Actividades Altamente Riesgosas (publicado en el Diario Oficial de la Federación el 29 de marzo de 1990, para sustancias tóxicas); o en 2) El Segundo Listado de Actividades Altamente Riesgosas (publicado el 4 de mayo de 1992, para sustancias inflamables y explosivas).

Las entidades federativas (en el marco de las competencias que les confiere el artículo 6°, fracción IV de la LGEEPA), tienen la facultad de regular las actividades que no sean consi-

deradas altamente riesgosas para el ambiente, cuando éstas afecten el equilibrio de los ecosistemas o el ambiente; de acuerdo con esto, las legislaciones locales deben definir las bases para coordinar sus acciones en esta área.

En México, la generación de instrumentos regulatorios relativos al control de las sustancias químicas peligrosas ha sido influenciada de manera importante por los tratados internacionales entre países y los acuerdos vinculantes entre organizaciones [1]. Estas directrices han servido de base para determinar las actividades altamente riesgosas, a partir de las cuales muchas entidades federativas definen sus actividades riesgosas, mediante el criterio de exclusión.

La regulación del riesgo a nivel estatal es especialmente importante debido a la gran cantidad de actividades riesgosas que no están sujetas a control federal y que en caso de accidente, tienen la capacidad para ocasionar impactos al exterior. Además, pueden configurarse en escenarios de riesgo si existen sistemas humanos expuestos y susceptibles de ser afectados [2], por lo que requieren controles para su ubicación. Además, es a nivel local donde el riesgo se manifiesta de manera más clara y donde resulta más factible y práctico dimensionar los problemas del riesgo, coordinar y actuar [3].

El objetivo del presente trabajo de investigación es analizar el marco regulatorio en

materia de riesgo ambiental en el ámbito estatal en México, distinguiendo las modalidades para la evaluación del riesgo ambiental y las consideraciones para la caracterización de las actividades riesgosas.

Métodos

La caracterización del marco regulatorio estatal en materia de riesgo ambiental se realizó utilizando las fuentes de información siguientes:

- a) Análisis de las leyes, reglamentos, decretos y acuerdos en materia de riesgo a nivel estatal.
- b) Consulta de la información obtenida en páginas web de las dependencias gubernamentales encargadas de la evaluación del riesgo ambiental a nivel estatal.
- c) Respuesta a las solicitudes de información pública sobre el proceso de evaluación del riesgo en cada entidad federativa.

La información obtenida se utilizó para: a) identificar las modalidades en que cada estado regula el riesgo ambiental; b) las bases a partir de las cuales define una actividad como riesgosa; y c) la metodología para evaluar, y, en su caso, aprobar la operación de dichas actividades.

Resultados

Las 31 entidades federativas de México y el Distrito Federal realizan la evaluación del riesgo ambiental en el ámbito de su competencia.

Las modalidades de regulación empleadas, se clasificaron de la forma siguiente:

- 1) Entidades que tienen una definición clara de las actividades de riesgo de competencia estatal y que las regulan mediante la aprobación de un estudio de riesgo ambiental, en el cual se identifican los riesgos y las consecuencias de las liberaciones accidentales de los materiales peligrosos.
- 2) Entidades que no han definido a las actividades de riesgo de su competencia, pero que solicitan un estudio de riesgo cuando lo consideran apropiado, al revisar las características de las actividades que solicitan autorización en materia de impacto ambiental.
- 3) Entidades que tienen definidas las actividades de riesgo estatales pero que realizan la evaluación del riesgo, dentro de las manifestaciones de impacto ambiental. Sin que esta evaluación incluya el análisis de riesgos, ni determinación de consecuencias al exterior.

En México, sólo 6 estados y el Distrito Federal tienen una definición clara de las actividades riesgosas de competencia estatal, siendo estos: Baja California, Tamaulipas, Sinaloa, Sonora, San Luis Potosí y Estado de México. Únicamente el estado de Coahuila no cuenta con un estudio particular para la evaluación del riesgo ambiental. Por su parte 25 entidades federativas no cuentan con una definición

clara de las actividades riesgosas de competencia estatal que permita diferenciarlas de las actividades de riesgo municipales. Estos estados evalúan las actividades que solicitan autorización de impacto ambiental y deciden a partir de sus características y del principio de discrecionalidad, cuáles de ellas tienen la capacidad para causar afectaciones significativas al ambiente; en estos casos, les requieren un estudio de riesgo ambiental.

En cuanto a las bases para caracterizar las actividades riesgosas, se identificó que de los 6 estados y el Distrito Federal, que tienen una definición clara de las actividades de riesgo:

- a) Baja California, Sinaloa y Coahuila establecen cantidades de reporte de sustancias químicas en forma similar a los listados de actividades altamente riesgosas.
- b) Tamaulipas y Estado de México caracterizan las actividades de riesgo en función de las cantidades de reporte para determinados giros económicos.
- c) El Distrito Federal y San Luis Potosí sólo hacen referencia a giros comerciales para la caracterización de actividades riesgosas.
- d) Sonora establece su caracterización de acuerdo con la capacidad de la actividad para ocasionar impactos en el exterior de sus instalaciones, haciendo uso de niveles de radiación térmica (en el caso de incendios), concentración aérea (en el

caso de liberación de sustancias tóxicas); o sobrepresión (en el caso de explosiones). Lo anterior, haciendo uso de una aproximación basada en consecuencias.

Conclusiones

El análisis del marco normativo mexicano relativo a la evaluación del riesgo ambiental estatal y a la definición de las actividades riesgosas muestra que existe una deficiencia legislativa en muchas entidades. Para la mayor parte de ellas, el juicio para caracterizar una actividad de riesgo se determina aludiendo al principio de discrecionalidad, mediante el cual la dependencia responsable de dicha evaluación puede elegir los elementos no regulados del acto administrativo para realizar dicho juicio. Lo anterior, puede dar lugar a su aplicación en forma subjetiva y diferenciada por los diferentes actores responsables de dicha evaluación. La falta de criterios definidos además, imposibilita la identificación de las actividades de riesgo, la realización de programas de regulación de actividades de riesgo en operación y dificulta el ejercicio de comparación con otros marcos normativos y la evaluación del cumplimiento de dicho instrumento al interior de los estados. Finalmente, éste vacío legislativo limita la evaluación del riesgo ambiental a actividades

nuevas que requieren autorización en materia de impacto ambiental para la mayor parte de los estados de México.

Agradecimientos

A CONACYT por el financiamiento de la beca 312165 y al Centro de Investigación y Estudios de Posgrado de la Facultad de Ingeniería por el apoyo en el desarrollo de esta investigación.

Referencias

1. Hernández, M. *Sustancias peligrosas, riesgo y salud en México. Marco normativo* en Cienfuegos S. D. y Macías V. M. C. (coords.), *Estudios en homenaje a Marcia Muñoz de Alba Medrano. Bioderecho, tecnología, salud y derecho genómico*. (Inst. Inv. Jur. UNAM, México, 2006)
2. Fernández, M. A. *Ciudades en riesgo. Degradación Ambiental, Riesgos Urbanos y Desastres*. (Red de Estudios Sociales en Prevención de Desastres en América Latina 1996).
3. Guevara O. E., Quas W. R., Fernández V.G., *Guía básica para la elaboración de Atlas Estatales y Municipales de Peligros y Riesgos*. Lineamientos generales para la elaboración de atlas de Riesgos Serie Atlas Nacional de Riesgos. (Centro Nacional de Prevención de Desastres. 1º ed. México. 2004).

SIMULACIÓN DE REACTORES DE POLIMERIZACIÓN DE ACRILAMIDA UTILIZANDO CFD

Arturo Ortiz Arroyo, Erika Atriano Pérez, Elvira López Sánchez

aortiz2000@hotmail.com

Universidad Autónoma de Tlaxcala

Introducción

La polimerización está influenciada por la hidrodinámica de los tanques agitados donde se llevan a cabo. Una agitación eficaz del sistema mantiene las partículas en la fase dispersa, evita la floculación y mejora la transferencia de masa y calor y por lo tanto el control del reactor. A pesar de que existe evidencia de que las condiciones hidrodinámicas del sistema de polimerización tiene influencia en los productos, este aspecto rara vez se analiza.

En este estudio se emplean un código CFD para analizar el flujo en un tanque agitado con y sin baffles por un impulsor Rushton. La selección del impulsor y de los parámetros geométricos del tanque de mezclado se hicie-

ron para facilitar las comparaciones con los datos experimentales disponibles. El objetivo principal de este estudio es producir numéricamente un estudio completo paramétrico de los resultados en tiempo promedio basado en el número de Reynolds, los modelos turbulentos y la holgura del impulsor.

Métodos

Se realizaron simulaciones bidimensionales en un recipiente cilíndrico con diámetro de 12 cm que contaba con cuatro deflectores montados en la pared del tanque. El tanque fue agitado por una turbina tipo propela (disco con dos y cuatro paletas perpendiculares) cuyo diámetro, ancho de hoja fueron medidos e introducidos al código.

La ecuación de continuidad y las ecuaciones de movimiento para flujos incompresibles inestables en tres dimensiones se expresan de la siguiente manera (Bird y col, 2008):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) = 0 \quad (1.2)$$

$$\rho \left[\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla(uu) \right] = -\nabla p + 2\mu \nabla \cdot S - \frac{2}{3} \mu \nabla(\nabla \cdot u) + F \quad (1.3)$$

Para incluir la turbulencia, la velocidad (u) y la presión (p) se puede descomponer en la suma de su media (\bar{u} , \bar{p}) y los componentes de fluctuación (u' , p'):

$$u = \bar{u} + u' \text{ and } p = \bar{p} + p' \quad (1.4)$$

Para tener un conjunto completo de ecuaciones se aumentó la ecuación de energía;

$$\rho_L \epsilon_S \frac{\partial}{\partial t} C_{p_s} T_s = k'_{sw} \nabla^2 T + k'_{sr} \left(\nabla^2 T + \frac{1}{r} \nabla T \right) - v_i \frac{\rho_L C_{p_0}}{\rho_L C_{p_c}} \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{(-\Delta H) r_i}{\rho_L C_{p_c}} + \frac{Q}{\rho_L C_{p_e}} - h^{LS} a_{LS} (T_L - T_S) - h^{LG} a_{LS} (T_L - T_S) - a_w h^{LW} (T_L - T_w)$$

Donde T_w es la temperatura de la pared, y

$$Q = h^\infty (T^\infty - T_w)$$

Modelación de la reacción de polimerización

Naghash y Okay, 1995 estudian la polimerización de poli acrilamida por radicales libres en agua a concentraciones de 1.8 peso/volumen %. Experimentalmente se mantiene la concentración de monómero y polímero

formado abajo del punto de gelificación.

Los autores llegan a una forma de la ecuación de reacción muy simple en el periodo pre-gelificación:

$$\left(\frac{dx}{dt} \right)_0 = [1 + (2r_{21} - 1) f_{20}] k_{p1} [R]_0$$

Donde r_{21} el cociente de reactividad de los vinilos en los monómeros Bis y AAm, f_{20} es la fracción inicial de monómero, k_{p1} es la constante de propagación para la homopolimerización, y $[R^*]_0$ es la concentración de radicales a una conversión cero de monómero, que está dada por:

$$R^* =$$

Donde f es la eficiencia del iniciador, k_d es la constante de velocidad del iniciador, $[I]_0$ es la concentración inicial del iniciador, y k_{t0} es la constante de velocidad de terminación de radicales de a conversión cero. Si la concentración de radicales cuando la conversión de monómero es cero, $[R^*]_0$ permanece constante, y los autores dan una curva experimental donde se pueden obtener las constantes numéricas del modelo (Baselga y col, 1989).

3. RESULTADOS

Para modelo de polimerización de acrilamida se han obtenido simulaciones aún en etapas muy iniciales de reacción y se muestran en las figuras 1, 2, 3. La falta de homogeneidad en los perfiles de concentración es evidente en la fig. 1. En la figura 2 se puede observar que el polímero se concentra en el agitador como

es de esperar pues es donde se genera más turbulencia y por lo tanto más mezclado.

Conclusiones

Las simulaciones aunque se encuentran en etapas tempranas, pero, poseen al menos de forma cualitativa las características que se esperan obtener en un reactor real. Además que, dado que la técnica se ha reportado que funciona para otros sistemas, es posible esperar resultados congruentes con la experimentación.

