

Investigación e Innovación Universitaria en Ciencias e Ingeniería



COORDINACIÓN:

Cuauhtémoc Vidrio Sahagún

Flor Galaviz Lugo

Mayra Vargas Espinoza



Universidad de Guadalajara

Primera Edición, 2018

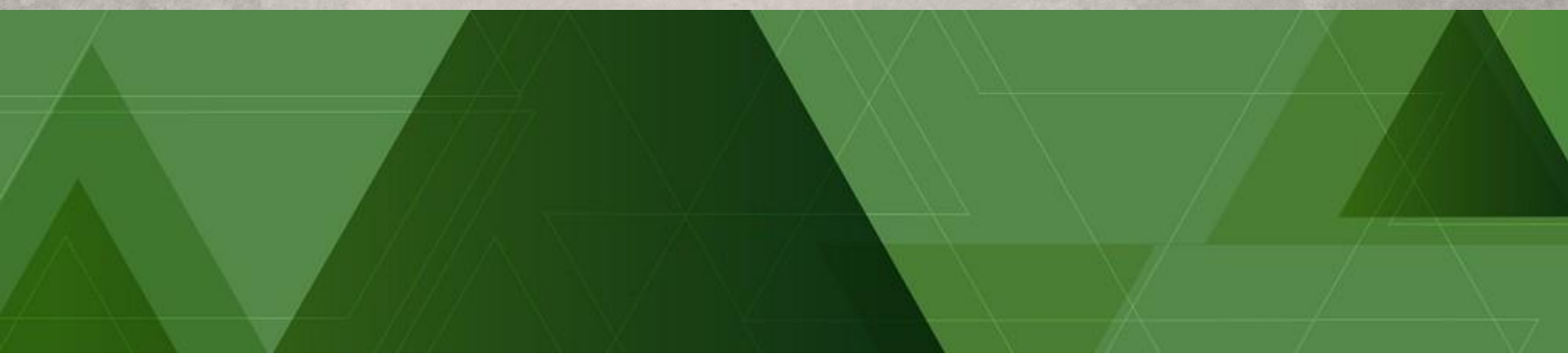
D.R. © 2018, Universidad de Guadalajara
Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingenierías
Blvd. Marcelino García Barragán núm. 1421, esq. Calzada Olímpica
44430, Guadalajara, Jalisco

ISBN: 978-607-547-018-4

Hecho en México

Coordinadores: Cuauhtémoc Vidrio Sahagún, Flor Galaviz Lugo
y Mayra Vargas Espinoza.

Guadalajara, Jalisco. México. Febrero de 2018.



ÍNDICE

Presentación

CAPÍTULO 1 -Ciencias de la Salud-

-ADENOVIRUS 36 Y SU RELACIÓN CON LA OBESIDAD INFANTIL EN EL HOSPITAL GENERAL DE ZAPOTLÁN EL GRANDE, JALISCO.

México/ José Enrique Vargas Espinoza

-DAÑO AL ADN INDUCIDO POR EL MERCURIO LIBERADO POR AMALGAMAS DENTALES MEDIANTE EL CONTEO DE MICRONÚCLEOS Y ANORMALIDADES NUCLEARES EN CÉLULAS DE MUCOSA BUCAL DE PACIENTES ODONTOPEDIÁTRICOS

México / Nalleli Guadalupe Macías Lamas, Ana Lourdes Zamora Pérez & Adriana Macaria Macías Lamas

-NIVELES DE POLIAMINAS EN PLASMA DE RATONES CON L5178Y TRATADOS CON 5'-DESMETOXI-DESOXIPODOFILOTOXINA, DESOXIPODOFILOTOXINA Y ACETIL PODOFILOTOXINA AISLADAS DE BURSERIA FAGAROIDES. *México /*

Fabiola Rodríguez Arévalo, Ana María Puebla Pérez & Jorge Iván Delgado Saucedo

-SOCIO-PSYCHOLOGICAL ASPECT OF DECEIT.

Ukraine / Yelyzaveta Borodynia

-PLANTS-SALICYLATES AS THE NATURAL SUBSTITUTES OF ACETYLSALICYLIC ACID IN THE PREVENTION OF THROMBOSIS.

Ukraine / Tetiana Novosolova & Yevheniia Dubrova

CAPÍTULO 2 -Ingeniería Biomédica-

-DESARROLLO DE ALGORITMO BASADO EN VISIÓN COMPUTACIONAL PARA LA CLASIFICACIÓN DE EDAD A PARTIR DE IMÁGENES FACIALES

México / González-Sandoval Josué, Cervantes Ramirez Faviola Stephanye, Segovia Morales Adán & E. Gerardo Mendizabal-Ruíz

CAPÍTULO 3 -Ingeniería Ambiental-

- EVALUACIÓN DEL ESTADO AMBIENTAL DEL ECOSISTEMA FLUVIAL EN LAS COMUNIDADES DE LA MICROCUENCA EL CANGREJO, AUTLÁN, JALISCO.

México / Enya Roseli Enríquez Brambila, José Abad Aispuro Chávez y Claudia Irene Ortiz Arrona

-ANÁLISIS HIDRÁULICO Y JUSTIFICACIÓN DE USO DE LA BOMBA DE GOLPE DE ARIETE. *México / Ana Xóchitl Vidrio Sahagún*

-ANÁLISIS COMPARATIVO DE CUERPOS DE AGUA PARA ABASTECIMIENTO PÚBLICO SUSTENTABLE. *México / Brenda Prisila Saucedo Rodríguez*

-DINO ECOTEC. *México / Eleonor Gómez Rebolledo*

CAPÍTULO 4 -Ingeniería Civil-

-PROPUESTA DE ALGORITMO PARA ANÁLISIS ESTRUCTURAL (ALGETAB)

México / José Jesús Baeza Bastiani, Carlos Rodríguez Jiménez & Luis Edgar López de la Cruz

-MODELO SUSTENTABLE PARA EL DESARROLLO VIAL, MOVILIDAD VERDE, URBANISMO Y SOCIEDAD. *México / Cuauhtémoc Tonatiuh Vidrio Sahagún, Valeria Jocelyn Aranda salgado & Mayra Elizabeth Vargas Espinoza*

-ESTABLECIMIENTO EN EL CENTRO UNIVERSITARIO DE CIENCIAS EXACTAS E INGENIERÍAS DE LA UNIVERSIDAD DE GUADALAJARA DE UNA RED GEODÉSICA DE ALTA PRECISIÓN LIGADA A LA RED GEODÉSICA NACIONAL.

México/ Adalberto Díaz Vera, Javier Alberto Merino Casas, Juan Adrián Álvarez Rosales & Miguel Eduardo Álvarez Noriega

-DISEÑO INNOVADOR DE COLECTOR PLUVIAL PARA MEJORAR EL SISTEMA DE ALCANTARILLADO PLUVIAL.

México / Jaime Arturo Gutiérrez Calva, Mario Alcidez Trejo Acosta & Noemí Méndez de los Santos

-SELF-REGULATED SYSTEM OF PREVENTIVE RESETTING OF FLOOD WATERS.

Ukraine / Maria krokis & Victor koldun

CAPÍTULO 5 -Ingeniería Industrial-

-APLICACIÓN DE LA LOGÍSTICA EN EL SERVICIO HOTELERO DE LA CIUDAD DE NEIVA. Colombia /Ana Lucia Paque Salazar

-DIAGNÓSTICO DE LA SITUACIÓN ACTUAL DE LOS RESIDUOS SANGUINOLENTOS GENERADOS POR EL PROCESO DE EVISCERADO.

Colombia /Vanessa Catalina Bermeo Rodríguez, María Sthefanie Cleves Astudillo & Diego Fernando Suárez Cortés

-REESTRUCTURACIÓN DEL FUNCIONAMIENTO DE UNA HIPOTECARIA

México/ Jorge Alberto Pérez Ramírez, Roberto Carlos Chávez Ramírez

CAPÍTULO 6 -Ingeniería Química-

-CINÉTICA DE LA TRANSICIÓN DE MICELAS ESFÉRICAS A CILÍNDRICAS EN COPOLÍMERO TRIBLOQUE. México / G. Landazuri, M. F. Barragán, E. Barajas, E.

Torres, Y. Rharbi & J.F.A. Soltero

-PRODUCING OF THE SUPERHYDROPHOBIC CARBON SOOT FROM POLYETHYLENE WASTE AND ITS USAGE FOR THE PRODUCTION.

Kazakhstan / Sultanbek Yermekov

-SMART WINDOWS: NEW TEMPLATE SYNTHESIS OF THIN NICKEL HYDROXIDE FILM FOR ELECTROCHROMIC DEVICES.

Ukraine / Polina Kovalenko, Vadym Kovalenko & Valerii Kotok

-INSTRUMENTAL AND TECHNOLOGICAL DEVELOPMENT OF EPOXIDATION PROCESS THE WASTE OF NATURAL RUBBER (SCRAP).

Ukraine / D.O. Shapovalov, V.V. Ved & S.N. Zybalyo

-ELECTROCHEMICAL DEPOSITION OF MULTILAYERED ELECTROCHROMIC THIN FILMS FOR SMART WINDOWS. *Ukraine & Russian Federation / Kotok V.A, Kovalenko V. L. & Zemlianyi V. K*

-SMART WINDOWS: CATHION INSIDE AND ANION OUTSIDE ACTIVATION OF ELECTROCHROMIC FILM OF NICKEL HYDROXIDE. *Ukraine / Mikhail Baramsin, Vadym Kovalenko, Valerii Kotok & Polina Kovalenko*

CAPÍTULO 7 -Ciencias Químicas-

-COMPARISON OF CHARACTERISTICS OF Ni(II)-Ti (IV) LAYERED DOUBLE HYDROXIDES SYNTHESIZED BY DIFFERENT COPRECIPITATION TECHNIQUES

Ukraine & Russian Federation / Vitalii Solovov, Nikolai Nikolenko, Vadym Kovalenko & Valerii Kotok

-AMPLIFICACIÓN DE SEÑALES DE PIRIDINA A TRAVÉS DE LA TÉCNICA SERS CON UN SOPORTE SÍLICA-TITANIA-PLATA. *México / Héctor Andrés*

Martínez Máñez & Dr. Simón Yobanny Reyes López.

CAPÍTULO 8 -Física y Matemáticas-

-MUNDO CUÁNTICO, ¿QUE HAY MÁS ALLÁ DE LO QUE VES?

México / Iván Raziel Sánchez González, Pedro Manuel Hernández Núñez & Jonathan Curiel Guevara

CAPÍTULO 9 –Ingeniería en Comunicaciones y Electrónica-

-CÁLCULO DEL KERNEL ANALÍTICO PARA FUNCIONALES TIPO GGA EN LA TEORÍA DE LOS FUNCIONALES DE LA DENSIDAD AUXILIAR. *México / Jesús Aarón Pérez Rodríguez & Dr. Bernardo A. Zúñiga Gutiérrez*

CAPÍTULO 10 -Ingeniería en Informática y Computación-

-DEVELOPMENT OF A MOBILE APPLICATION FOR DISPLAYING AIR POLLUTION IN CITIES. *Slovenia / Klopčič Vid, Hirci Nejc, Alenka Mozer*

CAPÍTULO 11 -Ingeniería Mecánica – Eléctrica-

-APROVECHAMIENTO DE LA ENERGÍA SOLAR PARA EL RECICLAJE DE POLÍMEROS. *México / Víctor R. Nuño Sánchez, Juan F. Burgos Castro & Daniel Ávila Martínez*

CAPÍTULO 12 -Ingeniería en Alimentos y Biotecnología-

EVALUACIÓN DE UN MÉTODO DE SECADO EN LA CONSERVACIÓN DE CEPAS MICROBIANAS. *México / Amín E. López Domínguez & Alejandro Velasco Martínez & Patricia Téllez Mora*

-Agradecimientos

Presentación

Inspirados en promover el desarrollo científico y académico de los estudiantes de áreas afines a las ciencias y las ingenierías, decidimos buscar y consolidar un espacio gráfico en el que se mostraran los resultados de la socialización, discusión, análisis y colaboración entre pares.