Referencias

1. Bird, Stewart, Lightfoot. Transport Phenomena. Ed. Wiley and sons, NY, 2008
2. Naghash, H.J. y Okay O., Formation and structures of polyacrylamide gels. Journal of Applied Polymer Science. 60, 971-979 (1996)
3. Baselga, J., Llorente, M.A., Hernández-Fuentes y Pierola, I.F., European Polymer Journal, 23,161 (1989)

Figuras

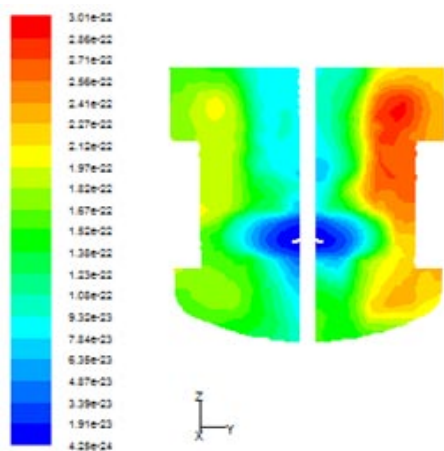


Figura.1 Polímero formado por reacción, $t=10.1$ s
Modelo de turbulencia k-epsilon

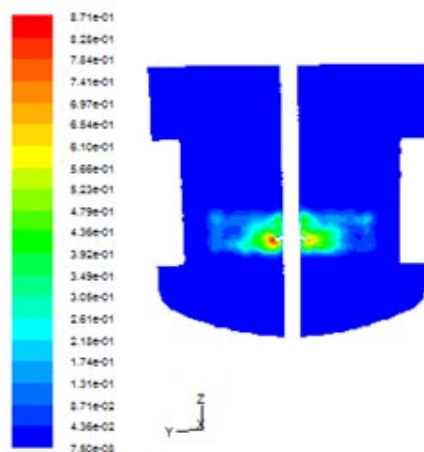


Figura. 2 Fracción mol de poliacrilamida $t=10.1$ s.
Modelo de turbulencia k-omega

BÚSQUEDA DE INHIBIDORES PARA LA FORMACIÓN DE FIBRAS AMILOIDES DE LA PROTEÍNA 6aR24G

Ángel Enrique Peláez Aguilar¹, Roberto Carlos Maya Martínez¹, Lina Rivillas Acevedo¹, Gilberto Valdés García², Nina Pastor Colón², Carlos Amero Tello¹

angelo.green78@gmail.com

¹Centro de Investigaciones Químicas, UAEM

²Facultad de Ciencias, UAEM

Introducción

La amiloidosis de cadena ligera (AL) es una enfermedad caracterizada por la proliferación anormal de una clona de células plasmáticas, las cuales secretan al torrente sanguíneo cadenas ligeras de inmunoglobulina que se depositan en forma de insolubles fibras amiloides en órganos y tejidos vitales del paciente. Se ha encontrado que los componentes fibrilares de estos depósitos están formados por fragmentos de la región variable de la cadena ligera (VL) y en algunos casos puede encontrarse la cadena ligera completa 1,2, 3.

Los órganos más afectados son los riñones, el corazón y el hígado, causando un daño progresivo en éstos. La evolución de esta enfermedad

es fatídica; si no es tratada provoca la muerte del paciente en un tiempo de entre 10 a 14 meses. Mientras que pacientes atendidos con algún tipo de tratamiento mueren en un tiempo promedio de 24 a 48 meses 2,4.

Las proteínas de la línea germinal V λ 6a están estrechamente relacionadas con este padecimiento, se localiza en el grupo C del locus λ y es expresado solo por el 2 % de la sangre periférica y células B de la medula ósea en individuos sanos. Mientras que es expresada por el 38 % en pacientes con AL. Por otra parte, la mutación R24G (6aR24G) está presente en el 25% de las proteínas λ 6 amiloidogénicas de esta línea germinal, por lo que representa una variante alotípica 2.

Por ahora ningún tratamiento ha sido enfocado a detener el proceso de formación de fibras amiloides. En este proyecto exploramos la posibilidad de encontrar inhibidores que detengan el proceso de formación de fibras *in vitro*, lo cual podría ayudar a diseñar fármacos que puedan inhibir la formación de fibras amiloides *in vivo* en estudios futuros.

Métodos

Preparación de las muestras. La proteína será sobreexpresada en *E. coli* BL21 en medio de cultivo 2xYT. Se extraerá la proteína por shock osmótico con 20% (p/v) de sacarosa fría y será purificada por FPLC a través de una columna de filtración en gel.

Fibrilogénesis *in vitro*. La formación de fibras amiloides de la proteína recombinante 6aR24G en presencia y ausencia de moléculas pequeñas, se seguirá con el fluoroforo Tioflavina T, el cual se une a las fibras formadas, permitiendo seguir su crecimiento.

Espectroscopia de RMN. En caso de encontrarse alguna molécula pequeña capaz de inhibir la formación de fibras de la proteína 6aR24G, se observará su interacción con la proteína a través de Resonancia Magnética

Nuclear. Los experimentos se llevarán a cabo en un equipo Agilent VNMR-S de 700 MHz, en el Laboratorio Nacional de Estructuras de Macromoléculas (LANEM).

Perspectivas del trabajo.

Encontrar un compuesto natural el cual inhiba la formación de fibras amiloides producidas por la proteína 6aR24G, en caso de encontrarlo, observar la interacción del compuesto con los aminoácidos de la proteína por Resonancia Magnética Nuclear.

Referencias

1. Buxbaum, J.N., Linke, R. P. *Journal of molecular biology* 421, 142–59 (2012).
2. Del Pozo, L., Ortiz, E., Sánchez, R., Sánchez-López, R., Güera, L., Murphy, C. L., Allen, A., Wall, J. S., Fernández-Velasco, A., Solomon, A., Becerril, B. *Proteins*, 72, 684–92 (2008).
3. Desport, E., Bridoux, F., Sirac, C., Delbes, S., Bender, S., Fernandez, B., Quillard, N., Lacombe, C., Goujon, J. M., Lavergne, D., Abraham, J., Touchard, G., Femand, J. P., Jaccard, A. *Orphanet Journal of Rare Diseases*, 7:54 (2012).
4. Rosenzweig, M., Landau, H. *Journal of hematology & oncology*, 4: 47 (2011)

BÚSQUEDA DE MODIFICACIONES EN LA SECUENCIA DEL GEN QUE CODIFICA PARA CANALES DE SODIO DEPENDIENTE DE VOLTAJE ASOCIADO AL MECANISMO DE RESISTENCIA A PIRETROIDES EN *Aedes aegypti* EN EL ESTADO DE MORELOS

Mauricio Polanco Mendoza¹, Edgar Dantán González²

¹Facultad de Ciencias Biológicas Universidad Autónoma de Morelos

mpm_020@hotmail.com

²Centro de Investigación en Biotecnología Universidad Autónoma del Estado de Morelos

Introducción

El dengue es una enfermedad de tipo viral, provocada por el denguevirus o virus del dengue, este virus cuenta con cuatro serotipos principales distribuidos en diferentes partes del mundo. La infección por dengue provoca síntomas parecidos a una gripe fuerte y a este cuadro clínico se le denomina dengue clásico o fiebre del dengue, sin embargo se puede presentar una forma más severa de la enfermedad conocida como dengue hemorrágico la cual provoca hemorragias por todo el cuerpo del organismo, por lo que se requiere hospitalización durante el transcurso de la enfermedad, debido a la severidad del cuadro clínico que puede provocar la muerte. El virus del dengue es transmitido por el

mosquito *Aedes aegypti*, este mosquito tiene como señas morfológicas franjas blancas por todo el cuerpo y una peculiar forma de lira en el tórax. Este mosquito se distribuye en zonas tropicales de todo el globo, desde Asia hasta América, este vector ha contribuido a la diseminación del virus desde los primeros reportes en Asia, dándose brotes importantes en América Latina, por ejemplo la epidemia de dengue en Cuba^{1,2}. Se estima que 2500 millones de personas están en riesgo de contraer dengue, cada año se producen entre 500 y 100 millones de casos de infección por este virus en todo el mundo³. No existe vacuna o medicamento para prevenir la enfermedad, solo para sobrellevar los síntomas de la misma, por lo tanto los esfuerzos

para controlar la enfermedad se centran en controlar al vector de esta enfermedad⁴. El estado de Morelos desde el 2011 hasta el 2014 ha estado dentro de los diez primeros lugares nacionales de incidencia de dengue clásico y dengue hemorrágico⁵.

El mosquito presenta un ciclo de vida completo, lo que significa que pasa por cuatro estadios de desarrollo, huevo, larva, pupa y adulto. Para controlar al vector se tomaron dos estrategias principales, la primera la conforman las campañas de “descacharrización” y la segunda el tratamiento con plaguicidas, a las larvas se las trata con abate (plaguicida organofosforado), y a los adultos se los combate con las campañas de nebulización con piretroides. Sin embargo en las últimas décadas se ha notado que el control químico con plaguicidas no está dando buenos resultados, esto se debe a la presencia de un fenómeno llamado resistencia, que se ha descrito no solo para mosquitos, también se ha presentado en cucarachas, y algunos insectos plaga para el humano, y esto se refleja en los altos índices de morbilidad de esta enfermedad⁴.

Dentro de los mecanismos de resistencia contra plaguicidas piretroides descritos para mosquitos adultos, se encuentra la resistencia metabólica y la resistencia por cambio en el sitio de acción de los piretroides el cual es el canal de sodio dependiente de voltaje, se han reportado mutaciones en el sitio de acción de los piretroides en *Aedes aegypti* en América

Latina y en el sureste de México, las principales mutaciones se encuentran en el exón 20 y 21 del gen que codifica para los canales de sodio, siendo un par en el exón 20 y un par en el exón 21. Estas mutaciones reportadas provocan el cambio de un solo aminoácido que desencadenan en el fenómeno de resistencia, en la posición 1011 en el exón 20 encontramos isoleucina, pero estudios recientes han encontrado metionina e inclusive valina. En la posición 1016 en el exón 21 normalmente encontramos valina, sin embargo en estudios recientes en poblaciones de América Latina se han encontrado metionina y hasta glicina⁶. Por lo tanto debido al alto número de casos de dengue y dengue hemorrágico en Morelos este trabajo plantea el análisis de una cepa colectada en Cuernavaca, analizar sus niveles de resistencia o susceptibilidad y analizar el genoma del mosquito en busca de las mutaciones presentes en organismos resistentes ya descritas en el país.

Métodos

Para realizar este trabajo se utilizaron dos cepas, una cepa de referencia que no ha estado en contacto con el plaguicida denominada Rockefeller, y una cepa colectada en Morelos que ha estado en contacto con plaguicidas denominada cepa Cuernavaca. Ambas cepas proporcionadas por el Instituto Nacional de Salud Pública (INSP).

Por una parte se planea realizar los bioensayos con plaguicidas piretroides para determinar

el grado de resistencia o susceptibilidad, entre los cuales se probarán Cipermetrina y permetrina grado comercial. Se seguirá el método de papel impregnado postulado por la OMS. La DL50 y DL90 se determinará utilizando el programa probit-log.

Por otra parte se plantea realizar el análisis molecular de la población estudiada, de la cual se extraerá ADN de mosquito utilizando el método de extracción de ADN. Posteriormente se realizará la técnica de PCR alelo específico utilizando oligonucleótidos para buscar las cuatro mutaciones reportadas para el canal de sodio dependiente de voltaje.⁷ Por otra parte se planea realizar el análisis de los exones 20 y 21 para buscar posibles mutaciones no reportadas.

Resultados

Se realizó el análisis molecular de las dos cepas sin ser sometidas a exposición de plaguicidas, para la cepa Rockefeller se encontró la presencia de los alelos silvestres y la carencia de los alelos mutantes. Mientras que para la cepa Cuernavaca fueron encontradas dos mutaciones, isoleucina por metionina en la posición 1011 (figura 1), y valina por isoleucina en la posición 1016 (figura 2).

Conclusiones

La cepa de referencia que nunca ha estado a presión de selección con plaguicidas no presenta el genotipo mutante, o no lo presenta con la misma frecuencia que la cepa

Cuernavaca, en la cual tenemos la presencia de dos mutaciones, una en el exón 20 y una en el exón 21, directamente relacionadas con la resistencia por mutación del sitio de acción de los piretroides.

Agradecimientos

Al Instituto Nacional de Salud Pública.

Referencias

1. Gibbons, R., Vaughn, D. 2002. Dengue: an escalating problem. Department of Virus Diseases, Walter Reed Army Institute of Research. Silver spring, MD, Usa. *BMJ* 2002;324:1563–6.
2. Hoyos, A., Pérez, A. 2010. Actualización en aspectos epidemiológicos y clínicos del dengue. Instituto de Medicina Tropical Pedro Kouri. La Habana, Cuba. *Revista Cubana de Salud Pública* 2010; 36(1): 149-164.
3. Organización Mundial de la Salud (OMS), 2014
4. Henchal, E., Putnak, J. 1990. The Dengue Viruses. Department of Virus Diseases, Walter Reed Army Institute of Research. Washington, D.C. *Clinical Microbiology Reviews* 1990; 3(4): 376-396.
5. SINAVE. Panorama Epidemiológico de Fiebre por Dengue y Fiebre Hemorrágica por Dengue. *Semana Epidemiológica* 40. 2013.
6. Saavedra, K., Urdaneta, L., Rajatileka, S., Moulton, M., Flores, A., Fernandez, I., Bisset, J., Rodriguez M., McCall, P.,

Donnelly, M., Ranson, H., Hemingway, J., Black, W. 2007. A mutation en the voltaje-gated sodium cannel in Latin American *Aedes aegypti*. Department of Microbiology, Immunology and Pathology, Colorado State University. Fort Collins, Colorado, USA. *Insect Molecular Biology*, 16(6): 785-798.

7. Pérez, O., Rodríguez, J., Bisset, J., Leyva, M., Díaz, M., Fuentes, O., Ramos, F., González, R., García, I. 2004. Manual de Indicaciones Técnicas para Insectarios. Insectario del Instituto de Medicina Tropical Pedro Kourí. Editorial Ciencias Médicas. La Habana, Cuba.

Tablas y figuras

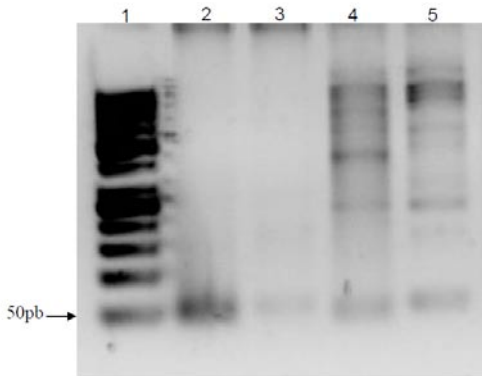


Figura 1. Electroforesis en gel de agarosa al 4%. PCR utilizando los oligonucleótidos para el alelo específico isoleucina por metionina, peso esperado de 56 pares de bases. Carril 1 marcador de peso molecular, carril 2 alelo silvestre (Ile1011), carril 3 alelo mutante (met1011) Rockefeller, carril 4 alelo silvestre (Ile1011), carril 5 alelo mutante (met1011) cepa Cuernavaca.

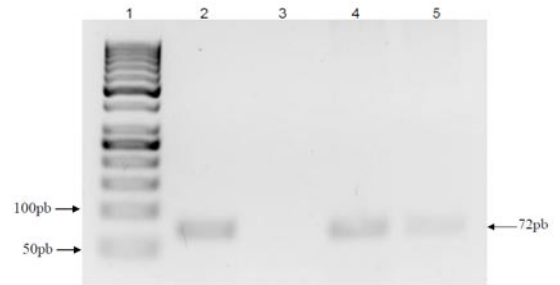


Figura 2. Electroforésis en gel de agarosa al 4%. PCR utilizando los oligonucleótidos para el alelo específico valina por isoleucina, peso esperado de 72 pares de bases. Carril 1 marcador de peso molecular, carril 2 alelo silvestre (valina1016), carril 3 alelo mutante (Ile1016) para la cepa Rockefeller. Carril 4 alelo silvestre (val1016), carril 5 alelo mutante (Ile1016) para la cepa Cuernavaca.

REACTIVIDAD Y CINÉTICA DE DEGRADACIÓN DE ESTEROIDES CON OZONO PARA EL TRATAMIENTO DE AGUA

R. Vallejo-Rodríguez^{1*}, A. Lopez-Lopez², H. Saldarriaga-Noreña¹

¹ Centro de Investigaciones Químicas, C.P. 62209, Cuernavaca, Morelos, México.

² Centro de Investigación y Asistencia en Tecnología y Diseño del Estado de Jalisco

C. P. 44270 Guadalajara, Jalisco, México.

*e-mail: rvall@uaem.mx; rvall75@hotmail.com

Introducción

Los Compuestos Emergentes (CE) están presentes en aguas superficiales y subterráneas [1]. Su eliminación mediante métodos de tratamiento convencional no ha sido fácil [2]. Entre los CE se encuentran los esteroides, los cuales son responsables de la estrogenicidad en el agua y tienen posibles efectos en los ecosistemas [3]. Algunas aguas superficiales son fuente de abastecimiento de agua potable implicando un potencial problema de salud pública, ya que contienen esteroides [4]. Los esteroides se encuentran en concentraciones del orden de partes por billón (ng L^{-1}), lo que representa un problema analítico [5].

La concentración baja de esteroides en muestras ambientales acuosas requiere la aplicación

de métodos de extracción como la extracción en fase sólida (EFS), que permite concentrarlos y aislarlos de la matriz acuosa [6]. Después, se analizan los extractos por cromatografía de líquidos con detección arreglo de diodos (CLAR-DAD)[7] o de gases acoplada con espectrometría de masas (CG-EM) [8].

La degradación de esteroides en agua con procesos convencionales es un problema complejo, debido a las bajas eficiencias obtenidas por estos [1]. Por lo tanto, la ozonización de esteroides presenta como una alternativa de tratamiento y se puede realizar mediante dos vías: la molecular y la vía radical [9]. La cinética de reacción esteroide-ozono puede determinarse por el método de cinética

competitiva para constantes de velocidad de reacción $>1000 \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$ y por cinética absoluta para constantes $<1000 \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$ [10-14]. Esta técnica consiste en poner a reaccionar dos compuestos paralelamente con una velocidad de reacción del mismo orden de magnitud con el oxidante (ozono). La determinación de constantes $>1000 \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$ también puede ser evaluada con el método de flujo parado y flujo secuestrado [14]. Las ventajas de esta última técnica son la evaluación la cinética de degradación en segundos con una optimización de reactivos químicos y evita el uso de técnicas analíticas complejas; sin embargo, los costos altos de los equipos lo hacen inaccesibles a una gran cantidad de laboratorios [9].

Por lo tanto, los objetivos de esta investigación son establecer una metodología de análisis para determinar concentraciones bajas y evaluar los mecanismos de degradación de esteroides con ozono en muestras enriquecidas con esteroides en agua. La ozonización permite la degradación total (mineralización), en minutos de esteroides a niveles que los subproductos no representen un peligro para la salud humana y el medio ambiente, ya que no se generan lodos.

Metodología

Los esteroides 17α -etinilestradiol (EE2) y 17β -estradiol (E2) fueron elegidos como compuestos modelo por ser disruptores endocrinos que pueden provocar una alteración del radio sexual en algunos peces en cantidades de 1 ng

[15,16]. El compuesto de referencia utilizado en la cinética competitiva fue el fenolato de sodio, cuya constante de degradación con el ozono es del mismo orden de magnitud que la de los esteroides [12]. El análisis de los esteroides se realizó mediante técnicas analíticas implementadas con anterioridad [7,8] de acuerdo con el diagrama que se muestra en la figura 1. La EFS de las muestras sometidas a degradación mediante ozono se realizó en cartuchos C18 de 0.5 g., que posteriormente fueron eluidas mediante fraccionamiento. La primera elución (con diclorometano) se sometió al análisis mediante CG-EM (equipo 6890N) para cuantificar los esteroides residuales, con una previa derivatización de los analitos [8] y la segunda fracción se obtuvo con acetonitrilo y se utilizó la técnica CLARIDAD (PROSTAR Varian 230) para analizar el fenolato de sodio [7]. Las curvas de calibración instrumental de los esteroides se establecieron en un intervalo de $1\text{-}100 \text{ ng mL}^{-1}$, [8]. La del fenolato de sodio se establecieron de $100 \text{ a } 0.5 \text{ } \mu\text{g mL}^{-1}$. La medición del ozono se realizó con el método índigo colorimétrico 4500 de Métodos Estandarizados [17]

La solución estándar de ozono (0.25 M) fue obtenida saturando ozono gas en agua MilliQ que fue generado en un equipo Pacific Ozone G11 operado a $20 \text{ }^\circ\text{C}$ a partir de O_2 puro [12].

La implementación de la cinética competitiva se realizó en reactores por lotes, utilizando

matraces volumétricos de 50 mL. La relación esteroide/fenolato de sodio fueron equimolares, con tasas E2/ozono y EE2/ozono de ~5:1 a 1:5, a partir de soluciones estándar de 3.6 mM y 11.8 mM para el E2 y el EE2, respectivamente. Las dosis de ozono fueron agregadas de acuerdo a las tasas calculadas. La técnica de degradación fue realizada conforme al método establecido por Hoigné y Bader, [14]. Los experimentos fueron efectuados por duplicado a pH=6 (via molecular) y T=20 ± 1 °C.

Resultados

Las curvas del E2 y EE2 del método instrumental arrojaron factores de determinación (R^2) de 0.9785 y 0.9806, por lo que la predicción del cálculo para los esteroides en la fase experimental serán aceptables. La figura 2 ilustra las curvas obtenidas mediante el equipo CG-EM. Los límites de detección y de cuantificación fueron de 15.3 y 51.1 $\mu\text{g L}^{-1}$ para el E2 y de 14.6 y 48.7 $\mu\text{g L}^{-1}$, respectivamente. Utilizando un factor de concentración de los analitos de 1000 en la EFS, se asegura la certeza de poder cuantificarlos en el método instrumental, al entrar en el intervalo de la curva.

Los resultados que se generaron durante la cinética competitiva indican que las constantes de degradación fueron de 0.7-2.0 $\times 10^6 \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$ y de ~ 4.5 $\times 10^5$ para el E2 y el EE2, respectivamente, las cuales coinciden a las reportadas por la literatura [11,12,18].

Perspectivas de trabajo

Los experimentos realizados hasta ahora serán validados y se realizará un análisis a profundidad de los datos generados. Los resultados de la investigación son parciales, que serán complementados con experimentos en régimen semicontinuo, donde la solución problema (fase líquida) se encuentra en régimen por lotes y el ozono (fase gas) es suministrado en forma continua.

Referencias

1. Benotti, M.J., Stanford, B.D., and Snyder, S.A. *J. Environ. Qual.* 39 (4), 1196-1200 (2010).
2. Gomes, R.L., Scrimshaw, M.D., Cartmell, E. and Lester, J.N. *Environ. Monit. Assess.* 175, 431-441 (2011).
3. Burkhardt-Holm, P., Segner, H., Burki, R., Peter, A., Schubert, S., Suter, M.J.F., Borsuk, M.E. *CHIMIA.* 62, 376-382 (2008).
4. Carsten, O.P., Dulio, V., Slobodnik, J., De Deckere, E., Kühne, R., Ebert, R.-U., Ginebreda, A., et al. *Sci. Total Environ.* 409, 2064-2077 (2011).
5. Samaras, V.G., Thomaidis, N.S., Stasinakis, A.S., Gatidou, G., Lekkas, T.D. *Intern. J. Environ Anal. Chem.* 90, 219-229 (2010).
6. Gibson, R., Becerril-Bravo, E., Silva-Castro, V., and Jiménez, B. *J. Chromatogr. A.* 1169, 31-39 (2007).
7. Vallejo-Rodríguez, R., López-López, A., Saldarriaga-Noreña, H., Murillo-Tovar,

- M., Hernández-Mena, L., *Am. J. Anal. Chem.* 2, 863-870.
8. Bowden, J., Colosi, D., Mora, D. *J. Chromatogr. B.* 877, 3237-3242 (2009).
9. M.M. Huber, "Elimination of Pharmaceuticals during Oxidative Treatment of Drinking Water and Wastewater: Application of Ozone and Chlorine Dioxide"; Ph. D. thesis, Zurich Swiss Federal Institute of Technology, 2004.
10. Benítez, F.J., Acero, J.L., Real, F.J., Roldán, G. *Chemosphere.* 77 (1), 53-59 (2009).
11. Deborde, M., Rabouan, S., Duguet, J-P. and Legube, B. *Environ. Sci. Technol.* 39 (16), 6086–6092 (2005).
12. Huber, M.M., Canonica, S., Park, G.Y. *Environ. Sci. Technol.* 37, 1016–1024 (2003).
13. Gurol, M.D. and Nekouinaini, S. *Ind. Eng. Chem. Fundam.* 23, 54-60 (1984).
14. Hoigné, J. and Bader, H. *Water Res.* 17, 173-183 (1983).
15. Vajda, A.M., Barber, L.B., Gray, J.L., López, E.M., Woodling, J.D. and Norris, D.O. *Environ. Sci. Technol.* 42, 3407-3414 (2008).
16. Fent, K., Weston, A.A. and Caminada, D. *Aquat. Toxicol.* 76, 122-159 (2006).
17. APHA, AWWA, WEF, Standard Methods for the Examination of Water and Wastewater (American Water Works Association, Washington, DC, ed. 21, 2005).
18. Vallejo-Rodríguez, R., Murillo-Tovar, M., Navarro-Laboulais, J., León-Becerril, E., López-López, A. *J. Environ. Chem. Eng.* 2, 316–323 (2014).

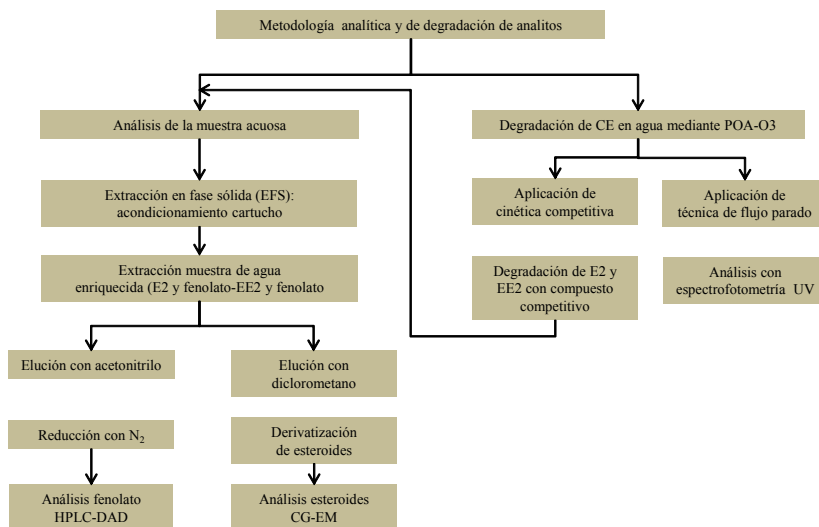


Figura 1. Metodología analítica implementada en la investigación.