Una característica que tiene una comunidad universitaria es la pluralidad y diversidad de ideas, por lo tanto, es el espacio propicio para que mediante las ciencias y las ingenierías resolvamos problemas de actualidad con el diferente enfoque de todos y a cada uno de los sectores de la comunidad estudiantil.

La educación superior debe ser cimiento de todo profesionista, por lo que es positivo formar plataformas de complementación en la formación a través de cooperación con alumnos de otras instituciones educativas para tratar de conseguir una formación holística e integral, construyendo desde varias perspectivas una noción global. Por ello en cada capítulo se encuentra el reflejo del esfuerzo de quienes aportan con su investigación.

En este libro se trata de promover la cultura de investigación apoyados por autoridades académicas de distintas universidades participantes y del sector empresarial, dentro de sus actividades para la promoción de cultura científica y desarrollo académico de los estudiantes universitarios.

Por lo anterior, se resalta el conocimiento y la innovación, se brinda la oportunidad de establecer redes de cooperación bajo un marco de investigación con importantes universidades e investigadores a nivel nacional e internacional.

-Cuauhtémoc Vidrio Sahagún-

CAPÍTULO 1

-Ciencias de la Salud-



ADENOVIRUS 36 Y SU RELACIÓN CON LA OBESIDAD INFANTIL EN EL HOSPITAL GENERAL DE ZAPOTLÁN EL GRANDE, JALISCO

José Enrique Vargas Espinoza

*Centro Universitario del Sur, Universidad de Guadalajara.
Zapotlán El Grande, México. E-mail: riichi_1029@live.com.mx.*

RESUMEN: La siguiente propuesta de trabajo se enfoca a un problema de carácter nacional, que necesita atacarse si queremos una mejor salud en nuestro estado: La obesidad.

El sedentarismo y la mala alimentación juegan un papel primordial para desencadenar esta enfermedad, sin embargo, el principal objetivo de este proyecto es demostrar que también puede ser causado por un agente biológico en pacientes pediátricos de Zapotlán El Grande.

Al tomar como referencia los descubrimientos realizados por una tesis que ha sido defendida desde los años noventa por el doctor **Richard Atkinson**, director del Centro de Investigación para la Obesidad Obetech y profesor de la Universidad de Virginia, que señala a un virus, AD-36, como el principal culpable de la obesidad. Se utilizará una metodología descriptiva, debido a que se busca plasmar con los resultados, la relación que existe entre es comprobar el Adenovirus 36 y la obesidad infantil. Posteriormente, dar un tratamiento para el problema con medicamento para erradicar el agente causal.

Actualmente, estamos en una situación crítica, la obesidad es un problema de salud potencial, las generaciones emergentes comienzan a ser víctimas de ello, que se ha desarrollado durante años; problemas hay, lo que se necesitan son soluciones.

PALABRAS CLAVE: Obesidad, adenovirus, niños.

ABSTRACT: The following proposed work focuses on a problem of national character, you need tackled if we want better health in our state: Obesity.

Physical inactivity and poor diet play a major role to trigger the disease, however, the main objective of this project is to demonstrate that it can also be caused by a biological agent in pediatric patients Zapotlán El Grande.

By referring to the discoveries made by a thesis that has been advocated since the nineties by Dr. Richard Atkinson, director of the Research Center for Obesity Obetech and professor at the University of Virginia, pointing to a virus, AD-36 as the main culprit of obesity. The methodology chosen is descriptive, because it seeks to translate the results, the relationship between the Adenovirus 36 is to check and childhood obesity. Subsequently, to a treatment for the problem with medication to eradicate the causative agent.

Currently, we are in a critical situation, obesity is a potential health problem, emerging generations begin to be victims of it, which has developed over the years; There are problems, what is needed are solutions.

KEY WORDS: Obesity, adenovirus, children.

1.1 JUSTIFICACIÓN

El siguiente protocolo da a conocer un tema de bastante importancia, como lo es la Obesidad.

Las razones que impulsan la realización de la investigación, es por el momento tan difícil por el que está pasando nuestro país, hoy en día somos el segundo lugar en obesidad en México (llegamos a ser el primer lugar). Como enfermero en proceso, no me gustaría seguir viviendo con esta realidad, ésta que cada vez se apodera de nosotros como un gran monstruo, gracias a diversos factores que la conllevan.

Los estilos de vidas tan acelerados y tan distintos son los que lo han causado, sin embargo, en dicha investigación hay algo que realmente me llama la atención: ¿Cómo es posible que la obesidad sea tanta en tan poco tiempo? Es decir, tenemos realmente que hacer conciencia en que los estilos de vida no deberían de ser suficientes para tener la cantidad de obesos que hay, es una cantidad considerable la cual estamos dispuestos a observar y analizar.

Al tomar como referencia los descubrimientos realizados por una tesis que ha sido defendida desde los años noventa por el doctor Richard Atkinson, director del Centro de Investigación para la Obesidad Obetech, en la que señala a un virus, como uno de los culpables de la obesidad. Experimentos realizados a especies animales demostraron que al poner en contacto al adenovirus 36 con el organismo animal, éste aumenta de peso sin necesidad de modificar sus actividades o su alimentación. Por lo que es más que evidente que la Obesidad infantil, puede estar relacionada con tal virus.

La importancia del proyecto es enorme, el proyecto va a demostrar que Adenovirus 36 es uno de los culpables de la pandemia como lo es la obesidad.

1.2 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

Tenemos que entender primero que nada lo que es la obesidad y el adenovirus 36 La Organización Mundial de la Salud nos dice “La obesidad y el sobrepeso se definen como una acumulación anormal o excesiva de grasa que puede ser perjudicial para la salud. Una forma simple de medir la obesidad es el índice de masa corporal (IMC), esto es el peso de una persona en kilogramos dividido por el cuadrado de la talla en metros. Una persona con un IMC igual o superior a 30 es considerada obesa y con un IMC igual o superior a 25 es considerada como sobrepeso. El sobrepeso y la obesidad son factores de riesgo para numerosas enfermedades crónicas, entre las que se incluyen la diabetes, las enfermedades cardiovasculares y el cáncer.

El adenovirus fue descrito por primera vez como agente viral único en 1953 por Wallace Rowe and Robert Huebner de the National Institutes of Health. Es un virus ADN de 60-90nm de diámetro, se caracteriza por no poseer cubierta externa. El virión tiene forma icosaédrica y se compone de una cápside protéica y un núcleo con ADN viral. Actualmente se reconoce que los adenovirus causan con más frecuencia enfermedades del tracto respiratorio. Éstos son

endémicos en la población pediátrica, se mencionan que son responsables de hasta el 10% de estas infecciones.

Los niños son más propensos en las enfermedades respiratorias, ya que sus defensas no son las más fuertes para poder tratar a éste tipo de biológicos infecciosos.

Los niños son prácticamente los que van a construir nuestro futuro planeta, no sólo son esos pequeños que le dan sentido a muchas vidas, no sólo son esas personitas pequeñas que están ahí esperando a crecer, son los que nos deben de dar un mejor mundo para todos los que estamos en la vida terrena.

Los alimentos que hay actualmente para estos pequeños no son los mejores, porque la mayoría (sino es que todos) tienen químicos los cuales afectan a la salud de ellos, además que la famosa tecnología cada vez más se apodera de ellos, es decir, hay menos niños jugando en la calle porque ya tienen una tableta electrónica o un teléfono inteligente para chatear o jugar, por lo que los estilos de vida se ven alterados.

Si le sumamos a todo lo anterior que los niños se enferman fácilmente de las vías respiratoria (más en los periodos de invierno), tenemos como resultado el siguiente proyecto que se enfoca en determinar la prevalencia del Adenovirus 36 en los niños obesos de Jalisco; cual es el nivel de obesos por este virus en el estado y cómo esto tiene impacto en un futuro.

1.2.1 PREGUNTA DE INVESTIGACIÓN

- ¿Cuál es el índice de Obesidad Infantil por Adenovirus 36 en el Hospital General de Zapotlán.

1.3 OBJETIVOS

1.3.1 GENERALES

- Determinar el índice de la Obesidad Infantil en el Hospital General de Zapotlán causada por Adenovirus 36.

1.3.2 PARTICULARES

- Identificar el índice de la Obesidad Infantil según su grado.
- Identificar el género con mayor nivel de Obesidad Infantil por Adenovirus 36.
- Medir cual es el porcentaje de Obesidad Infantil en el Hospital General de Zapotlán por Adenovirus 36.

1.4 MARCO TEÓRICO

1.4.1 GENERALIDADES

Debido a que la epidemia de la obesidad continúa sin detenerse. Denominada “infecto obesidad”, ha recibido una mayor atención en los últimos años. Aunque hay muchos

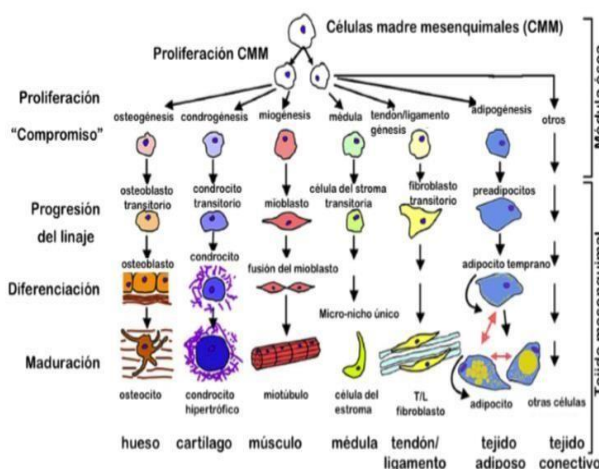


Fig.1 Proceso de transformación de células madre

factores que contribuyen a la etiología, un subconjunto podría ser causada por infecciones.

Aunque se reconoce que la obesidad es una enfermedad con múltiples etiologías, sólo recientemente la infección microbiana como un factor etiológico ha recibido atención. Se han descrito siete virus y un agente de la tembladera o scrapie que ocasionan obesidad en modelos animales (s-7, 10-20). No se ha determinado aún cuál de estos patógenos puede causar una obesidad en humanos. Se ha descrito cómo el adenovirus aviar SMAM-1 y el adenovirus humano tipo 36 (Ad-36) ocasionan adiposidad en modelos animales (s-7, 15 Y 16) Y muestran asociación con la obesidad humana (8 y 17). En experimentos in vitro se ha demostrado que la infección con Ad-36 de pre-adipocitos en ratas (3T3-L1) y pre-adipocitos humanos promueven su proliferación y diferenciación. Recientemente se han descrito los efectos de promoción de la obesidad de Ad-5, otro adenovirus humano. Hasta la fecha, los adenovirus son el único tipo de virus relacionado con la obesidad humana. Por lo tanto, entre los patógenos adipogénicos constituyen los objetivos principales para la determinación de un papel en la obesidad humana.

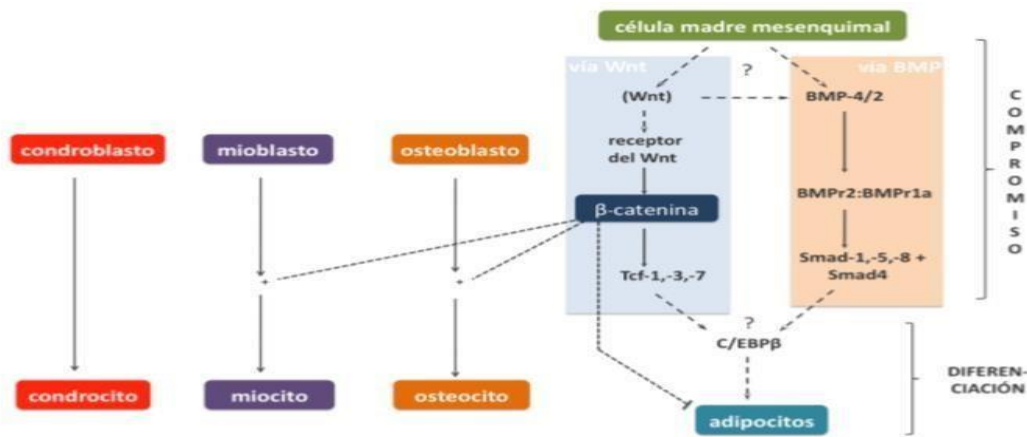


Fig.2 Esquema de eventos que llevan al compromiso de la CMM al linaje de adipocitos.