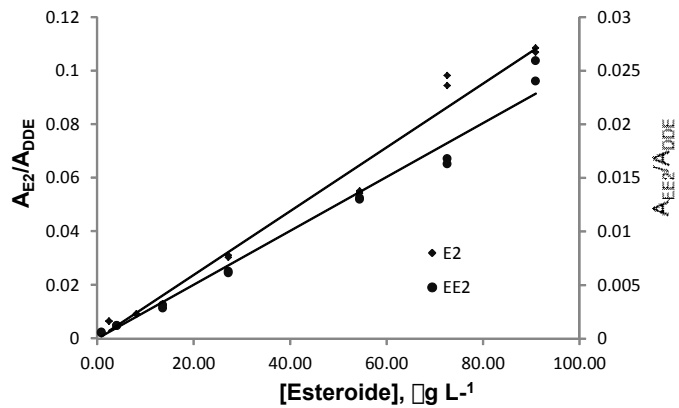


Figura 2. Curvas de calibración instrumental del E2 y EE2 mediante CG-EM

EVALUACIÓN DE LA ADAPTACIÓN DE BACTERIAS HALÓFILAS EN MEDIOS ENRIQUECIDOS CON SALES DE INTERÉS ASTROBIOLÓGICO

Eya C. Rodríguez Pupo, Sandra I. Ramírez Jiménez

Centro de Investigaciones Químicas, UAEM

eyarguez@uaem.mx

Introducción

Los organismos extremófilos son aquellos que habitan en ambientes extremos. Ellos pueden crecer y desarrollarse en condiciones que para la mayoría de los organismos serían letales. Entre los microorganismos extremófilos se encuentran los que se desarrollan en ambientes con temperaturas muy elevadas (termófilos) o muy bajas (psicrófilos), con alta salinidad (halófilos), alta alcalinidad (basófilos) o alta acidez (acidófilos)⁽¹⁾. Los microorganismos halófilos pueden clasificarse en función de sus requerimientos de cloruro de sodio (NaCl). Los halófilos ligeros crecen a concentraciones entre 0.2 y 0.85 M; los halófilos moderados crecen entre 0.85 y 3.4 M y los halófilos extremos

requieren concentraciones superiores a 3.4 M de NaCl⁽²⁾.

El estudio de las estrategias de adaptación de las bacterias halófilas ha adquirido gran relevancia en los últimos años. Estas estrategias las utilizan para tolerar las altas concentraciones salinas a las que son expuestas y pueden consistir en la acumulación de algunos iones en su citoplasma o de algunos osmolitos o solutos compatibles. Los solutos compatibles no interfieren con el metabolismo celular, ya que su función es puramente osmótica^(3,4,5). Este mecanismo de adaptación ha permitido el empleo de bacterias halófilas como modelo de investigación para determinar el potencial de habitabilidad de ambientes extraterrestres

como el planeta Marte y los satélites helados Europa y Ganímedes.

Las misiones de exploración espacial Galileo, Cassini, Vikingo, Pathfinder y Fénix han evidenciado la presencia de sales en algunos objetos planetarios⁽⁶⁾, por ejemplo, en el subsuelo de Marte se ha encontrado MgSO_4 , CaSO_4 , $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$ y FeSO_4 , mientras que en los satélites helados Europa y Ganímedes se ha identificado NaSO_4 y MgSO_4 ^(7,8). Por ello, es creciente el interés de explorar el desarrollo de microorganismos halófilos en medios modificados con estas sales. El propósito del presente proyecto es evaluar el crecimiento de la especie bacteriana *Halomonas halodurans* en NaCl , MgSO_4 , CaSO_4 , $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$, FeSO_4 y NaSO_4 . Los resultados permitirán determinar si esta bacteria es capaz de adaptarse a diferentes concentraciones de éstas y por lo tanto si sería capaz de desarrollarse en los planetas o satélites en las que esas sales se encuentran. Los resultados obtenidos servirán de base para proponer detalles sobre el mecanismo de adaptación utilizado por *H. halodurans*, además de permitirnos presentar argumentos sobre las posibilidades de habitabilidad de algunos escenarios de interés astrobiológico.

Métodos

Se realizaron cinéticas de crecimiento de la bacteria halófila *Halomonas halodurans* (DSM 5160) modificando su medio nominal con 1.37 M y 2.74 M de NaCl . También se realizó una cinética donde al medio nominal

se le eliminó completamente el NaCl . Se determinaron las concentraciones óptima y máxima de crecimiento de la bacteria en NaCl . El crecimiento bacteriano se determinó por cambios en la densidad óptica (D.O.) del medio, utilizando un espectrofotómetro (Agilent 8453) y realizando las lecturas a 630 nm en intervalos de tiempo regulares. Adicionalmente se realizó el conteo de unidades formadoras de colonias (U.F.C.) en las condiciones de óptimo crecimiento reportadas para NaCl .

Resultados

En la Figura 1 se muestran las cinéticas de crecimiento de *H. halodurans* para 0.0 M, 1.37 M y 2.74 M de NaCl . El gráfico muestra la variación de la biomasa en el tiempo y se observa que la fase exponencial de esta bacteria es mayor a una concentración de 1.37 M de NaCl .

La transformación a escala logarítmica de los valores de D.O. correspondientes a la fase exponencial, permiten determinar los parámetros cinéticos como la velocidad específica de crecimiento (μ) y tiempo de duplicación (t_d) para las condiciones estudiadas (Tabla 1).

En la Figura 2 se presentan los valores de μ para cada concentración salina, expresada como a_w . El valor de a_w disminuye al incrementarse la concentración de NaCl en el medio. Se observa que el mayor valor de μ

corresponde a una concentración de 1.37 M de NaCl ($a_w = 0.942$). Los resultados indican que con el aumento en la concentración de NaCl se aprecia un aumento en t_d (Tabla 1).

La Figura 3 muestra la correlación entre los valores de D.O. y U.F.C en medio modificado con 1.37 M de NaCl y permite determinar el valor de U.F.C. que corresponde a un determinado valor de D.O., ya que las cinéticas a realizar se monitorean por cambios en la D. O.

Conclusiones

La bacteria *H. halodurans* constituye un modelo para el estudio de los mecanismos de adaptación utilizados por bacterias halófilas en condiciones hipersalinas, ya que es capaz de tolerar elevadas concentraciones de NaCl. Se determinó que la concentración de óptimo crecimiento es 1.37 M de NaCl. Este resultado nos indica que a esa concentración la bacteria *H. halodurans* crece y se duplica más rápido. Se determinó también que la máxima concentración en la que *H. halodurans* presenta crecimiento es 2.74 M de NaCl. Si esta concentración se compara con la concentración promedio del agua de mar en los océanos terrestres (0.60 M), se puede determinar el umbral de tolerancia salina para esta bacteria. El conjunto de esta información se puede utilizar para elucidar el mecanismo de adaptación que utiliza la bacteria para poder contender al estrés salino.

Perspectivas del proyecto

Determinar las condiciones de óptimo y máximo crecimiento de *H. halodurans* y *Halomonas magadiensis* en $MgSO_4$, $CaSO_2$, $FeSO_4$, $Fe_2(SO_4)_3$, $NaSO_4$ y $MgSO_4$. Realizar la identificación de los solutos compatibles que cada bacteria utiliza para poder contender al estrés osmótico. La extracción de los solutos compatibles se realizará mediante la técnica de dispersión de matriz en fase sólida para posteriormente ser analizados por resonancia magnética nuclear y espectrometría de masas. Estas técnicas permitirán identificar químicamente y cuantificar a los solutos compatibles que *H. halodurans* y *H. magadiensis* utilicen para resistir a las elevadas concentraciones de sales a las que serán expuestas.

Referencias

1. Rothschild, L.J., Mancinelli, R.L. *Nature*. 409, 1092-1101 (2001).
2. DasSarma, S., Arora, P. *Enciclopedia of Life Sciences*. 1-9 (2001).
3. Roberts, M.F. *Saline Systems*. 1(5), 1-30 (2005).
4. Van den Burg, B. *Current Opinion in Microbiology*. 6, 213 – 218 (2003).
5. Margesin, R.; Schinner, F. *Extremophiles* 5, 73-83 (2001).
6. Wänke, H., Brückner, G., Dreibus, G., Rieder, R. and Ryabchikov, I. *Space Sci Rev*. 96, 317–330 (2001).
7. Clark, B.C., Morris, R.V., *Earth Planet Sci Lett*. 240, 73–94 (2005).
8. Montoya, L., Ramírez, S.I. *Ciencia y Desarrollo*. 8-13 (2013).

Tablas

Tabla 1. Comparación de los parámetros cinéticos de *Halomonas halodurans* en distintas concentraciones de NaCl.

Concentración de NaCl (M)	Velocidad específica de crecimiento (μ)	Tiempo de duplicación (t_d)
0.00	0.206	3.36
1.37	0.217	3.19
2.74	0.112	6.19

Figuras

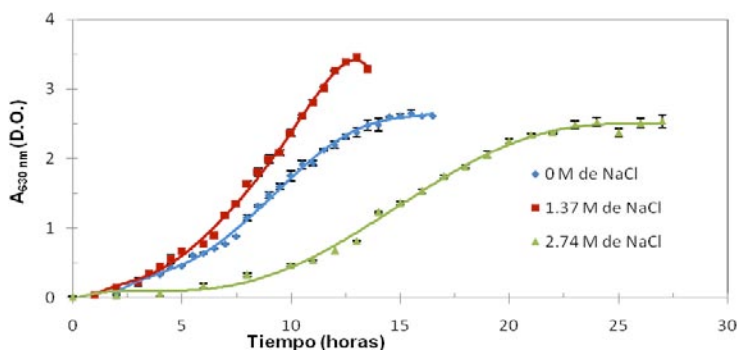


Figura 1. Cinéticas de crecimiento de *Halomonas halodurans* en medio nominal modificado con NaCl.

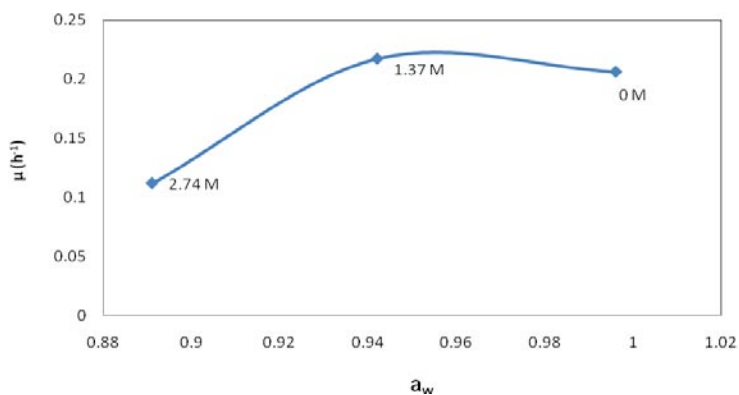


Figura 2. Velocidad específica de crecimiento (μ) en función la actividad de agua a_w para *H. halodurans*.

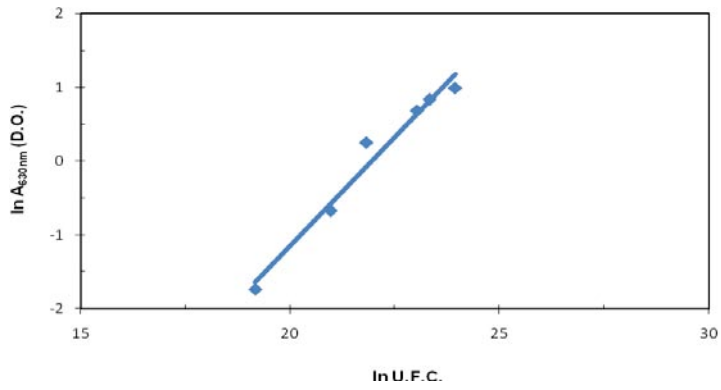


Figura 3. Correlación de ln D.O. con ln U.F.C. para *H. halodurans* en medio modificado con 1.37 M de NaCl.

CARACTERIZACIÓN DE LA RESISTENCIA DE *Aedes aegypti* A PLAGUICIDAS ORGANOFOSFORADOS

Luis Enrique Rojas Espinoza¹, Edgar Dantán González²

dahaka_189@hotmail.com

¹ Facultad de Ciencias Biológicas, Universidad Autónoma del Estado del Morelos

² Centro de Investigación en Biotecnología, Universidad Autónoma del Estado del Morelos

Introducción

El dengue es una infección transmitida por mosquitos que se presenta en todas las regiones tropicales y subtropicales del planeta. El vector principal del dengue es el mosquito de la especie *Aedes aegypti* [1]. El virus se transmite a los seres humanos por la picadura de mosquitos hembra infectadas. En años recientes, la transmisión ha aumentado de manera predominante en zonas urbanas y semiurbanas y se ha convertido en un importante problema de salud pública [2], por lo que en este trabajo se determinarán los niveles de susceptibilidad y/o resistencia a insecticidas, ya que es un problema serio para las operaciones de control sobre esta especie, en dos cepas de este mosquito: cepa

Chamilpa, cepa recolectada al norte de la ciudad de Cuernavaca; cepa Rockefeller, cepa de referencia susceptible.

Metodología

Para ello se realizarán bioensayos, siguiendo la metodología de la Organización Mundial de la Salud [3], donde se expondrán larvas en 2 y 3 estadio a diferentes concentraciones de temefos en su forma comercial (Abate) en contenedores de 15x15cm, se dejarán 24 horas y se contará la mortalidad, esto con 3 repeticiones de cada concentración y un blanco donde no se adicionará insecticida. Al finalizar en bioensayo se separarán los organismos en sobrevivientes y susceptibles, se extraerán proteínas de ellos y se correrán en

un gel de poliacrilamida al 10%, al finalizar se lavarán con una solución de Tritón con PBS (relación 1:9 v/v) y se pondrán en contacto con una solución de α y β naftilacetato más Fast Garnet hasta que alcance una coloración óptima y así poder visualizar las diferentes formas de esterases.

Resultados

El resultado de los bioensayos nos dijo que la CL50 de la cepa Cuernavaca fue de 4.49 ppm, mientras que la CL90 fue de 9.10 ppm, esto es muy elevado para una cepa que no ha estado bajo presión de selección, en comparación de las cepas silvestres. En tanto la cepa Rockefeller dio una CL50 0.41 ppm y la CL90 de 0.98 ppm, al ver otros trabajos se puede pensar que esta cepa ya no es del todo confiable para ser utilizada como cepa de referencia susceptible, ya que sus concentraciones letales son algo elevadas en comparación con otras ya reportadas.

Después de realizar las pruebas bioquímicas se observó una alta actividad en diferentes isoformas de esterases en la cepa Cuernavaca en las larvas sobrevivientes mientras que en las larvas que no sobrevivieron no se presentó ninguna isoforma, esto podría decirnos la importancia de las enzimas en el papel de la detoxificación de insecticidas, pues estas están asociadas a la resistencia de los insecticidas organofosforados en diferentes especies de insectos. En la cepa Rockefeller no se encontraron isoformas de esterases ni en los organismos sobrevivientes ni en los organismos susceptibles.

Conclusiones

Se observó la presencia de diferentes isoformas de esterases en los organismos resistentes de la cepa Cuernavaca, mientras que en los organismos susceptibles no se encontró ninguna. En la cepa Rockefeller no se encontró ninguna isoforma de esterasa tanto en las larvas resistentes como en las larvas susceptibles. Debemos tener en cuenta que estas cepas no están bajo presión de selección, por tanto las poblaciones silvestres podrían estar presentando este mismo patrón debido al uso indiscriminado de algunos insecticidas, por lo tanto se debe monitorear la susceptibilidad a insecticidas en las poblaciones morelenses de *Aedes aegypti* para brindar información necesaria que ayude para la toma de decisiones sobre el uso correcto de insecticidas, con el objetivo de utilizar menos insecticida para disminuir la presión de selección sobre las poblaciones resistentes.

Referencias

1. Harwood, R.F. & M.T. James. Entomología Médica y Veterinaria. (1987). [Primera Edición]
2. Thirión J. I. "*Aedes aegypti* (Diptera: Culicidae) como transmisor del dengue en México." Tesis UNAM Facultad de Ciencias. 2002.
3. WHO. "Resistance of vectors and reservoirs of disease to pesticides." (Tech. Rep. Series No 737, 87 pp. World Health Organization, Geneva, 1981)

DEGRADACIÓN Y DISMINUCIÓN DE GENOTOXICIDAD DEL ENDOSULFÁN POR ACTIVIDAD FÚNGICA

Romero-Aguilar, Mariana^{1,2}; Sánchez-Salinas, Enrique¹; Tovar Sánchez, Efraín³ y Ortiz-Hernández, Ma. Laura¹

¹Laboratorio de Investigaciones Ambientales, Centro de Investigación en Biotecnología. Universidad Autónoma del Estado de Morelos. Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa, C. P. 62210, Cuernavaca, Mor. México. E mail: marianara@uaem.mx

²Facultad de Química. Universidad Autónoma del Estado de México. Paseo Colón esquina Paseo Tollocan, S/N. C.P. 50120, Toluca, México

³Departamento de Evolución, Centro de Investigación en Biodiversidad y Conservación, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Ciudad Universitaria 1001 Cuernavaca, Morelos

Introducción

El endosulfán (6,7,8,9,10,10-hexachloro-1-,5,5a,6,9,9a-hexahidro-6,9-metano-2,4,3-benzodioxatiepina-3-oxido) es un insecticida organoclorado ampliamente utilizado en México (1). Autorizado para cultivos de alfalfa, algodón, calabaza, caña de azúcar, cebada, fresa, frijol, jitomate y maíz, entre otros (2). Su composición química se conforma de dos isómeros: α y β endosulfán, en una proporción 7:3, respectivamente (1, 3). En el ambiente, el β -endosulfán puede sufrir una transformación química a α -endosulfán, sin que esta reacción sea reversible, principalmente se ha observado en el suelo y en la superficie de los cuerpos de agua. Se ha demostrado que el α -endosulfán se volatiliza

dos veces más que el β -endosulfán, por lo tanto, su conversión provoca que se libere una mayor concentración de plaguicida a la atmósfera y genera su dispersión a largas distancias desde el punto de aplicación original (1, 3, 4, 5).

Los daños provocados por el endosulfán en diversos organismos han sido investigados ampliamente y se ha demostrado que sus características químicas le confieren toxicidad y genotoxicidad. En anfibios, su efecto se manifiesta como agente disruptor de hormonas, suprimiendo la acción de la testosterona y 17 β -estradiol, provocando una baja en la tasa de natalidad de comunidades animales silvestres (5). En peces produce alteraciones en bran-

quias, necrosis hepática y de túbulo renales, en organismos expuestos a concentraciones subletales se acumula en tejido graso (6). En mamíferos, suprime la concentración de testosterona y 17β -estradiol e incrementa la producción de tiroxina en ratas neonatales; en *Phoca vitulina* y *Halichoerus grypus* el endosulfán se acumula en tejido graso y se transfiere al producto, y posterior al parto, la transferencia es a través de la leche materna (1). Los efectos en humanos principalmente se manifiestan en el retraso de la madurez sexual e interfiere con la síntesis de hormonas masculinas en niños, además de disminuir considerablemente la producción de espermatozoides. Es un antagonista de los receptores GABA abiertos por canales de cloro y un inhibidor de Ca^{2+} , Mg^{2+} ATPasa, además de problemas hepáticos, renales, cardiovasculares, edema pulmonar, depresión respiratoria, irritación gastrointestinal, coagulación intravascular y daños genotóxicos (6).

Estas propiedades han provocado la regulación del uso del endosulfán y su prohibición en la Unión Europea y Estados Unidos en la década pasada. Sin embargo, fue hasta abril de 2011 con su inclusión en el Anexo A del Convenio de Estocolmo que se limitó su uso en América Latina (7). Esta situación ha provocado la necesidad de desarrollar diferentes métodos para abatir los efectos ambientales del endosulfán, entre los que destacan los tratamientos biológicos que emplean organismos aislados de ambientes contaminados

con este organoclorado y que son capaces de utilizarlo como fuente de carbono, proceso que permite su degradación.

El objetivo de este trabajo fue realizar pruebas de degradación del endosulfán utilizando una cepa fúngica aislada de lodos residuales y determinar sus efectos genotóxicos en lombrices de tierra (*Eisenia foetida*).

Métodos

Se colectaron lodos residuales de una planta de tratamiento de aguas residuales industriales y se llevó a cabo la aclimatación durante 5 semanas a una temperatura de 30°C y agitación a 150 rpm. Semanalmente se agregó una solución endosulfán grado comercial, a una concentración final de 150 mg/L. Posteriormente, se transfirió 1 mL de lodo a 80 mL de medio de sales minerales (MSM), bajo las condiciones antes mencionadas. Por último, se realizó un cultivo fúngico en agar papa dextrosa hasta obtenerse cepas diferenciadas. Se aislaron 26 cepas fúngicas de las cuales se seleccionó la cepa CHE 23 que pertenece al género *Penicillium* y se denominó *Penicillium* sp. CHE 23.

Para la cinética de degradación, se inocularon matraces Erlenmeyer de 150 mL con 50 mL de medio de sales minerales, sin glucosa, y con $0.03\text{ g} \pm 0.002\text{ g}$ de biomasa fúngica (peso seco). Los matraces se incubaron durante 144 h, a una temperatura de 30°C , con agitación a 150 rpm. Se establecieron

los siguientes tratamientos por triplicado: MSM+endosulfán 50mg/L; MSM+ *Penicillium sp.* CHE 23 y MSM+endosulfán 50 mg/L+ *Penicillium sp.* CHE 23. Se cuantifico la concentración del endosulfán al tiempo inicial y a las 144 horas.

Se llevaron a cabo pruebas de toxicidad aguda poniendo en contacto durante 48 horas a 10 lombrices de la especie *Eisenia foetida* con 10 mL del sobrenadante proveniente de los tratamientos descritos con anterioridad y con tres repeticiones. Adicionalmente, se analizó la genotoxicidad del endosulfán y el resultado de su degradación con la prueba cometa, utilizando 10 organismos de la especie *Eisenia foetida* expuestos durante 12 horas al sobrenadante de los tratamientos de degradación antes descritos.

Resultados

La concentración inicial del endosulfán fue de 56.73 mg/L, posterior a la cinética de remoción con la cepa *Penicillium* (CHE 23), la concentración disminuyó hasta 2.9 mg/L, lo que representa un 94.87% de remoción.

Los resultados de la toxicidad aguda muestran que los organismos expuestos al MSM+endosulfán al tiempo inicial y después de 144 horas de incubación tienen una mortalidad del 100% a las 48 horas de exposición. Sin embargo, los organismos expuestos al sobrenadante obtenido posteriormente al tratamiento con la cepa fúngica, mostraron

una mortalidad de 0% a las 48 horas de exposición.

El daño genotóxico expresado en longitud de cauda de células de lombrices expuestas con endosulfán a una concentración de 50 mg/L fue de $32.76 \pm 1.34 \mu\text{m}$, mientras que los organismos expuestos al tratamiento con la cepa fúngica posterior a 144 horas fue de $18.11 \pm 0.53 \mu\text{m}$, indicando una diferencia significativa ($P < 0.05$) del efecto del endosulfán entre ambos tratamientos.

Conclusiones

Diferentes trabajos han demostrado que el endosulfán es altamente tóxico para diversas especies de organismos, incluido el hombre. Se ha evaluado la capacidad de degradación microbiológica del endosulfán utilizando principalmente el uso de bacterias. Los resultados mostraron que la cepa fúngica *Penicillium sp.* CHE 23 tiene la capacidad de remoción del endosulfán. La eliminación de la genotoxicidad permite inferir que no se generó sulfato endosulfán que es uno de los metabolitos secundarios altamente tóxico. *Eisenia foetida* es un organismo útil como un indicador de toxicidad en los procesos de biodegradación.

Referencias

1. Kataoka, R., Takagi, K., Sakakibara, F. *J Pestic Sci.* 35(3), 326–332 (2010).
2. CICOPLAFEST (Comisión Intersecretarial para el Control del Proceso y Uso de Pla-

- guicidas, Fertilizantes y Sustancias Tóxicas) Catálogo Oficial de Plaguicidas. SAGARPA. México D.F. 481 pp. (2004).
3. Sarat, N., Singh, D. K. *Biodegradation*. 22(5), 845-857(2010).
 4. Castillo, J. M., Casas, J., Romero, E. *Science of the Total Environment*. 412-413, 20–27(2011).
 5. Hussain, S., Arshad, M., Saleem, M., Zahir, Z. A. *World J Microbiol Biotechnol*. 23, 939–945(2007).
 6. Ballesteros, M. L., Bianchi, G. E., Carranza, M., Bistoni, M. A. *J Environ Sci Health B* 42, 351–357(2007)
 7. Romero-Aguilar, M., Sánchez-Salinas, E., Ortiz-Hernández, M. L. En: *Los plaguicidas en México: Aspectos generales, toxicológicos y ambientales*. Ortiz-Hernández, M.L., Sánchez-Salinas E., Folch-Mallol, J.L., Olvera-Velona, A., Dantán-González, E. (comps). (Univ Autónoma del Estado de Morelos 2014). pp 27-52

EVALUACIÓN DE UNA LIBRERÍA METAGENÓMICA EN BÚSQUEDA DE ACTIVIDADES NOVEDOSAS PARA DEGRADAR COMPUESTOS TÓXICOS AROMÁTICOS

Ayixon Sánchez Reyes¹, Ramón Alberto Batista García¹,
Jorge Luis Folch Mallo²

jordifo@gmail.com

¹Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca, Morelos, México.

²Centro de Investigación en Biotecnología, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca, Morelos, México.

Introducción

Entender las vías catabólicas por las cuales los microorganismos pueden asimilar y mineralizar compuestos aromáticos -como ciertos hidrocarburos, plaguicidas, retardantes de llamas etc -constituye una clave en el desarrollo de estrategias efectivas de biorremediación. En este sentido la ruta de degradación del ácido fenilacético (PAA) se ha estudiado extensamente, ya que es una vía de convergencia para la degradación de una multiplicidad de compuestos aromáticos contaminantes ambientales, tales como el estireno y el etilbenceno. Otras especies aromáticas confluyen también en esta vía (fenilacetaldehído, feniletilamina, n-fenilalcanos con número impar de carbonos, ácido

tropico entre otros). Todos estos compuestos se metabolizan posteriormente a través de una ruta central que involucra fenilacetil-Coa, el cual constituye el inductor de toda la vía. El primer paso en la degradación aeróbica de PAA involucra activación del ácido mediante una reacción de tioesterificación (fenilacetil-coenzima A ligasa convierte PAA a fenilacetil-CoA, sustrato clave para las reacciones posteriores). Los grupos de genes necesarios para el catabolismo de PAA han sido caracterizado en *Escherichia coli* y en especies de *Pseudomonas*, incluyendo las cepas *Pseudomonas putida* U y *Pseudomonas* sp.Y2 (1).