1.4.2 DEFINICIÓN DE ADENOVIRUS

El adenovirus es un virus ADN de 60-90 nanómetros de diámetro. Se caracteriza por no poseer cubierta externa. El virión tiene forma icosaédrica y se compone de: Una cápside proteica constituida por 252 capsómeros, que representa el 87% del peso, el ADN bicatenario contiene un genoma compuesto por 36,000 pares de bases y un núcleo que contiene el genoma de ADN viral y 4 proteínas internas.

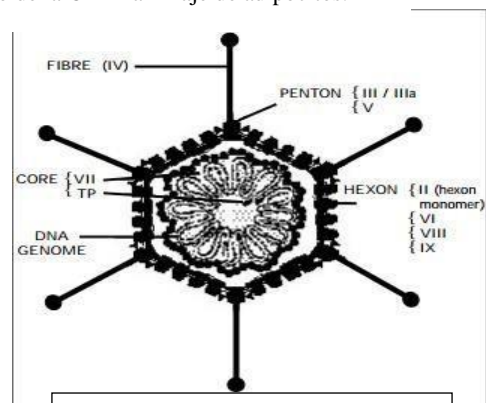


Fig.3 Estructura de Adenovirus 36.

De los 252 capsómeros, 240 son hexones y 12 son pentones. Los hexones se disponen conformando los lados de la superficie icosaédrica y los pentones conforman los vértices. Una glicoproteína denominada fibra protruye desde el centro de cada pentón. Tanto los hexones

como los pentones y la fibra están dispuestos por proteínas específicas. El núcleo del virión está formado por un ADN lineal de doble cadena que tiene capacidad para codificar entre 30-40 genes.

La replicación del ADN vírico tiene lugar en el núcleo y está mediada por una polimerasa de ADN de origen vírico. La polimerasa utiliza una proteína vírica de 55kDa (proteína terminal) unida a un monofosfato de citosina como cebador para el comienzo de la replicación de ambas cadenas del ADN. La proteína terminal permanece unida a la molécula de ADN.

La transcripción genética tardía se pone en marcha cuando ha finalizado el proceso de replicación del ADN. La mayoría de las moléculas de ARNm tardío se generan a partir de la transcripción de un transcrito de ARN primario de gran tamaño (83% del genoma) que es procesado para formar cada una de las moléculas de ARNm.

Las proteínas de la cápside se elaboran en el citoplasma y luego se transportan hacia el núcleo para ensamblar el virus. En primer lugar se ensamblan las procápsides vacías, se introduce en la cápside a través de un orificio en uno de los vértices el ADN vírico y las proteínas nucleares. Los procesos de replicación y de ensamblaje son ineficaces y tienden a tener errores; solamente se elabora una unidad infecciosa por cada 2,300 partículas. El ADN, las proteínas y numerosas partículas defectuosas se acumulan en cuerpos de inclusión nuclear. El virus permanece en la célula y es liberado cuando ésta degenera y se lisa.

El virus se transmite por gotas respiratorias, contacto directo o vía fecal-oral, lo que da lugar a una infección faríngea. Los dedos transmiten los virus a los ojos.

El adenovirus tipo 36 (Ad-36) pertenece al subgrupo D, serotipo 36. El Ad-36 es serológicamente diferente al compararse con 48 tipos de adenovirus humanos con excepción de una reacción cruzada débil con Ad-29. Los adenovirus son virus de ADN no rodeado que se replican en el núcleo de la célula hospedadora. En todos los serotipos, los genes que codifican las funciones específicas están ubicados en la misma posición en el cromosoma viral. El genoma comprende una molécula de ADN de doble hélice y lineal sencilla, que comprende cinco unidades de transcripción tempranas (E1A, E1B, E2, E3 Y E4) , dos unidades de transcripción temprana retrasada (IX y IVa2) y una unidad tardía principal que genera cinco familias de mARNs (L1 a L5) . Los serotipos de adenovirus muestran diversidad genética que se promueve mediante eventos de recombinación que ocurren comúnmente entre los adenovirus.

1.4.3 CICLO DE REPLICACIÓN

La mayoría de los estudios sobre la replicación se han realizado usando Ad-2 o Ad-5, ya que pueden cultivarse fácilmente en el laboratorio, ya sea infectando células HeLa o KB. Convencionalmente, el ciclo de replicación se divide en dos fases. Los eventos tempranos incluyen la adsorción, penetración, transcripción y traducción de un conjunto temprano de genes. Los productos del gen viral temprano actúan como mediadores en la expresión genética viral, replicación del ADN, inducen la progresión del ciclo celular y bloquean la apoptosis. Una vez que se inicia

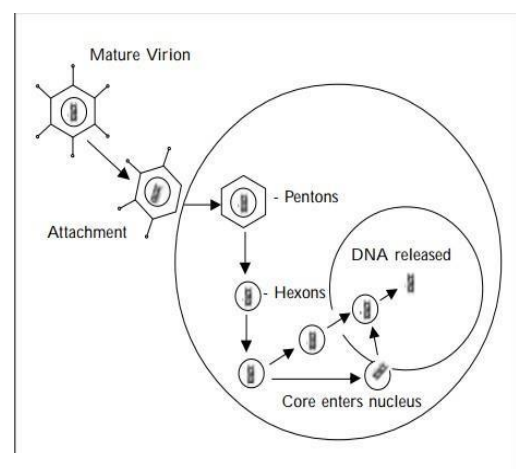


Fig. 4 Ciclo de replicación de Adenovirus 36.

la fase "tardía" con la expresión de los genes tardíos y el ensamblaje de los viriones de la progenie.

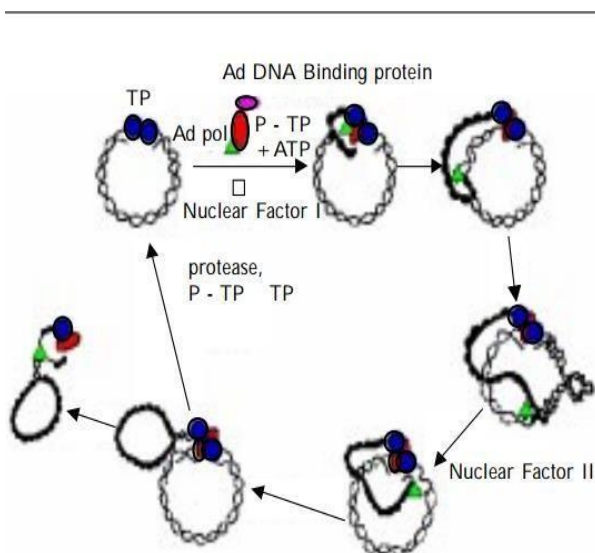
Adsorción y entrada: El enlace de los adenovirus a las células está mediado por la proteína fibrosa. El dominio distal del carboxilo terminal de la proteína fibrosa termina en un botón que se piensa se enlaza al receptor celular (28). Se ha demostrado que la proteína del receptor Coxsackievirus-adenovirus (receptor CAR) funciona como una proteína de acoplamiento celular para los serotipos del adenovirus de los subgrupos A, e, D, E Y F. Posteriormente, en un proceso que se ha demostrado es independiente de la interacción fibra-eAR, la proteína viral de la base pentona se enlaza a las integrinas celulares U v a través de un grupo tripéptido de la base pentona, seguida por la internalización de la partícula del virus. Sin embargo, los virus del grupo D podrían entrar a través de una ruta independiente de CAR, posiblemente por interacción directa de la base pentona e integrinas U v.

Activación de los genes virales tempranos: Existen tres funciones principales para la expresión del gen adenoviral temprano: (1) inducir a la célula hospedadora a entrar en la fase "S" del ciclo celular para ofrecer condiciones óptimas para la replicación viral; (2) establecer sistemas virales que protejan la célula infectada de las defensas antivirales del organismo hospedador; y (3) sintetizar productos del gen viral para la replicación del ADN viral. A continuación se describe brevemente el papel de las diferentes proteínas adenovirales.

Nombre	Localización	Función Conocida
II	Monómero de hexón	Estructural
III	Base pentón	Penetración
IIIa	Asociado con base pentón	Penetración
IV	Fibra	Unión a receptor, hemoaglutinación
V	Núcleo: asociado con DNA y base pentón	Similar a histona; empaquetamiento
VI	Polipéptido menor hexón	Estabilización/ensamblaje de partículas
VII	Núcleo	Similar a histona
VIII	Polipéptido menor hexón	Estabilización/ensamblaje de partículas
IX	Polipéptido menor hexón	Estabilización/ensamblaje de partículas
TP	Proteína terminal del genoma	Replicación de genoma

Fig. 5 Proteínas virales de Adenovirus 36.

Proteínas E1A: Una vez que el cromosoma viral llega al núcleo, E1A es la primera unidad de transcripción que se expresa. La transcripción E1A está controlada por un promotor constitutivo que también contiene un elemento estimulante duplicado. La unidad E1A codifica dos mARNs durante la fase temprana de infección y posteriormente 3 otras especies cuya función no se entiende completamente. Los dos mARNs tempranos codifican las proteínas



12S y 13S E1A, cuyo nombre se deriva del coeficiente de sedimentación de sus mARNs. Las proteínas E1A se conocen como transactivadores ya que pueden activar otros genes virales en transo La proteína 13S E1A se enlaza directamente a la proteína de enlace TATA y activa la transcripción. E1A también puede activar la transcripción enlazándose directamente a varios factores celulares como pRB, p300, ATF2 Y TBP. Los genes adenovirales tempranos se mantienen activos

Fig.6 Genoma viral de Adenovirus 36.

durante el ciclo de replicación viral aunque la velocidad de transcripción declina. E1A puede inducir a las células musculares esqueléticas terminalmente diferenciadas a sintetizar ADN y dividirse. Esto también ocurre con los miocitos, adipocitos y miocardiocitos.

Proteínas E1B: La unidad de transcripción adenoviral E1B codifica dos proteínas diferentes, E1B 55-57 kDa y E1B 19-21 kDa, que bloquean la inhibición del crecimiento inducido por p53 y la apoptosis. Las proteínas E1B antagonizan la detención del crecimiento y la apoptosis y cooperan con E1A para transformar oncogénicamente las células cultivadas. Su papel en la transformación oncogénica demuestra la capacidad de estas proteínas de interferir con los reguladores celulares normales.

Proteínas E2: La región E2 está subdividida en E2A y E2B y codifica 3 proteínas. Estas proteínas proporcionan la maquinaria para la replicación del ADN viral. La proteína terminal (TP) actúa como un cebador para la iniciación de la síntesis de ADN. El gene DBP (proteína de enlace del ADN adenoviral) codifica la proteína de enlace del ADN y el gen pVI codifica el ADN dependiente de la ADN polimerasa.