Nuestro trabajo se concentra en el análisis de una tioesterasa putativa cuya función biológica

predicha se relaciona con la degradación de contaminantes ambientales como el 4-clorobenzoato y compuestos aromáticos naturales como el PAA, partiendo del supuesto que la sobreexpresión de la enzima *Thyest_ar* estimula la degradación de compuestos aromáticos tóxicos que se degradan por vías convergentes a la vía de degradación del ácido fenilacético o el 4- clorobenzoato.

Métodos

Se llevó a cabo el escrutinio funcional de la actividad esterolítica, en una librería metagenómica proveniente de lodos activados, basado en la degradación de la tributirina. Posteriormente se identificó una clona positiva la cual fue secuenciada en su totalidad, para dilucidar la secuencia de bases responsable de la actividad biológica observada. Se identificó un gen (*thyest_ar*) que codifica para una tioesterasa putativa, el cual fue clonado y expresado en células de *E. coli* BL21 de acuerdo con el método recomendado por (2). Con el objetivo de determinar las relaciones filogenéticas de la proteína putativa *Thyest_ar*, su secuencia predicha se sometió a un alineamiento múltiple de secuencias (AMS) haciendo uso de la plataforma <http://escript.ibcp.fr/ESPrift/ESPrift/>, para lo cual se tomaron las secuencias con mayor parentesco según alineamientos locales realizados en la plataforma BLAST con la base de datos del Protein Data Bank.

Para determinar la familia a la que pertenece la secuencia en estudio, se seleccionaron 50

secuencias relacionadas en la base de datos ThYme (<http://www.enzyme.cbirc.iastate.edu>), con las que se construyó un árbol filogenético utilizando el método de máxima verosimilitud.

Para corroborar los parentescos evolutivos con proteínas cuya función se atribuye a la degradación de compuestos orgánicos, se generó un modelo tridimensional basado en homología. Se envió la secuencia al servidor *I-TASSER* (zhanglab.ccmb.med.umich.edu/I-TASSER), el cual emplea además restricciones termodinámicas en sus diseños.

Para determinar el papel del gen *thyest_ar* en la degradación de compuestos aromáticos modelo, se evaluaron 5 concentraciones de inductor IPTG (desde 0.2 mM hasta 1mM) y se cultivaron células transformadas en presencia de PAA, ácido tiobenzoico (AT) y benzoato de sodio (BS), en medio LB con ampicilina por 24 horas. Posteriormente se colectaron las células y el sobrenadante para análisis de proteínas y recolección de los espectros de absorción UV-Vis en el rango de 200 a 700 nm. Cada valor final fue tomado como la contribución de 5 medidas independientes. Alternativamente se evaluó el crecimiento en medio mínimo M9 de las cepas recombinantes inducidas con 0.2mM de IPTG, en presencia de benzoato de sodio, ácido tiobenzoico y ácido fenilacético como única fuente de carbono.

Resultados

Se logró la sobreexpresión de la enzima recombinante *ThyesT_ar* (Figura 1). R1 y R2 son dos clonas recombinantes independientes, BL21 es la cepa silvestre. La cepa silvestre muestra una banda a la misma altura que las cepas recombinantes (14.2 kd) pero de menor intensidad.

No se observó ningún efecto sobre el BS en las sobreexpresantes comparadas con la cepa silvestre, lo cual podría indicar que la enzima *ThyesT_ar* no está involucrada en el metabolismo de este sustrato. Se observó un marcado efecto en la disminución del ancho de banda de las sobreexpresantes respecto a la cepa silvestre y el medio de cultivo sin microorganismo para el AT así como para el PAA. Se confirmó que las cepas transformantes crecen mejor en presencia de PAA como única fuente de carbono, que frente al BS o el AT cuando se cultivan en medio mínimo M9

(BS-triángulos, AT-asteriscos, PAA-rombos, BL 21 silvestre en medio mínimo- puntos redondeados)

Conclusiones

La sobreexpresión de la enzima *ThyesT_ar* estimula el metabolismo de los compuestos aromáticos PAA y AT, degradándolos por vías convergentes a la vía de degradación del PAA.

Agradecimientos

Este trabajo cuenta con el apoyo del proyecto 153789-B del CONACYT.

Referencias

1. Luengo, J.M., García, J.L., Olivera, E.R. *Mol. Microbiol.* 39,1434 –1442. (2001).
2. Ferrández, A., Miñambres, B., García, B., Olivera, E.R., Luengo, J.M., García, J.L., Díaz, E. *J. Biol. Chem.* 273, 25974 –25986. (1998).

Figuras

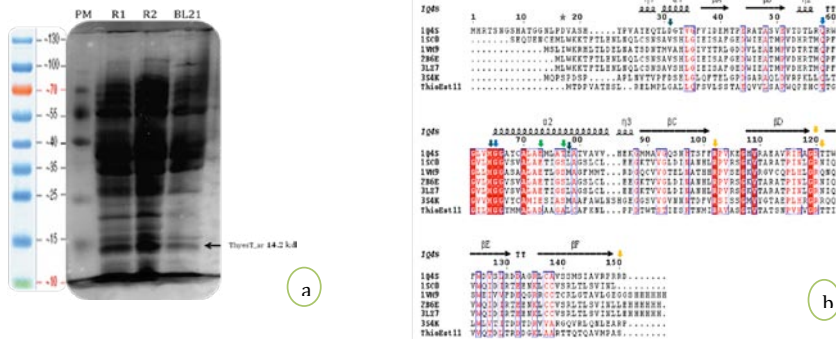


Figura 1. Expresión de la enzima *ThyesT_ar* (panel a) y AMS para *Thyest_ar* con 6 tioesterasas con estructura tridimensional conocida (panel b).

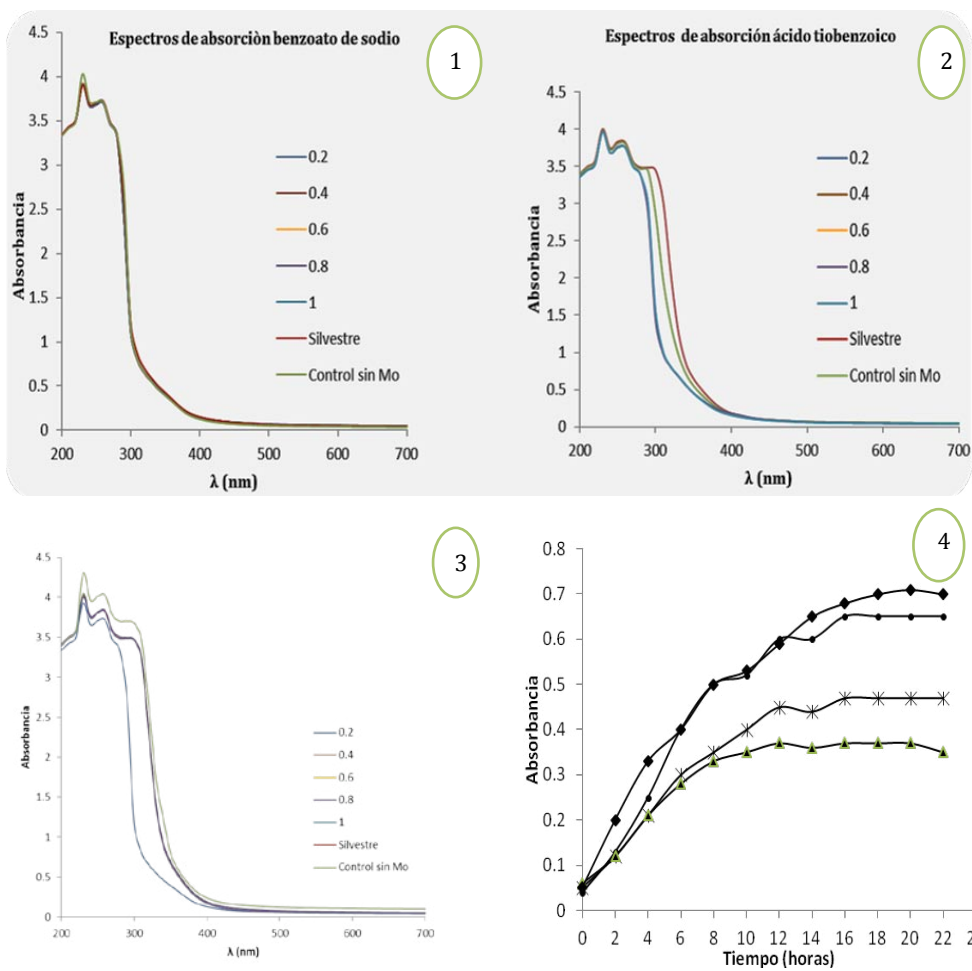


Figura 2. Barrido de exploración con el sobrenadante de los cultivos inducidos en presencia de BS, AT, PAA (paneles 1, 2 y 3 respectivamente) y crecimiento en medio mínimo M9 (panel 4).

OBTENCIÓN DE ETANOL A PARTIR DEL ALMIDÓN DE PAPA (*SOLANUM TUBEROSUM*)

^aGloria Sandoval Flores*, ^aSofía Alvarado Reyna, ^aSimón Josías Téllez,
^aGuadalupe Concepción Rodríguez Castillejos.

^aUniversidad Autónoma de Tamaulipas Unidad Reynosa-Aztlán, calle 16 y lago de chápala

Fracc. Aztlán cp.88740 Reynosa, Tam.

*gloriasfmx@yahoo.com.mx

Introducción

A consecuencia del agotamiento de energías fósiles y de la contaminación del medio ambiente, se ha generado un gran interés a utilizar y producir energías renovables, en muchos países del mundo. Los biocombustibles surgen de la creciente necesidad de preservar el medio ambiente; así como también para el máximo aprovechamiento de los recursos agrícolas, sobre todo de los subproductos generados al ser sometidos a algún proceso. Muchos son los beneficios que nos ofrece el uso de los biocombustibles, entre los más importante son: la reducción de las emisiones atmosféricas, la preservación del medio ambiente, se presenta como una alternativa viable ante los combustibles fósiles, que son

cada vez más caros y que poco a poco se van agotando [1]. El bioetanol es un alcohol de origen vegetal, producido a partir de la fermentación de los azúcares, almidón o material celulósico, que se encuentran en productos como el maíz, cebada, trigo, caña de azúcar, papa, sorgo u otros cultivos energéticos [2]. Se comienza con la separación, limpieza y molienda de la materia prima. Después se lleva a un pre-tratamiento químico llamado hidrólisis, para romper la cadena de almidón en cadenas de glucosa simples y por último el azúcar se fermenta usando levaduras [3]. Desde 1970, Brasil y Estados Unidos, son los que encabezan la producción en masa de este biocombustible utilizando los cultivos de caña azucarera y maíz, respectivamente. El

presente estudio toma este enfoque para el análisis de la hidrólisis ácida como una ruta para el rompimiento de la cadena de almidón hacia glucosa y su fermentación a etanol, como una fuente alternativa de energía.

Metodología

La selección de la materia prima fue tomar la papa (*Solanum Tuberosum*) como fuente de almidón y se obtuvo en forma comercial, demostrando de forma gravimétrica que por cada 100 gr de papa contiene 15 gr de almidón.

Pre-tratamiento. Se realizó un tratamiento químico, que consistió en una hidrólisis ácida, para romper la cadena del almidón y obtener cadenas de glucosa, seguido de una neutralización con hidróxido de sodio hasta un pH de 4.5 o 5, para posteriormente fermentar.

Fermentación. Consistió en la fermentación alcohólica por medio de levaduras, de la glucosa liberada durante el pre-tratamiento del almidón. La levadura contiene una enzima llamada invertasa, que actúa como catalizador ayudando a convertir los azúcares en glucosa y fructuosa.

Destilación. Se utilizó un rotavapor (IKA, modelo RVIO digital), utilizado para operar en condiciones de vacío, la muestra se introdujo en un matraz bola de 1L a temperatura no mayor a 58 °C, con una rotación de 40

rpm para que el calentamiento sea homogéneo y dejándolo con un tiempo aproximado de 1 hora.

Identificación del etanol.

Métodos cualitativos. Se realizaron diversos análisis cualitativos para confirmar la ruta de la reacción hacia un estado básico, mediante las siguientes pruebas:

Determinación de rompimiento de cadena del almidón.

- **Prueba de Lugol.** Consistió en una solución de Yodo (I_2) y Yoduro de Potasio (KI), agregándose de gota en gota hasta notar un cambio de color de amarillo a un amarillo oscuro.

Determinación de azúcares reductores.

- **Prueba de Fehling.** Se basa en el carácter reductor de los monosacáridos y de la mayoría de los disacáridos (excepto la sacarosa), si el glucósido que se investiga es reductor, se oxidará dando lugar a la reducción del sulfato de cobre (II) de color azul.