Proteínas E3: La unidad de transcripción del adenovirus E3 codifica siete proteínas, ninguna de las cuales se requiere para la replicación del virus en cultivo. Las proteínas de la unidad de transcripción E3 protegen a las células de la muerte mediada por las células citotóxicas T y las citoquinas inductoras de la muerte como el factor de necrosis tumoral (TNF), ligando FAS y ligando inductor de la apoptosis relacionada con TNF. Los estudios sobre el subgénero adenovirus C han demostrado que la mayoría de las proteínas E3 exhiben funciones inmunomoduladoras. La glicoproteína E3/19K previene la expresión de las moléculas MHC recién sintetizadas mediante la inhibición de la exportación de ER, mientras que los receptores de la proteína E3/10.4-14.5K regulan a la baja los receptores de la apoptosis desviándolos hacia los lisosomas. Se ha sugerido que E3/49K, otra proteína E3 recién descubierta, posee una actividad inmunomoduladora. Las proteínas de membrana E3 explotan la maquinaria de tráfico intracelular para la evasión inmune. Los adenovirus podrían incluir proteínas E3 no descubiertas que explotan las vías de tráfico intracelular como un medio para manipular las moléculas claves de importancia inmunológica.

Proteínas E4: la región E4 incluye siete marcos de lectura abiertos (ORF). Algunos de estos codifican las proteínas que contribuyen a la regulación del ciclo celular. Se ha demostrado que los productos de varios E4 ORF participan en la transformación de la célula hospedadora.

Proteína intermedio IVa2 y IX: la proteína adenoviral IVa2 participa en el ensamblaje del adenovirus. La proteína IX es una proteína multifuncional que estabiliza la cápside y posee actividad transcripcional.

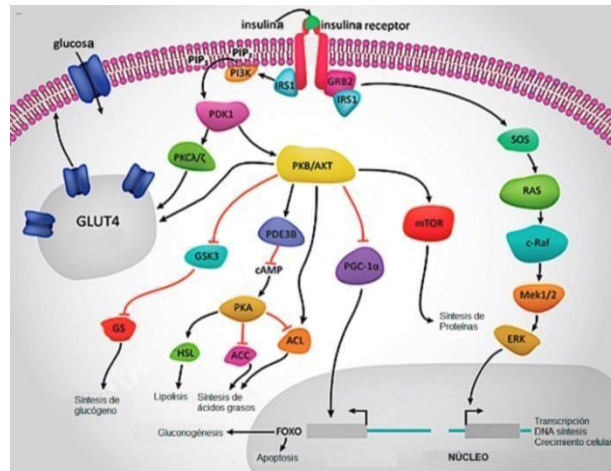
Transcripción tardía: la transcripción de fase tardía está controlada principalmente por el promotor tardío principal. La transcripción a partir de este promotor implica una poliadenilación múltiple y división elaborada del ARN. Pueden identificarse cinco agrupamientos de genes (II-15) en esta región. Estos genes codifican principalmente las proteínas estructurales de virión. Al terminarse el ensamblaje del virus, se rompe la pared de la célula hospedadora y se liberan los viriones para nuevas infecciones. El ensamblaje completo del virus ocurre en las células permisivas.

1.4.4 RELACIÓN DE OBESIDAD CON ADENOVIRUS 36

En 1978, se aisló el Ad-36 por primera vez en Alemania, en las heces de una niña de 6 años que padecía diabetes y enteritis. El Ad-36 pertenece al subgrupo D y es diferente tanto en neutralización como en la inhibición de la hemaglutinación de todos los demás adenovirus humanos. El Ad-36 es el primer adenovirus humano asociado con la obesidad humana.

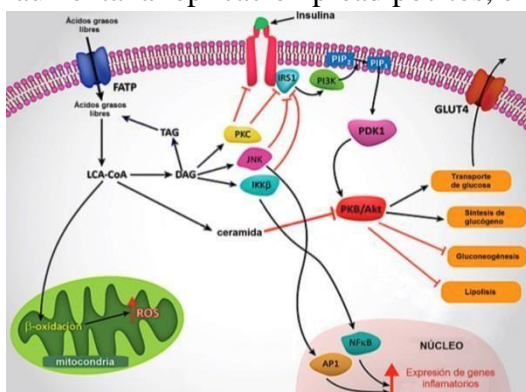
El adenovirus humano tipo 36 aumenta la grasa corporal en animales infectados experimentalmente y muestra una asociación con la obesidad humana. El Ad-36 estimula los pre-adipocitos (pre-células grasas) para diferenciarlos en adipocitos (células grasas) y aumentar el número de células grasas y su contenido de lípidos. El Ad-36 puede inducir la diferenciación de los pre-adipocitos aun en ausencia de inductores convencionales de diferenciación tales como el cóctel de metil isobutil xantina, dexametasona e insulina (MOI) . Se observa un efecto similar del virus en la adiposa humana derivada de células madre. Las ratas infectadas con Ad-36 demostraron una mayor adiposidad, pero paradójicamente una menor resistencia a la insulina 7 meses después de la infección. Más aún, las células grasas de las ratas no infectadas al infectarse con Ad-36 muestran una mayor captación de glucosa, lo que indica una mayor sensibilidad a la insulina.

Fig. 7 Múltiples funciones de la insulina.



También se observa una mayor sensibilidad a la insulina a pesar del aumento en la grasa corporal en los medicamentos antidiabéticos de la clase de las tiazolidindionas. Las TZOs aumentan la replicación pre-adipocitos, diferenciación y acumulación de lípidos y aumentan la sensibilidad a la insulina de todo el cuerpo. Se piensa que el efecto de sensibilización a la insulina de las TZOs se debe a su efecto sobre la replicación pre-adipocitos y diferenciación (que genera nuevos adipocitos más pequeños) y sobre PPARγ (un gen importante en la diferenciación adipocita y ruta de señalamiento de la insulina). Se demuestra que la sensibilidad a la insulina en humanos se relaciona inversamente con el tamaño del adipocito.

Los factores que se requieren para una sensibilidad aumentada a la insulina incluyen un mayor número de pre-adipocitos y diferenciación, y activación de AMPc y enzimas de las vías de señalamiento de la insulina (por ejemplo, fosfotidil inositol-3 quinasa (PI3K o PI3 quinasa) . A su vez, la diferenciación de pre-adipocitos está modulada por la activación de la PI3 quinasa y las vías de señalamiento de AMPc (43-48). Se ha demostrado que Ad-36 aumenta la replicación preadipocitos, el número de adipocitos diferenciados y las vías de PI3 quinasa.



Jeremy Laurence a través de “The Independent” publicó en el periódico “La jornada” el 23 de Septiembre del 2010 una investigación por parte de unos científicos de la Universidad de California en San Diego, en la que se dice que versiones anteriores de este agente infeccioso, llamado *bicho*

Fig. 8 Modelo de cómo el exceso de ácidos grasos libres, conducen a la resistencia a la insulina.

gordo, causan el resfriado común y está ampliamente relacionado con el incremento de la obesidad de adenovirus.

Ahora, científicos de la Universidad de California en San Diego han descubierto que niños mostraron indicios de infección con adenovirus 36 tenían más probabilidades de ser obesos. En pruebas realizadas en 124 menores de 18 años, el virus estaba presente en más del 20% de los que eran obesos, en comparación con menos del 6% en los demás. Entre los infectados con adenovirus 36, cuatro de cada cinco eran obesos.

Los menores portadores pesaban en promedio casi 25 más que los no portadores. Entre los obesos que constituían la mitad del total, los que portaban el virus pesaban en promedio 17 kilos más que los otros.

1.4.5 ADIPOSIDAD INDUCIDA POR AD-36

El proceso de la diferenciación de adipocitos comprende la detención del crecimiento, seguida por una fase de expansión clonal y terminando con la expresión de los factores clave de transcripción y diferenciación terminal. El proceso de diferenciación en pre-adipocitos de rata (células 3T3-L1) puede iniciarse por la exposición de las células confluentes a metil-isobutilxantina, dexametasona e insulina (MDI). Durante la diferenciación, los genes que son inhibidores de la adipogénesis o innecesarios para la función de las células grasas se reprimen (por ejemplo, disminución de Pref-1, CUP y PRE). Sin embargo, la expresión de los genes tempranos, intermedios y tardíos de diferenciación (por ejemplo) aumenta, seguida por la expresión de C/EBP α y PPAR γ , Y finalmente seguidos por la acumulación de lípidos. La expresión de CEBP/f3 es crítica para la activación de PPAR y otros genes pre-adipogénicos subsiguientes. La coexpresión de C/EBP α y C/EBP ϵ induce la expresión de PPAR γ , que es el más adiposo específico de los PPARs (a, eS y y). La expresión de PPAR γ conjuntamente con CEBP α lleva a la activación de varios genes, incluyendo aP2, GLUT4, SCD1, PEPCK y leptina. Y a la terminación del proceso de diferenciación.



Fig. 9 Modelo simplificado de adipogénesis.

1.5 HIPÓTESIS

Si hay casos de obesidad en niños causado por el Adenovirus 36. Debido a que el virus causa que las células troncales adultas al estar en contacto con el Ad-36 se transformen en adipocitos.

1.6 METODOLOGÍA DE LA INVESTIGACIÓN

Se eligió la **Investigación Explicativa** porque se busca saber la relación que hay entre un biológico (adenovirus 36) y los niños obesos, por lo que se necesita dar una razón que causa la obesidad en los pacientes pediátricos.

1.7 POBLACIÓN, UNIVERSO Y MUESTRA

La investigación se llevará a cabo en el Hospital General de Zapotlán, se enfocará en niños obesos de 6 años; la decisión se toma en base a los derechos éticos del paciente y de la institución. Además, de ser la edad más adecuada para que los factores extrínsecos nos ayuden a tener el éxito en los procedimientos.

El universo será de 100 individuos, divididos por sexo: niños y niñas; con la finalidad de mantener un control y llevar a cabo el control estadístico de manera más segura y eficaz. Se informará acerca del consentimiento informado, los permisos éticos del Hospital General de Zapotlán. Posteriormente, pasaremos a la recolección de una recolección de muestras nasofaríngeas y en el último una muestra de tejido adiposo para analizarlo posteriormente.

1.8 VARIABLES

Como variables independientes de tiene considerado:

- Economía.
- Género.
- Actividad física.
- Nutrición.

1.9 MATERIAL

Las mediciones se llevarán a cabo sobre la muestra del estudio que se citarán a continuación:

- Adipocitos.
- Nasofaríngeas.
- ADN.

Para estudiar la relación de la obesidad con el adenovirus 36 se utilizará un test de elaborado por MONOLAB, dicho aparato tiene un precio de \$35,000 el paquete en Guadalajara, Jalisco, México.

Además del material de laboratorio para realizar los siguientes exámenes:

- Consentimiento Informado por parte de padres de familia.
- Autorización Ética del Hospital General de Zapotlán #9.
- Muestra Nasofaríngea para RSV- Adenovirus MONOLAB Test.
- Biopsia de adipocitos.

- RT-PCR (Retro transcriptasa, Reacción de la Cadena de Polimerasa).

Bibliografía

- Anon, (2015). [online] Available at: <http://www.evidenciasenpediatria.es/files/41-11024-RUTA/79AVC.pdf> [Accessed 18 Nov. 2015].
- Anon, (2015). [online] Available at: <http://reocities.com/plin9k/fdocc-genes-obesidad.pdf> [Accessed 18 Nov. 2015].
- Anon, (2015). [online] Available at:
http://exa.unne.edu.ar/bioquimica/inmunoclinica/documentos/Laboratorio_TPN8.pdf
[Accessed 18 Nov. 2015].
- Anon, (2015). [online] Available at:
<http://www.monlab.es/document/Muestras%20Nasofaringeas/IFU%20RSV-Adenovirus%20combo%20monlabtest.pdf> [Accessed 18 Nov. 2015].
- Anon, (2015). [online] Available at:
<http://www.jornada.unam.mx/2010/09/23/ciencias/a02n1cie> [Accessed 18 Nov. 2015].
- Anon, (2015). [online] Available at:
<http://www.jornada.unam.mx/2007/08/23/index.php?section=ciencias&article=a03n1cie>
[Accessed 18 Nov. 2015].
- Anon, (2015). [online] Available at:
<http://www.fundacionmhm.org/pdf/Mono6/Articulos/articulo1.pdf> [Accessed 18 Nov. 2015].
- Anon, (2015). [online] Available at:
<http://www.fundacionmhm.org/pdf/Mono6/Articulos/articulo1.pdf> [Accessed 18 Nov. 2015].
- Cordis.europa.eu, (2015). *Comisión Europea : CORDIS : Noticias y Eventos : Descubren una relación entre el ADN y la obesidad.* [online] Available at:
http://cordis.europa.eu/news/rcn/31727_es.html [Accessed 18 Nov. 2015].
- El Confidencial, (2015). *AD-36, el virus contagioso que explica por qué estamos gordos . Noticias de Alma, Corazón, Vida.* [online] Available at:
http://www.elconfidencial.com/alma-corazon-vida/2014-06-08/ad-36-el-virus-contagioso-que-explica-por-que-estamos-gordos_140325/ [Accessed 18 Nov. 2015].
- EL INFORMADOR, (2015). *Más de tres millones de jaliscienses, con obesidad y sobrepeso.* [online] Available at: <http://www.informador.com.mx/jalisco/2015/615909/6/mas-de-tres-millones-de-jaliscienses-con-obesidad-y-sobrepeso.htm> [Accessed 18 Nov. 2015].