Determinación del alcohol.

- **Índice de Refracción.** Se refiere a la medida que determina la reducción de la velocidad de la luz al propagarse por un medio homogéneo.
- **Prueba de Sodio.** Consiste en reaccionar la muestra con sodio para liberar iones hidrógeno, que indica la presencia de alcoholes.

- **Prueba de Lucas.** Consiste en la velocidad de la aparición de una fase insoluble que indica el tipo de alcohol que se obtiene. Si aparece una capa insoluble en 10 minutos o no hay reacción es un alcohol primario, si aparece una capa insoluble en 1 a 5 minutos es un alcohol secundario y si aparece una capa insoluble en menos de 1 minuto es un alcohol terciario.

Método Cuantitativo

Cromatografía líquida de alta eficiencia (HPLC). Es una técnica utilizada para separar los componentes de una mezcla basándose en diferentes tipos de interacciones químicas entre las sustancias analizadas y la columna cromatográfica, en una Cromatografía Líquida de Alta Eficiencia (HPLC). Su principio se basa, en que el compuesto pasa por la columna cromatográfica a través de la fase estacionaria mediante el bombeo de líquido (fase móvil) a alta presión.

Resultados.

Pre-Tratamientos. Las condiciones de tratamiento se observan en la tabla 1, donde se varió la cantidad de biomasa, levadura y volumen de ácido, para obtener las condiciones óptimas de hidrólisis que reflejaran un alto contenido de alcohol.

Fermentación. Las muestras realizadas a diferentes cantidades de biomasa y levadura, fueron hidrolizadas con ácido sulfúrico (H_2SO_4) a 2 M, todas con volumen de ácido proporcional al peso de la biomasa utilizada y neutralizando con hidróxido de

sodio (NaOH) a 2 M para mantener un pH de 5.

Destilación. Al destilar 4 fermentaciones con diferentes cantidades de biomasa y levadura. El mejor volumen obtenido de etanol fue de 65 ml en 50 g de biomasa.

Obtención e Identificación del etanol.

Métodos Cualitativos.

Determinación de rompimiento de cadena del almidón.

- **Prueba de Lugol** se observó un cambio de coloración de amarillo a un amarillo oscuro que indica el rompimiento de la cadena del almidón.

Determinación de Azúcares.

- **Prueba de Fehling** la determinación de la presencia de azúcares reductores se observó en un cambio de color de azul marino a un azul claro, el color azul determina que la muestra contiene azúcares reductores que es la glucosa.

Determinación del Alcohol.

- **Índice de Refracción** se tomó el índice de refracción arrojando un IR de 1.361, que indica la presencia de etanol.
- **Prueba con Sodio (Na) metálico** la prueba se llevó a cabo en un tubo de ensaye agregando 2 ml del destilado y se le adiciona un trozo de sodio metálico, este

no reacciona solamente expidió vapores, lo que quiere decir es que no contiene agua y sí es alcohol.

- **Prueba de Lucas** en un tubo de ensaye se colocaron 2 ml de destilado y adicionamos gota a gota la solución de Lucas, mostrando una capa insoluble en menos de 10 minutos, esto indica que se obtuvo un alcohol primario.

Método Cuantitativo

Se procedió a determinar la concentración que se obtuvo como eficiencia del proceso. Aplicando la ecuación de la recta y en base a la curva de calibración se identificó en la muestra sintetizada de etanol de 65 ml en 50 g de biomasa, muestra una concentración de etanol de 0.041 g/ml. En base a su tiempo de retención de 36.357 minutos y su área bajo la curva de 482140.7.

Conclusiones

Se determinó la eficacia de utilizar la técnica de la hidrólisis ácida como pre-tratamiento químico, para el rompimiento de la cadena polimérica del almidón para producir azúcares reductores que estos llevan a la obtención de etanol. Corroborando la validez de este mecanismo de reacción utilizado métodos cualitativos para la determinación del rompimiento de cadena del almidón, determinación de azúcares reductores e identificación y mediante el método cuantitativo utilizando la cromatografía líquida de alta eficiencia (HPLC) determinamos la concentración de

etanol obtenida que fue de una concentración de 0.041 g/ml y la mejor obtención de etanol fue de 65 ml en 50 g de biomasa. La ventaja de este mecanismo de reacción es la obtención de azúcares reductores y su desventaja es que al aumentar la concentración del ácido que influye en la hidrólisis, la glucosa sufre otro rompimiento entre el carbono y oxígeno generando subproductos no deseados. Los resultados mostraron que las variables experimentales que determinan el rendimiento de la obtención de alcohol son: la etapa de hidrólisis y la efectiva neutralización, comparando con otras cantidades de biomasa utilizadas durante la realización del proyecto y con otras técnicas en la que el proceso es mucho más complejo, costoso y su producción de etanol es relativamente baja.

Referencias

- [1] Castañeda R., La utilización de residuos de frutas y hortalizas para obtener biocombustibles líquidos de segunda generación, IMECAL.
- [2] I. Martínez Cienfuegos. Universidad Iberoamericana. México D.F. Julio 2008
- [3] Reith J.H., Veenkamp J.M., Van Ree R., Bioethanol Production and use, Creating markets for renewable energy technologies eures technology marketing campaign, Supported by the European Commission Coproduction of bioethanol, electricity and heat from biomass wastes Netherlands Energy Research Foundation ECN (2006).

Tabla 1. Muestras hidrolizadas a diferentes concentraciones de biomasa y levadura.

Cantidad de biomasa en gr	Cantidad de levadura en gr	Vol. de Ácido	Vol. de Hidróxido
30	6	150	300 ml
50	10	250	500 ml
75	15	375	750 ml
100	20	500	1 Lt

EFFECTO DE LOS EMULSIFICANTES CONTENIDOS EN LOS FLUIDOS DE PERFORACIÓN BASE ACEITE SOBRE LA TERMODESORCIÓN DE LOS RECORTES DE PERFORACIÓN

Gloria Sandoval Flores*, Sofía Alvarado Reyna, Isidro Palos Pizarro, Roberto Guevara Cruz, Julián Mosíah de la Cruz González.

Universidad Autónoma de Tamaulipas Unidad Reynosa-Aztlán, calle 16 y lago de chápala Fracc. Aztlán cp.88740
Reynosa, Tam.*gloriasfmx@yahoo.com.mx

Introducción

Debido a varios siglos de actividad en la industria de la química básica, petroquímica y de refinación del petróleo, se han producido cantidades muy grandes de residuos de manejo especial y residuos peligrosos. Además junto con accidentes durante el almacenamiento, transporte o trasvase de sustancias (fugas, derrames, incendios) y la disposición clandestina e incontrolada de residuos, contribuyen en gran medida a la contaminación de suelos [1] (SEMARNAT 2002). El número de sitios contaminados, asciende a varios miles de lugares cuyo riesgo potencial es desconocido. De acuerdo con datos publicados por el INEGI (2000), la superficie de suelo degradado por causas de

contaminación en 1999 fue de 25,967 km². El fortalecimiento de la Gestión Ambiental en México toma en serio sus objetivos de preservación, resguardo y usos de nuestro entorno mediante la creación de un órgano que regule su cuidado y cumplimiento de sus normas. El 20 de agosto del 2002 se publicó en el Diario Oficial de la Federación la Norma Oficial Mexicana de Emergencia NOM-EM-138-ECOL-2002, donde se establece los límites máximos permisibles de contaminación en suelos afectados por derrame de hidrocarburos y por consiguiente esta norma establece los procedimientos a seguir para la restauración de suelos contaminados por derrames de hidrocarburos[2]. En este proyecto se tomo la dirección del tratamiento

de suelos que son contaminados por fluidos de perforación base aceite (estos fluidos tienen una composición química de: Diésel, Gilsolita, Emulsificantes, Carbonato de calcio, Cloruro de calcio y Agua) en perforaciones, dado que en la Cuenca de Burgos (Reynosa, Tamaulipas) es una de las zonas que tiene un gran auge en perforación de pozos. Una técnica que se puede considerar muy atractiva para esta investigación fue la termodesorción, por razones de la falta de parámetros de estudio que establezcan el comportamiento de la formulación de los fluidos de perforación base aceite y su contenido de emulsificantes ante la etapa de desorción y condensación, puntos de estudio en los que podemos recuperar los compuestos orgánicos (principalmente el diésel que es la base de composición para el fluido de perforación y el cual queda impregnado en el suelo) para poder dejar la mayor parte de la tierra en su estado inicial. En la desorción que es un tratamiento ex-situ consistió en calentar el suelo a temperaturas intermedias (250-600 °C) para evaporar los compuestos orgánicos volátiles, y dichos gases se convierten nuevamente en líquidos por medio de una condensación. Esos líquidos son eliminados de manera segura y adquieren un valor agregado como compuesto hidrocarbúrico recuperado (Diésel). El suelo queda limpio para su disposición final. Sin embargo en esta metodología nos encontramos con un Caso de Estudio, donde el condensado adquirió una consistencia de emulsión viscosa donde no se apreciaba el

producto deseado. Lo que nos llevó a una investigación para determinar qué factor estaba influyendo en esta reacción.

Metodología

El recorte (suelo contaminado con fluido de perforación) y el suelo sin contaminar (para realizar la comparación) fueron obtenidos del área de los pozos en perforación en dos sectores diferentes comprendidos en la zona norte de Reynosa, Tamps. La metodología de desorción a la que se sometieron las muestras de suelo fue en un horno marca Thermoline con control de temperatura programable, con un flujo de gas hasta alcanzar una temperatura de 350 a 450°C. Después del tratamiento térmico los suelos sin contaminar y los desorbidos fueron sometidos a análisis fisicoquímicos basados en la metodología tomada del texto de Chapman[3], siendo los análisis más representativos: % de humedad, % de saturación, Densidad aparente, pH, Conductividad eléctrica, Calcio, Magnesio, y Cloruros. Durante el proceso de Desorción la etapa de condensación de gases se realiza mediante enfriadores, obteniéndose un producto en fase emulsificante, presentando un problema de recuperación de los productos de valor como serían el Diésel y creando un problema de manejo de residuos, debido a que el producto esperado debe ser líquido y con una composición hidrocarbúrica ligera. Este Caso es la base de nuestro Estudio para resolver la problemática de un proceso en donde la composición química del Fluido

de Perforación Base Aceite repercute en los productos que deberían obtenerse en la termodesorción. La emulsión condensada se llevo a una separación física por filtración después de 5 días de reposo en un sistema a vacío con embudo Buchner. Posteriormente se llevó a centrifugación (centrifuga marca Spectrafuge 6C compact centrifuge Labnet) por 30 min. de 600 a 1500 rpm. Ambos procesos de separación fueron fallidos. Por lo que se procedió a realizar una separación química con uso de solventes iniciando una etapa uno con solventes puros y una etapa dos con mezclas de los que mostraron mejores resultados en la etapa uno A(acetona):B(alcohol) (ver tabal 1). Una vez obtenida la fase líquida se procedió a la separación del solvente del producto hidrocarbúrico ligero (Diésel) por evaporación a una presión de 640 mmHg a 40°C por 2 hrs, posteriormente se uso el refractómetro para comparar los índices de refracción con una muestra comercial. Los productos obtenidos marcan la explicación de la reacción que se está llevando a cabo después de la desorción y el paso hacia la condensación.

Resultados

El análisis fisicoquímico realizado al suelo sin contaminar y descontaminado son presentados en la tabla 2, donde se refleja un comportamiento en aumento de contenido de calcio 6Me/L en la muestra contaminada después de ser regenerada por la desorción térmica, debido a que los componentes vo-

látiles son eliminados, pero los compuestos pesados contenidos en el fluido de perforación se quedan en la composición del suelo, provocando los ligeros incrementos en la composición química. Permitiendo el uso del suelo como base de materiales de construcción, en concretos hidráulicos, etc. El estudio del condensado de la termodesorción fue tratado con una relación de solvente A:B (tabla 1), dando un rompimiento de la emulsión y permitiendo la separación de dos fases, una líquida(desde 7 a 21 ml) y otra sólida(21-10.62 gr). La relación de A:B (25-75%) logró el valor más alto en la recuperación de hidrocarburo ligero de 21 mililitros y una fase sólida de 10.62 gr de 30 gr de muestra problema (tabla 1 columna 4). Las pruebas de la composición del hidrocarburo ligero se hicieron con un Refractómetro con un resultado del 1.336°-1.491° Brix en comparación con una muestra comercial de Diésel de 1.459. Una segunda etapa consistirá en identificar la composición química de este hidrocarburo por Espectrofotometría de Uv-Visible.

Conclusiones

La termodesorción es una técnica factible para la remediación de suelos contaminados con fluido de perforación base aceite, obteniendo un suelo con características viables para su reinscripción, sin embargo los productos deseados varían dependiendo de la composición química del fluido, fluidos con contenido de emulsificantes en su for-

mulación complican el proceso de obtención de un condensado que pudiese usarse como combustible (principalmente obtención de un compuesto C12-C15 Diésel). Esta investigación realizó un estudio detallado comprobando que los emulsificantes que usan las compañías perforadoras en la zona norte en el proceso de desorción son arrastrados junto con la base hidrocarbúrica que contiene el fluido de perforación y por su carácter micelar forman una emulsión difícil de separar por medios físicos, logrando plantear una siguiente etapa como lo fue tratar con una mezcla de solventes (acetona-alcohol) que tienen por objetivo romper la emulsión y formar dos fases, la líquida es la base hidrocarbúrica (Diésel) y

la fase sólida es la gilsonita mas trazas de polvo (talco) del suelo.

Referencias Bibliográficas

- [1]. Semarnat. Inventario Forestal Nacional 2000. México.
- [2]. Lic. Miguel Ángel Cancino. Proyecto de desarrollo institucional para la gestión de sitios contaminados pn: 99.21.34.3. La regulación de la remediación de suelos contaminados en México y propuestas para su fortalecimiento. México. D.F. 2001. Semarnat. Ddeutsche Gesellschaft Für Technische Zumamamenarbeit Gtz.
- [3]. Homer D. Chapman, Parker F. Pratt Métodos de análisis para suelos, plantas y aguas. Trillas. 1988. México.

Tabla 1. Relación de solventes empleados para el rompimiento de la emulsión

SOLVENTE	GRS. DE MUESTRA (CONDENSADO)	ML DE SOLVENTE	ML DE DIESEL RECUPERADO
SOL-A	30	60	8
100%		90	7
SOL-A+B	30	60	10
50-50%		90	11
SOL-A+B	30	60	8
25-75%		90	21
SOL-A+B	30	60	16
15-85%		90	18
SOL-B	30	60	15
100%B		90	17
SOL-A+B	30	60	10.5
75-25%		90	11
SOL-A+B	30	60	11
85-15%		90	10

Tabla 2. Resultados del análisis fisicoquímico a suelos sin contaminar y suelos descontaminados

Muestras	PH - Categoría	% de Humedad	Conductividad eléctrica – categoría	Calcio (Me/L)	Magnesio (Me/L)	Cloruros (Me/L)	% de Saturación	Densidad aparente
Muestra – pozo 1	7 - neutro	2.68 %	0.522 mmhos/ cm – no salino	4.0	1.0	1.5	40.4 %	1.42 gr/ml
Muestra – pozo 2	7 - neutro	2.18 %	0.83722 mmhos/cm – no salino	5.5	5.5	2.0	39.4 %	1.11 gr/ml
Muestra – descontami- nada	7 – neutro	2.30 %	1.8 mmhos/cm – no salino	6.0	3.5	2.0	38.0 %	1.30 gr/ml

EFFECTOS DE FRACCIONES DEL VENENO DE *Scolopendra polymorpha* SOBRE MÚSCULO ESQUELÉTICO DE RATÓN

Judith Tabullo De Robles¹, Lucero Valladares Cisneros¹, Francisca Fernández Valverde², Juana Villeda Hernández², María del Carmen Gutiérrez Villafuerte¹

carmengu@uaem.mx

¹Centro de Investigación en Biotecnología, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca, Morelos, México

²Instituto Nacional de Neurología y Neurocirugía, México, D.F.

Introducción

Scolopendra polymorpha (ver Fig. 1) es un artrópodo venenoso ampliamente distribuido en México y los Estados Unidos; su mordedura en humanos produce dolor quemante, parestesia y edema, entre otros síntomas. El veneno de los ciempiés del género *Scolopendra* ha sido empleado en la medicina tradicional de países como China, Corea, India y México para el tratamiento de artritis, epilepsia, cefaleas e infecciones (1,2).

De las investigaciones realizadas en el Laboratorio de Neurofarmacología del CEIB, se ha determinado que el veneno de *Scolopendra* spp puede ser letal para artrópodos como los acociles de agua dulce, larvas de insectos y

chapulines (saltamontes). Se han identificado fracciones con actividad antimicrobiana, fosfolipasa, proteasa y hialuronidasa. Se ha sugerido que su porción tóxica modifica la permeabilidad de las membranas, aumentando la liberación basal de neurotransmisores, probablemente incrementando la permeabilidad a sodio (2-4). Además, se encontró que la administración por vía intramuscular (i.m.) de veneno de *S. polymorpha* produce alteraciones en el umbral doloroso ante estímulos térmicos, daño a nervio y músculo por inflamación en ratones (1).

Con este trabajo se pretende evaluar el efecto de fracciones de veneno de *Scolopendra polymorpha* sobre músculo esquelético de ratones CD1.

Métodos

Con el objetivo de verificar que los ciempiés colectados pertenecieran a la especie *S. polymorpha*, se llevaron a cabo mediciones morfométricas, además de observaciones estereoscópicas de los antenómeros, espiráculos, espinas prefemorales de las patas terminales de cada animal para determinar el género y la especie a la que pertenecen, de acuerdo con claves taxonómicas y comunicación personal con el Dr. Fabio G. Cupul Magaña, del Departamento de Ciencias Biológicas del Centro Universitario de la Costa (CUC) de la Universidad de Guadalajara, en donde se realizó además una estancia corta.

Se colectó veneno mediante estimulación mecánica de las forcípulas, se cuantificó por el método de Lowry y se liofilizó. Se obtuvieron muestras de músculo esquelético, conservadas con isopentano y se prepararon rebanadas de 6 µm de grosor en un criostato a -19°C, que se incubaron con veneno total o fracciones obtenidas por cromatografía de intercambio aniónico (DEAE-sefaroza), para identificar alteraciones, por lo cual se usó la tinción HyE. Las fracciones con actividad serán separadas mediante electroforesis en gel (SDS-PAGE) y electroelución.

Resultados

Se autenticó la identidad de los ciempiés colectados como *Scolopendra polymorpha*, además de encontrar nuevas localidades para esta especie en el estado de Morelos: Yautepec,

Emiliano Zapata y Cuernavaca, lo que permitió elaborar un manuscrito para reportar estos resultados y que será publicado en diciembre de 2014 en Acta Zoológica Mexicana (nueva serie).

Se obtuvieron 12 fracciones a partir de la cromatografía de intercambio aniónico, como se muestra en la Fig. 2. Se probaron sobre cortes de músculo esquelético de ratón y se encontró que las fracciones F1, F2, F8, F9, F11 y F12 al igual que la incubación con veneno total provocaron la aparición de vacuolas en los cortes de músculo esquelético (ver Fig. 3), mientras que al incubar con el control negativo no se produjo este fenómeno.

Conclusiones

- ✓ La prueba *in vitro* utilizada ha permitido identificar alteraciones en la estructura de las fibras musculares de ratón, causadas por incubación con el Veneno total y con las fracciones obtenidas.
- ✓ Algunas fracciones provocaron la aparición de vacuolas en los cortes de músculo esquelético. Sin embargo, es necesario realizar otro tipo de pruebas para comprobar el fenómeno.

Perspectivas de trabajo

- ✓ Se realizarán pruebas conductuales, histológicas y bioquímicas para detectar presencia de hiperalgesia, alteraciones morfológicas y marcadores de daño a tejidos.

- ✓ Se espera efectuar una caracterización bioquímica del compuesto(s) responsable de los cambios sobre músculo esquelético.

Agradecimientos

Este proyecto es realizado con apoyo de la beca CONACyT No. 267392.

Referencias

1. Tabullo, D.R.J. “Efectos de la administración de veneno de *Scolopendra viridis* Say, 1821 en la respuesta murina a estímulos térmicos y mediadores inflamatorios del dolor”. Tesis de maestría. CEIB-UAEM. México (2012).
2. Ibarra, R. E.Y. “Identificación y caracte-

terización de hialuronidasas presentes en el veneno de *Scolopendra viridis* Say, 1821”. Tesis de maestría. CEIB-UAEM. México (2011).

3. Gutiérrez, M.C., Abarca, C. y Possani, L.D. *Comparative Biochemistry and Physiology Part C*. 135: 205-214. (2003).
4. González-Morales, L. Pedraza-Escalona, M. Diego-García, E. Restano-Cassulini, R. Batista, C.V. Gutiérrez, M.C. y Possani, L.D. *Journal of Proteomics*, disponible en: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1874391914002097> (2014).
5. Cupul-Magaña, F.G. *Insecta Mundi*. 0282: 1-10. (2013).

Figuras

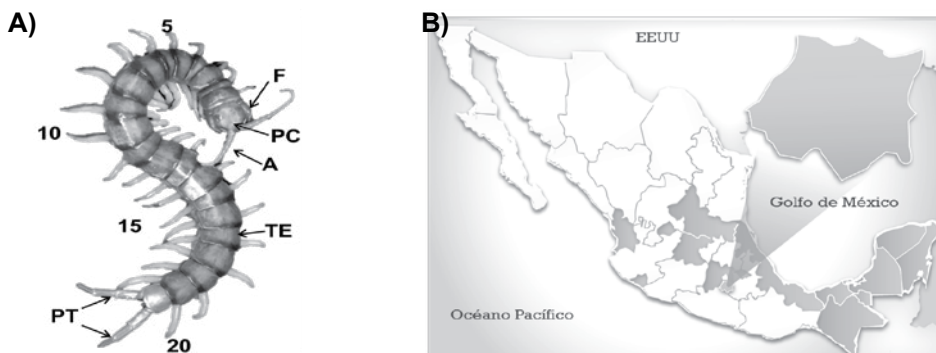


Fig.1. *Scolopendra polymorpha*. A) Morfología externa. A: antenas; F: forcípulas venenosas; PC: placa cefálica; TE: terguitos; 5-20: patas caminadoras; PT: patas terminales. B) Distribución en México. Se muestran los estados donde se ha reportado su presencia (blanco), y se resalta Morelos como el estado de recolección (5).

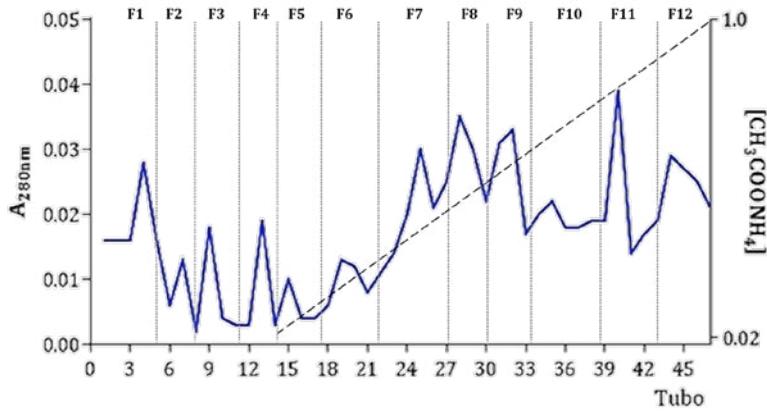


Fig. 2. Perfil cromatográfico del veneno de *S. polymorpha*. Intercambio aniónico (columna DEAE-sefarosa; gradiente: 0.02-1 M $\text{CH}_3\text{COONH}_4$; pH=4.7; 20 gotas/tubo; 220 μg de veneno).

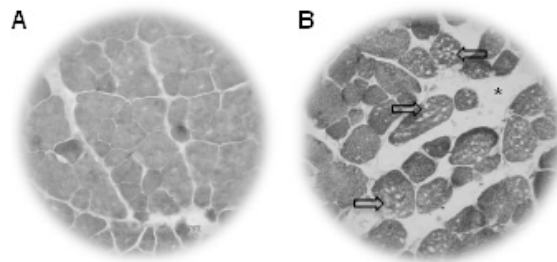


Fig.3. Músculo esquelético de ratón. A: control, incubado con agua destilada. B: incubado por 15 min con veneno total. Cortes transversales. Tinción HyE. Se muestra aparente vacuolización de fibras musculares y un mayor espacio entre las fibras musculares (*).

COMITÉ ORGANIZADOR

Cuerpo Académico de Química y Física del Ambiente

Rodrigo Morales Cueto
Hugo A. Saldarriaga Noreña
Sandra I. Ramírez Jiménez
Carlos Amero Tello

Cuerpo Académico de Gestión y Bioprocesos Ambientales

María Laura Ortiz Hernández
Enrique Sánchez Salinas
Edgar Dantán González
Angeluz Olvera Velona
Jorge Luis Folch Mallol
Efrain Tovar Sánchez

Cuerpo Académico de Diseño, Ingeniería e Impacto de los Procesos

Martha Lilia Domínguez Patiño
Rosa María Melgoza Alemán
Antonio Rodríguez Martínez
Rosenberg Javier Romero Domínguez

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS

Dr. Jesús Alejandro Vera Jiménez

Rector

Dra. Patricia Castillo España

Secretaria Académica

Dr. Gustavo Urquiza Beltrán

Secretario de Investigación

Dr. Mario Fernández Zertuche

Encargado de la Dirección del Centro de Investigaciones Químicas

Cuerpo Académico de Química y Física del Ambiente

Cuerpo Académico de Gestión y Bioprocesos Ambientales

Cuerpo Académico de Diseño, Ingeniería e Impacto de los Procesos

Dra. Sandra I. Ramírez Jiménez

Dr. Rodrigo Morales Cueto

Dr. Hugo A. Saldarriaga Noreña

Cuerpo Académico de Química y Física del Ambiente

Dr. José Mario Ordoñez Palacios

Director General de Desarrollo de la Investigación

Universidad Autónoma del Estado de Morelos

Rectoría 2012 - 2018



Universidad Autónoma del
Estado de Morelos