- ILSO, Instituto Latinoamericano de Sobrepeso y Obesidad, A.C., (2015). *Adenovirus 36 obesidad y sobrepeso por infección viral*. [online] Available at: <http://www.ilsoeducacion.com/index.php/blog/29-adenovirus-36-obesidad-y-sobrepeso-por-infeccion-viral> [Accessed 18 Nov. 2015].
- Macneal.com, (2015). *Health Library, Health Care Information, MacNeal Hospital Berwyn*. [online] Available at: <http://www.macneal.com/patients/healthLibrary.aspx?chunkiid=231221> [Accessed 18 Nov. 2015].
- Psicología, A. (2015). 5. *La obesidad infantil en México*. [online] Alternativas.me. Available at: <http://alternativas.me/index.php/numeros/28t/32-5-la-obesidad-infantil-en-mexico> [Accessed 18 Nov. 2015].
- S.E.M.E., (2015). *La infección por adenovirus podría estar relacionada con el desarrollo de obesidad*. [online] Available at: http://www.seme.org/area_seme/actualidad_articulo.php?id=1026 [Accessed 18 Nov. 2015].
- Sisbib.unmsm.edu.pe, (2015). *Fisiopatología de las Infecciones por Adenovirus*. [online] Available at: http://sisbib.unmsm.edu.pe/bvrevistas/paediatria/v04_n2/fisiopatolog%C3%ADa.htm [Accessed 18 Nov. 2015].
- Solociencia.com, (2015). *Virus obesidad adenovirus*. [online] Available at: <http://www.solociencia.com/medicina/06022705.htm> [Accessed 18 Nov. 2015].
- Tableroredesdiabetes.com, (2015). *Estrategia Nacional para la Prevención y el Control del Sobrepeso, la Obesidad y la Diabetes*. [online] Available at: <http://www.tableroredesdiabetes.com/DirApp/tableros/detecciones.aspx> [Accessed 18 Nov. 2015].
- Unicef.org, (2015). *UNICEF México - Salud y Nutrición - Infancia y salud*. [online] Available at: <http://www.unicef.org/mexico/spanish/17047.htm> [Accessed 18 Nov. 2015].
- Who.int, (2015). *OMS | ¿Qué son el sobrepeso y la obesidad?*. [online] Available at: http://www.who.int/dietphysicalactivity/childhood_what/es/ [Accessed 18 Nov. 2015].
- Who.int, (2015). *OMS | Obesidad*. [online] Available at: <http://www.who.int/topics/obesity/es/> [Accessed 18 Nov. 2015].
- Who.int, (n.d.). *OMS | Sobrepeso y obesidad infantiles*. [online] Available at: <http://www.who.int/dietphysicalactivity/childhood/es/> [Accessed 18 Nov. 2015].
- Wwwnc.cdc.gov, (2015). *Adenovirus 36 DNA in Adipose Tissue of Patient with Unusual Visceral Obesity - Volume 16, Number 5—May 2010 - Emerging Infectious Disease journal - CDC*. [online] Available at: http://wwwnc.cdc.gov/eid/article/16/5/09-1271_article [Accessed 18 Nov. 2015].

DAÑO AL ADN INDUCIDO POR EL MERCURIO LIBERADO POR AMALGAMAS DENTALES MEDIANTE EL CONTEO DE MICRONÚCLEOS Y ANORMALIDADES NUCLEARES EN CÉLULAS DE MUCOSA BUCAL DE PACIENTES ODONTOPEDIÁTRICOS

MACIAS LAMAS NALLELI GUADALUPE ⁽¹⁾, ZAMORA PÉREZ ANA LOURDES ⁽²⁾,
MACIAS LAMAS ADRIANA MACARIA ⁽³⁾

⁽¹⁾ Universidad de Guadalajara, Guadalajara, México cdmaciaslamas@hotmail.com

⁽²⁾ Universidad de Guadalajara, Guadalajara, México. anazamora@gmail.com

⁽³⁾ Universidad de Guadalajara, Guadalajara, México. amaciaslamas@yahoo.com

RESUMEN. La amalgama de plata es utilizada **para restaurar superficies dentales cariadas**. Está compuesta por mercurio, plata, cobre, estaño y zinc. El mercurio es catalogado como material peligroso y tóxico. La genotoxicidad del mercurio es atribuida a su capacidad de reaccionar con los grupos sulfhídricos de la tubulina, ocasionando disrupción del huso mitótico formando micronúcleos (MN). El monitoreo al daño genético mediante el ensayo de MN, es una herramienta útil en la identificación y prevención de los posibles agentes que pueden interaccionar negativamente con el ADN. Objetivos: Determinar el número de MN y anormalidades nucleares (AN) en células de mucosa bucal de individuos expuestos a amalgama dental. Material y métodos: Se formaron tres grupos: grupo 1 o control (n=60), grupo 2 o individuos con amalgama que se les colocaron nuevas restauraciones (n=25) y grupo 3 o individuos sin amalgama que se le colocaron restauraciones (n=20). Se tomaron muestras al inicio del estudio, 15 días y 30 después de haber colocado las nuevas obturaciones.

Las muestras se fijaron y se tiñeron para su observación al microscopio de fluorescencia y se contó el número de MN y AN. Resultados: En el grupo 2 hubo incremento significativo en el número de células con micronúcleos, cariolisis, cromatinas condensadas y picnosis. En el grupo 3 se observaron incrementos en todos los marcadores genotóxicos y citotóxicos. En la comparación de los grupos 2 Y 3 se observó que incrementaron significativamente los marcadores genotóxicos en el grupo 2 y los marcadores citotóxicos en el grupo 3. Conclusiones: Las obturaciones de amalgama dental muestran incremento significativo de MN y AN en células de mucosa bucal. Palabras clave. Amalgama dental, Mercurio, ADN.

ABSTRACT. Silver amalgam is used to restore carious tooth surfaces. It consists of mercury, silver, copper, tin and zinc. Mercury classified as hazardous and toxic material. Genotoxicity mercury is attributed to its ability to react with the sulfhydryl groups of tubulin, resulting in disruption of the mitotic spindle forming micronuclei (MN). Monitoring genetic damage by MN assay is a useful tool in the identification and prevention of potential agents that can negatively interact with DNA. Objectives: To determine the number of MN and nuclear abnormalities (AN) in buccal mucosa cells in individuals exposed to dental amalgam. Material and Methods: group 1 or control (n=60), group 2, or individuals with amalgam were placed new fillings (n=25) and group 3 or individuals without amalgam and with a new restorations (n = 20). Three samples were taken: a baseline 15 and 30 days after placing new fillings. Samples were fixed and stained for observation under fluorescence microscope and the number of MN and AN were counted. Results: In group 2 was observed significant increase in the number of MN, karyolysis, condensed chromatin and picnosis. In group 3 increases were observed in all genotoxic and cytotoxic markers. Comparing groups 2 and 3 was observed that genotoxic markers significantly increased in group 2 and cytotoxic markers in group 3. Conclusions: The dental amalgam show significant increase of MN and NA in cells of oral mucosa. Key Words. Dental amalgam, Mercury, DNA.

INTRODUCCIÓN

La amalgama dental es uno de los materiales restauradores más utilizados, ha sido un material confiable y seguro por más de un siglo (Gómez, 2010), está compuesta por mercurio líquido 50%, plata 35%, cobre 2%, estaño 13% y en ocasiones zinc. El mercurio (Hg) es un elemento metálico, pesado, líquido a temperatura ambiente, catalogado como un material peligroso, es un tóxico ambiental causante de numerosos efectos adversos en la salud humana y en los ecosistemas naturales; sin embargo, este metal ha sido utilizado ampliamente en la industria y en la medicina (Etzel, Morales, 2003). El Hg se presenta en tres variedades: metálico o elemental (Hg⁰), sales inorgánicas (Hg²⁺, Hg⁺²) y compuestos orgánicos (MeHg, etilHg y fenilHg).

La solubilidad, reactividad, efectos biológicos y toxicidad difieren entre estas variedades (Etzel, 2003). El MeHg (metil-Hg) es uno de los contaminantes más importantes de los alimentos, siendo una de las formas más dañinas para el organismo puesto que se acumula en el organismo y junto con el Hg elemental constituyen la fuente potencialmente tóxica más importante del Hg en los ambientes laborales (Velásquez, 2003). El MeHg, al ser una sustancia lipofílica, atraviesa con facilidad las membranas biológicas, la ruta de exposición oral es la más importante absorbiéndose por la piel y los pulmones (Aberg, 1969).

Otra forma de exposición de este metal es el vapor de Hg, el cual es absorbido en un 80-90 % (Gómez, 2010) que a través de los pulmones, llega al flujo sanguíneo donde debido a su alta propiedad lipofílica atraviesa la membrana celular de los eritrocitos donde es oxidado (Curry, 1974) posteriormente, atraviesa la barrera hematoencefálica llegando al cerebro, donde causa

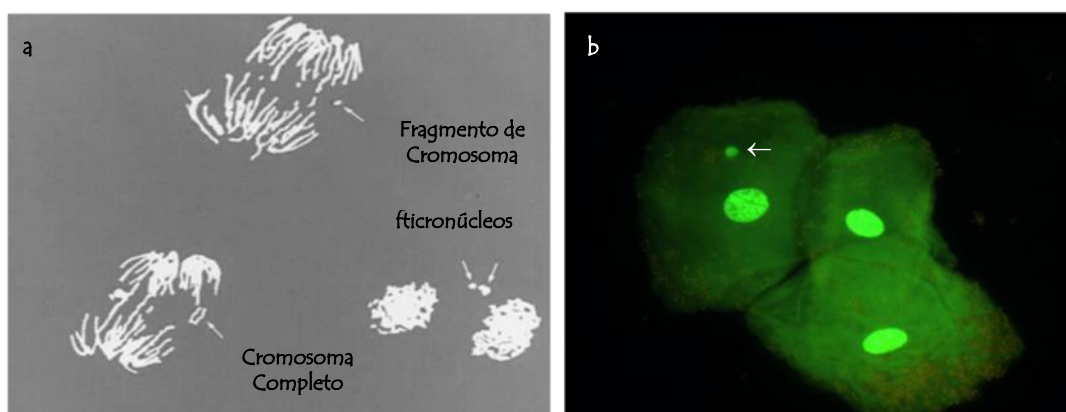
un daño serio en el sistema nervioso central (SNC), que se traduce en dificultades de coordinación y en el deterioro progresivo de los sentidos visual y táctil (Baird, 1997). El Hg presente en las amalgamas dentales se encuentra en su forma metálica que es poco tóxica; sin embargo, este metal se evapora a 25°C, presentándose como vapor de Hg que es muy tóxico.

Considerando que al tomar bebidas calientes como café, té o chocolate, las temperaturas en la boca pueden llegar a 40 y 60°C, liberándose vapor de mercurio de manera constante, proporcionando al paciente una exposición crónica (Bjorkman, 1992). Además, siempre que se coloca amalgama dental en un diente dentro de la cavidad oral, una minúscula cantidad de Hg se evapora cuando éste interviene en la masticación (Crespo, 2005).

La genotoxicidad del Hg es usualmente atribuida a su capacidad de reaccionar con los grupos sulfhídricos de la tubulina, lo que ocasiona disrupción del huso mitótico y con ello la formación de aberraciones cromosómicas así como MN (De Flora, 1994). Otro mecanismo importante de la genotoxicidad del Hg es su capacidad de producir radicales libres que causan daño al ADN (Schurz, 2000; Ehrenstein, 2002). Los compuestos de mercurio inducen el colapso general de los mecanismos antioxidantes en la célula mediante la unión a los grupos sulfhidrido de glutatión, el barredor de radicales. Tales resultados generan un colapso celular, pérdida de integridad de la membrana y finalmente necrosis celular (Schurz, 2000). Por otro lado, se ha visto un incremento de aberraciones cromosómicas en cultivos de linfocitos expuestos a concentraciones de Hg utilizado en amalgamas dentales (Akiyama, 2001), lo que demuestra que el monitoreo citogenético *in vitro* por medio de linfocitos de sangre periférica en individuos expuestos a Hg por diferentes fuentes, no es completamente específico por lo que es importante implementar alternativas *in vivo* como sería la prueba de MN en células de mucosa bucal con la ventaja sobre la prueba de linfocitos, ya que puede llevarse a cabo de forma directa, sin la elaboración de cultivos (Sarto, 1983; Livingston, 1990).

Ensayo de micronúcleos

Los MN son fragmentos de cromosomas o cromosomas completos que de manera espontánea o por causa de agentes genotóxicos, son excluidos del núcleo en mitosis (Schmid, 1975; Corazza, 1990) y mediante su estudio se pueden evaluar los efectos de los genotóxicos y carcinógenos ambientales y ocupacionales. Esta técnica es posible realizarla en diferentes especies, tales como animales de laboratorio e incluso en el humano, así como en una gran



variedad de tejidos que se dividen continuamente (Zúñiga, 1996; Torres-Bugarín, 1998; Zúñiga-González, 1998; Zúñiga-González, 2000; Zamora-Perez, 2004) como es el caso de células de descamación de la mucosa bucal (Sarto, 1987; Tolbert, 1992; Torres-Bugarín, 1998).

Su formación se basa en el siguiente principio: en anafase, cualquier fragmento cromosómico que no posea centrómero no podrá integrarse a un núcleo, pues carece del elemento indispensable para orientarse en el huso acromático. Después de la telofase, los cromosomas normales, así como los fragmentos que posean centrómero, darán origen a los núcleos de las células hijas, los elementos rezagados que pueden ser fragmentos o cromosomas completos quedan incluidos en el citoplasma de las células hijas y son transformados en uno o varios núcleos secundarios, que como regla son más pequeños que el núcleo principal y de ahí el nombre de MN (Schmid, 1975) (Figura 1).

Figura 1.- Ensayo de micronúcleos. a) Formación de micronúcleos: células en metafase; b) Célula micronucleada de mucosa bucal.

Ensayo de micronúcleos en mucosa bucal

El epitelio es un tejido avascular compuesto por células que recubren las superficies externas del cuerpo y revisten las cavidades internas. La cavidad bucal está tapizada por la mucosa masticatoria, mucosa de revestimiento y mucosa especializada. La mucosa masticatoria se encuentra en las encías y en paladar duro posee un epitelio plano estratificado queratinizado y en algunos casos paraqueratinizado. La mucosa de revestimiento está en los labios, mejillas, piso de la boca y paladar blando y en general no está queratinizado. El epitelio de revestimiento no queratinizado está compuesto por tres capas:

- Estrato basal: es una sola capa de células que se apoyan sobre la lámina basal.
- Estrato espinoso: cuenta con varias capas de células de espesor.
- Estrato superficial: es la capa de células más externa, también conocida como capa superficial de la mucosa o estrato granular.

En la mucosa bucal, la presencia de células con MN se ha asociado a alteraciones citológicas de individuos fumadores de tabaco, consumidores de alcohol, comidas condimentadas, en personas sometidas a quimioterapia antineoplásica, así como en personas expuestas a radiaciones ionizantes (Stich, 1983; Sarto, 1987; Tolbert, 1992; Torres-Bugarín, 2004). Los MN en mucosa bucal reflejan el efecto genotóxico ocurrido en las células de la capa basal, de donde migran a la capa epitelial y son detectadas en las células exfoliadas en el transcurso de las siguientes tres semanas (Figura 2); esta técnica tiene la ventaja de utilizarse directamente sin la elaboración de cultivos (Tolbert, 1992; Torres-Bugarín, 1998). El uso de la prueba de MN en células exfoliadas permite identificar y cuantificar el grado de daño genotóxico en tejidos humanos que son blanco de compuestos, que podrían generar cáncer. Esta prueba se ha

usado exitosamente para reconocer poblaciones con alto riesgo de cáncer en cavidad oral (Torres-Bugarín, 1998; Torres-Bugarín, 2004).

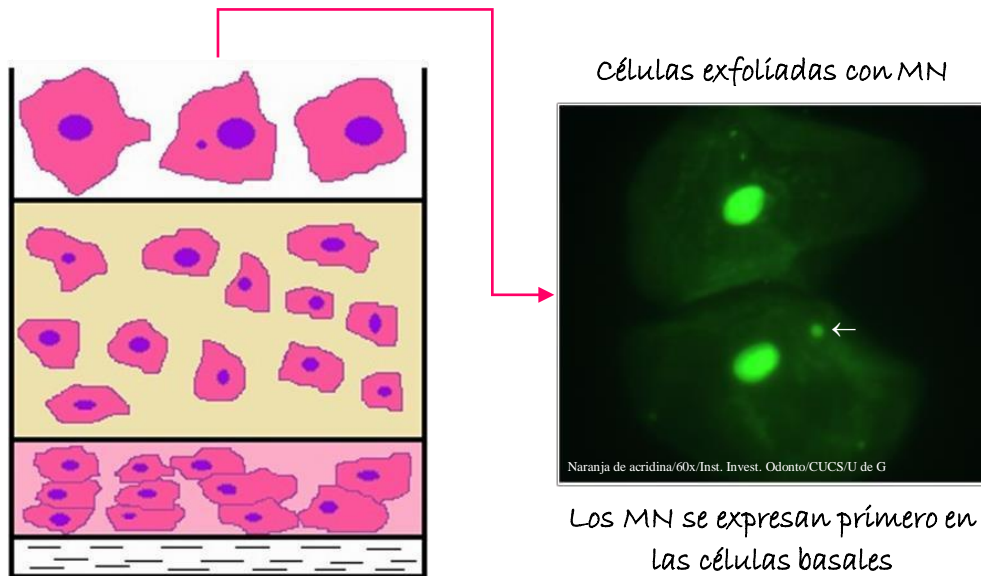


Figura 2.- Esquema de las capas epiteliales de la mucosa bucal y la exfoliación de una célula con micronúcleos.

Anormalidades nucleares en mucosa bucal

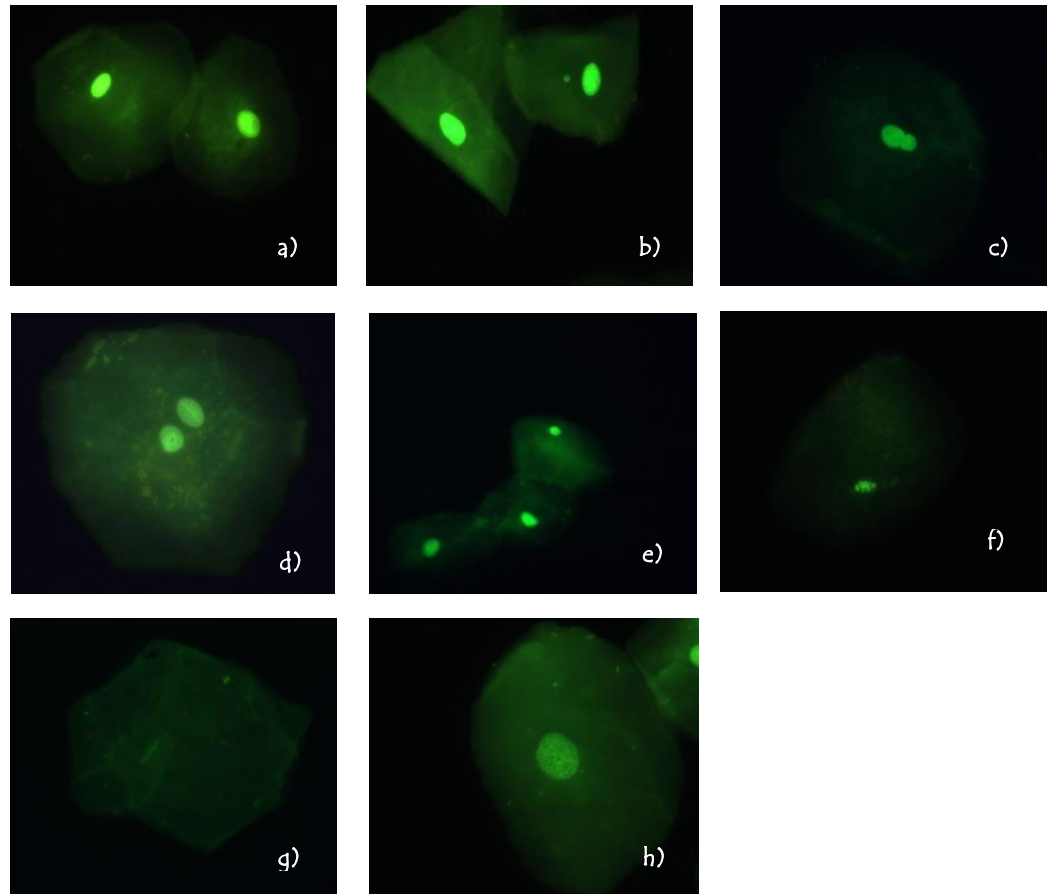
El análisis de anomalías nucleares en células epiteliales, es otra manera de analizar el daño producido por agentes carcinogénicos, en donde las alteraciones más sugestivas en la morfología de las células neoplásicas se producen en el núcleo, donde las modificaciones son el tamaño, densidad y distribución de la cromatina (Ham, 1976; Thomas, 2009).

Los fenómenos más comúnmente descritos son los siguientes:

- Binucleación (BN), presencia de dos núcleos en una célula.
- Cariólisis (CL) o disolución nuclear se observa una imagen fantasmal.
- Cariorrexis (CR) o desintegración nuclear, que involucra la pérdida de la integridad nuclear.

- Cromatina anormalmente condensada (CC), la cromatina nuclear se encuentra anormalmente agregada.
- Picnosis (PIC) o núcleo pequeño.
- Prolongación nuclear (PN) o “Broken-egg”, el núcleo se observa constreñido (Figura 3).

Figura 3.-
Fotografías de las anomalías nucleares en células de mucosa bucal. a) Células normales; b) Célula micronucleada; c) Célula con prolongación nuclear; d) Célula Binucleada; e) Célula picnotica; f) Célula con Cariorexis; g) Célula cariolitica; h) Célula con cromatina condensada. Tinción naranja de acridina, objetivo 60X (Fuente directa)



OBJETIVO

El objetivo de este estudio fue determinar el daño al ADN inducido por el mercurio liberado por amalgamas dentales mediante el conteo de micronúcleos y anomalías nucleares en células de mucosa bucal de pacientes odontopediátricos.

MATERIAL Y MÉTODOS

El Diseño de estudio fue observacional, prospectivo, longitudinal, comparativo. El universo de trabajo estuvo compuesto por individuos pediátricos voluntarios de ambos sexos, sanos que aceptaron participar en el estudio y que acudieron a la Clínica de la Especialidad de Odontopediatría de las Clínicas odontológicas integrales del Centro Universitario de Ciencias de la Salud de la Universidad de Guadalajara que requerían restauraciones con amalgama dental. El muestreo se realizó por un método no probabilístico de colecta por selección consecutiva y análisis de muestra. Se formaron tres grupos: grupo 1 o control, grupo 2 o individuos con amalgama que se les colocaron nuevas restauraciones y grupo 3 o individuos sin amalgama que se le colocaron restauraciones. Una vez que se consideraron como

voluntarios se procedió a obtener el consentimiento informado para participar en el estudio, previo al llenado del cuestionario, a todos las participantes se les tomó muestras de mucosa bucal de carillo y se realizaron dos frotis por participante. En el grupo 1 se tomaron dos muestras: una basal y otra 30 días después; el grupo 2 y 3 se muestrearon al inicio del estudio, 15 días y 30 después de haber colocado las nuevas obturaciones de amalgama dental.

Para el muestreo se les pidió a los participantes que se enjuagaran la boca con agua; después, con un portaobjetos se hizo un raspado de la mucosa bucal de los carillos y se extendieron las muestras en otra laminilla limpia y desengrasada, se repitió la operación para tener muestra duplicado. Las muestras se dejaron secar al aire y se fijaron en metanol al 80% por 48 h, y se procedió a la tinción con naranja de acridina (Zúñiga-González, 2003) colorante específico para ácidos nucleicos, el cual emite fluorescencia y dado que el núcleo y los MN están formados de ADN, esta propiedad es aprovechada para la visualización de MN, los cuales al igual que el núcleo de la célula, aparecen de color amarillo o verde brillante cuando son observados con microscopia de fluorescencia, mientras que el citoplasma se tiñe de verde opaco semitransparente.

Las muestras de mucosa bucal de células de carillo se observaron con el objetivo 60x y 100x en un microscopio marca Olympus modelo CX31, con sistema iluminador de fluorescencia OLYMPUS modelo CX-RFLT50 (lámpara de mercurio 50W y filtro de fluorescencia azul DMB-2 OLYMPUS) y sistema fotográfico digital OLYMPUS modelo SC3512Y. Se contaron las células con MN y AN de carrillo en 2,000 células por muestra (Tolber, 1992; Torres-Bugarín, 2009; Ceppi, 2010).

Las características tomadas en cuenta para considerar a una célula como normal, MN o con alguna de las AN fueron las siguientes (Torres-Bugarín, 1998; Torres-Bugarín, 2009):

Célula normal: citoplasma intacto y relativamente homogéneo, poco o ningún empalme con células adyacentes, núcleo normal, intacto y homogéneo, con perímetro nuclear liso y distinguible. Célula con MN: Se tomó en cuenta que tenga las características de la célula normal, además de que el MN tenga forma redonda o almendrada, con un tamaño menor a un tercio del núcleo, con ausencia de empalme o puente con el núcleo, así como intensidad de tinción y plano focal similar al del núcleo. Células con PN: Se consideró cuando la prolongación sea originada a partir del núcleo, cuando se encuentre parcialmente sobrepuesta al núcleo o cuando presente forma de gota en la que se observara o presumiera que existiera una hebra unida al núcleo.

Célula con núcleo picnótico: Se consideró cuando el citoplasma de la célula este intacto y bien definida la membrana nuclear, ausencia de residuos de colorante o empalme, perímetro del núcleo liso, coloración más intensa que la del núcleo normal, así como el tamaño menor a la mitad del núcleo normal. Célula con cromatina condensada: Se consideró con citoplasma y membrana celular uniforme, perímetro celular bien definido, membrana nuclear bien definida, contenido nuclear agregado en pequeños puntos y el color de la cromatina similar al del núcleo normal.

Célula con cariorrexis: Se consideró con membrana celular no definida, y la ausencia de material nuclear, pero con un jalo de naranja de acridina positivo en el citoplasma celular.
Célula binucleada: Se consideró que ambos núcleos estén en el mismo plano focal y con la misma intensidad de color
Cariólisis: Se consideró la disolución nuclear, imagen fantasmal del núcleo.

Para establecer las diferencias entre los grupos se utilizó la prueba de U de Mann-Whitney para muestras independientes. Se consideró estadísticamente significativo cuando el valor de P sea <0.05 . Las pruebas estadísticas se realizaron por medio del programa SPSS (v.11.0) para Windows®. El número de MN y AN obtenido en cada grupo de estudio se expresaron como promedio \pm desviación estándar.

RESULTADOS

Se analizaron en total 255 muestras de células de carrillo de 105 individuos. En el cuadro 1 se presentan las características de los participantes con respecto a edad y género. El total de los participantes estuvo constituido por 61.9% niñas y 38.1% niños.

Cuadro 1. Características generales de los participantes del estudio por grupo

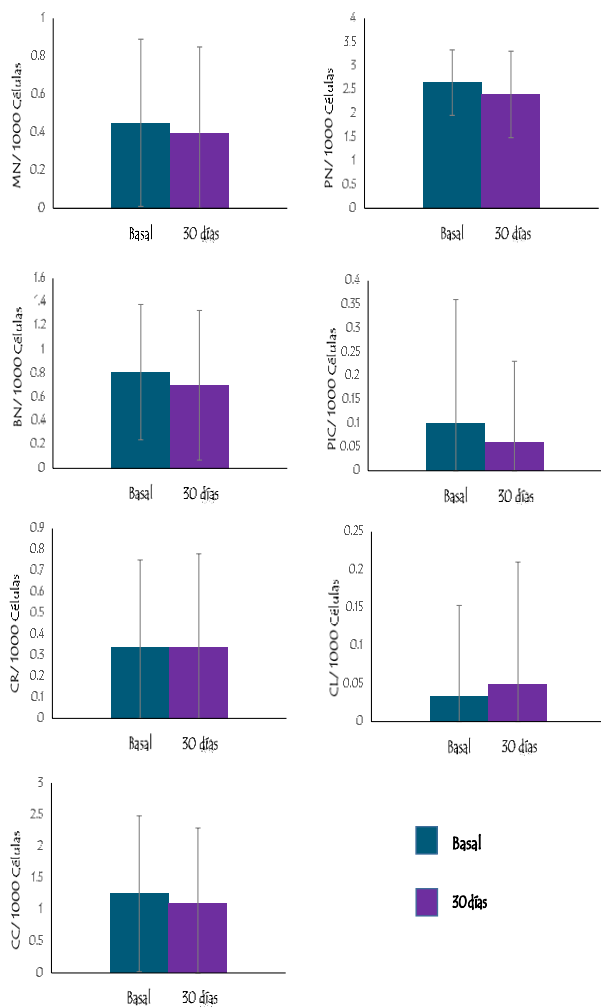
Variable	Grupos		
	1: Control n (%)	2: Con amalgama n (%)	3: Sin amalgama n (%)
Número de participantes	60 (100%)	25 (100%)	20 (100%)
Masculino	18 (30%)	11 (44%)	11 (55%)
Femenino	42 (70%)	14 (56%)	9 (45%)
Edad	7.06 \pm 1.72	6.88 \pm 1.69	7.05 \pm 1.70

La edad en años de los participantes se expresa como promedio \pm DE; (%): representan el porcentaje obtenido de las variables a partir del total de participantes; n: tamaño de la muestra, DE: desviación estándar (Fuente directa).

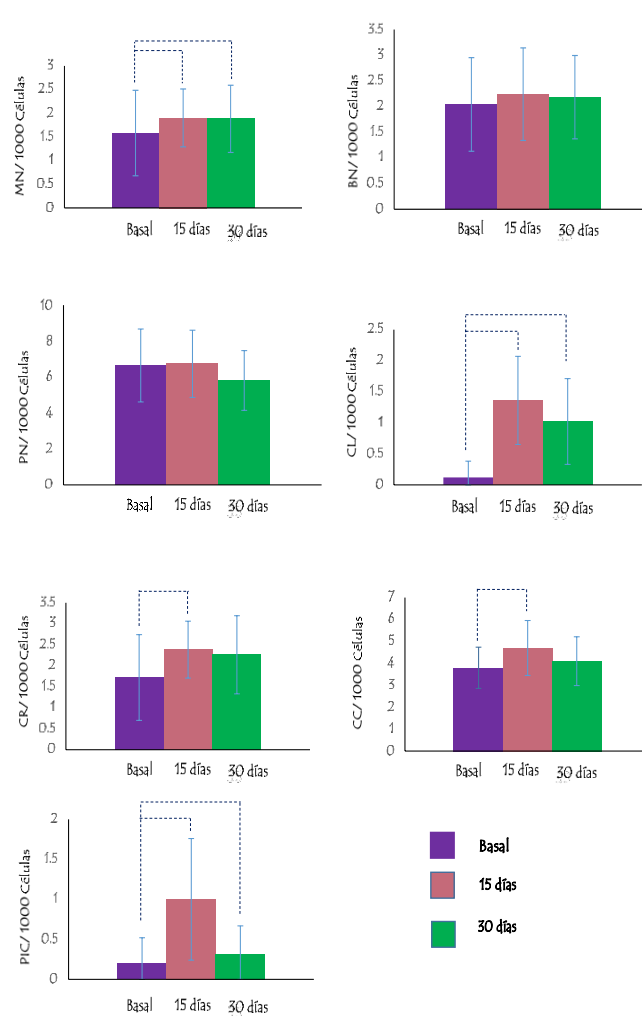
El grupo control estuvo formado por 60 participantes, 18 niños y 42 niñas. En este análisis no se observó diferencia significativa en el número de MN y AN de la muestra a los 30 días, en relación con la muestra basal en células de mucosa bucal (gráfica1). El grupo 2 o con amalgama dental estuvo integrado por 25 participantes, 11 niños y 14 niñas, los cuales presentaban este tipo de restauración a la toma de la muestra basal y que posteriormente se les colocaron otras obturaciones con amalgama dental, tomándose muestras a los 15 y 30 días. Al realizar las comparaciones intragrupo de las muestras obtenidas de células de mucosa bucal se

observó que el número de células con MN incrementan significativamente ($p=0.011$) a los 15 días y 30 días ($p=0.02$) con respecto a la muestra basal.

Los marcadores de citotoxicidad que incrementaron significativamente fueron: PIC ($p=0.001$) a los 15 días y ($p=0.034$) a los 30 días de muestreo, CR a los 15 días ($p=0.002$), CL a los 15 y a los 30 días ($p=0.001$, para ambos) y CC a los 15 días ($p=0.007$), en relación con el valor (gráfica 2). El grupo 3 o sin amalgama dental estuvo integrado por 20 participantes, 11 niños y 9 niñas, los cuales no presentaban amalgamas dentales a la toma de la muestra basal y se tomó muestras a los 15 y 30, Al realizar las comparaciones intragrupo se observó que el número de células con MN incremento significativamente a los 15 días ($p=0.02$) y a los 30 días ($p=0.004$) con respecto a la muestra basal y a los 30 días ($p=0.04$) con respecto a la muestra tomada a los 15 días. También se observó incremento en el número de células con PN a los 15 y 30 días con respecto a la muestra basal ($p=0.001$) al igual que en el número de células BN ($p=0.007$ y $p=.005$ respectivamente). Los marcadores de citotoxicidad que incrementaron significativamente fueron: PIC ($p=0.001$) a los 15 días de muestreo, CR a los 15 y 30 días ($p=0.002$ y $p=0.001$, respectivamente), CL a los 15 y a los 30 días ($p=0.001$, para ambos) y CC a los 15 y 30 días ($p=0.003$ y $p=0.001$, respectivamente) todas con relación al valor basal (gráfica3).



Gráfica 1. Distribución de MN y AN en células de mucosa bucal en grupo control. MN: Micronúcleos; PN: Prolongación Nuclear; BN: Binucleada; CL: Cariolisis; CR: Cariorrexis; CC: Cromatina condensada; PIC: Pcnosis (Fuente directa)



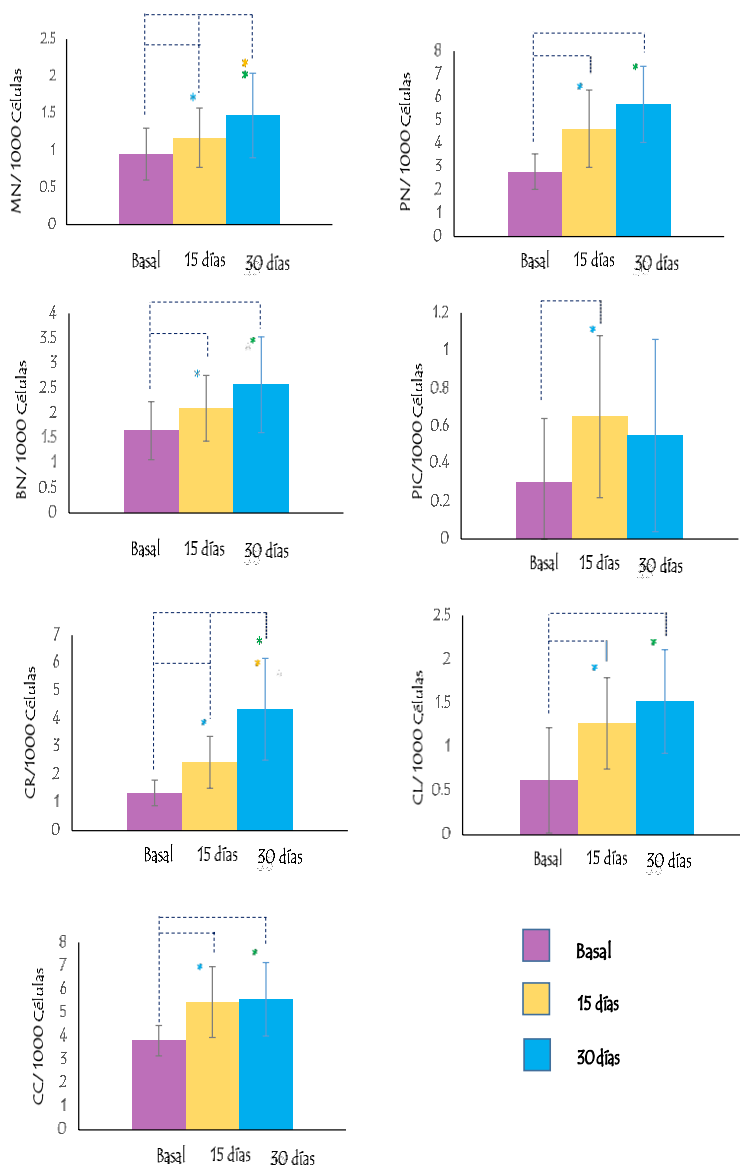
Gráfica 2. Distribución de MN y AN en células de mucosa bucal en el grupo con amalgama. MN: Micronúcleos; PN: Prolongación Nuclear; BN: Binucleada; CL: Cariolisis; CR: Cariorrexis; CC: Cromatina condensada; PIC: Pcnosis. Valores se muestran de la siguiente manera: *P basal-30 días,

Al realizar la comparación de MN y AN de las muestras basales y 30 días del grupo control vs el grupo con amalgama dental. Se observó incremento significativo en el grupo con amalgama dental en los marcadores de genotoxicidad para MN, PN y BN en la comparación de las muestras basales ($p=0.001$, para los tres) y 30 días ($p=0.001$; para los tres). Los marcadores de citotoxicidad, PIC y CL, incrementaron significativamente en el grupo con amalgama dental al compararlo con los valores obtenidos a los 30 días de muestreo ($p=0.001$, para ambos); en CR y CC en las comparaciones de ambos tiempos de muestreo (basal y 30 días) hubo incrementos significativos ($p=0.001$) en el grupo con amalgama dental con respecto a las muestras del grupo control (grafica 4).

En la comparación de MN y AN de las muestras basales y 30 días del grupo control vs el grupo sin amalgama dental, se observó incrementos significativos en el grupo sin amalgama dental en todos los marcadores genotóxicos y citotóxicos con respecto a las muestras del grupo control. Se encontró aumento significativo en el número de MN ($p=0.001$) y BN ($p=0.001$) al comparar los valores basales de ambos grupos.

Al comparar los valores obtenidos de MN y AN a los 30 días de muestreo, se observó incremento significativamente en el número de MN ($p=0.001$), BN ($p=0.001$) y PN ($p=0.001$). Al realizar la comparación intergrupo de los valores muestreo basales, se observó que incrementó significativamente el número de PIC ($p=0.005$), CR ($p=0.001$), CL ($p=0.001$), y CC ($p=0.001$), y al comparar los valores obtenidos a los 30 días de muestreo de ambos grupos, se observó aumento significativo en el número de PIC ($p=0.001$), CR ($p=0.001$), CL ($p=0.001$) y CC ($p=0.001$) (gráfica5).

Por último se realizó la comparación de MN y AN de las muestras basales, 15 días y 30 días del grupo con amalgama dental vs el grupo sin amalgama dental, encontrando incremento significativo en el número de MN ($p=0.01$) y PN ($p=0.001$); y a los 15 días de muestreo se observó incremento significativo en el número de PN ($p=0.001$) en el grupo con amalgama dental. En los marcadores de citotoxicidad se observaron incremento significativo en el grupo sin amalgama dental al comparar los valores basales en el número de CL ($p=0.001$), y a los 30 días de muestreo incrementó significativamente el número de CR ($p=0.001$), CL ($p=0.01$) y CC ($p=0.005$) (gráfica6).

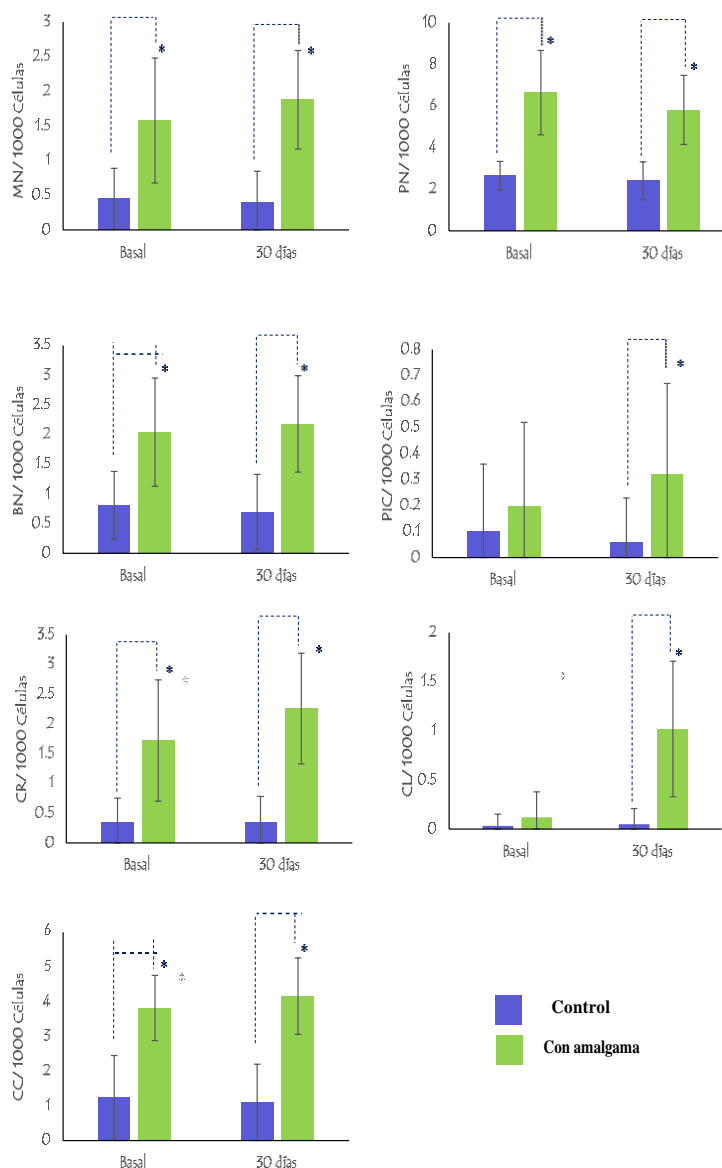


Gráfica 3. Distribución de MN y AN en células de mucosa bucal en grupo sin amalgama. MN: Micronúcleos; PN: Prolongación Nuclear; BN: Binucleada; CL: Cariolisis; CR: Cariorrexis; CC: Cromatina condensada; PIC: Picnosis. *P basal-30 días, *P basal-15días y *P 15 días-30 días (Fuente

DISCUSION

En el presente trabajo se analizó el posible efecto genotóxico y citotóxico que puede causar el mercurio liberado por restauraciones de amalgama dental mediante el ensayo de MN y AN en células de mucosa de mucosa bucal, ya que estudios in vivo han demostrado el efecto clastogénico de este elemento en las personas expuestas en su entorno de trabajo, consumo de alimentos contaminados, o en la exposición accidental (Franchi, 1994; Amorim, 2000).

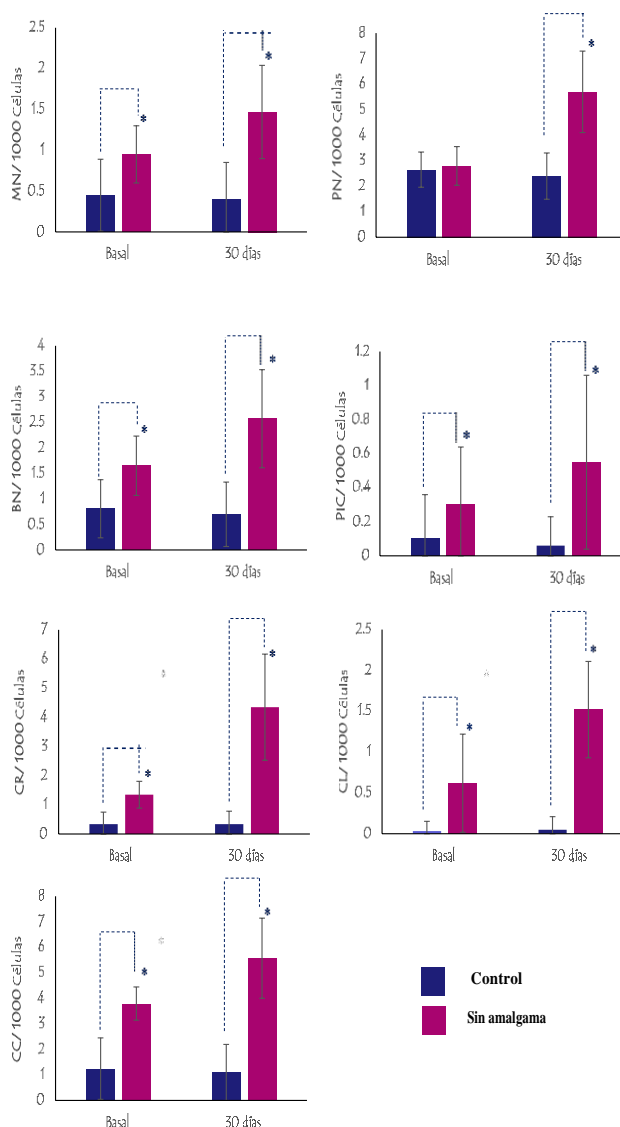
La Agencia Internacional para la Investigación sobre el Cáncer (IARC) incluye al Hg elemental y a los compuestos inorgánicos de Hg en el grupo 3, al no ser relacionados a la carcinogénesis en seres humanos (IARC, 1993); sin embargo existe evidencia sobre la genotoxicidad del Hg en pruebas de aberraciones cromosómicas, ensayos de micronúcleos y mediciones del intercambio de cromatidas hermanas (Akiyama, 2001; Silva Pereira, 2005), confirmando así que el ensayo de MN es uno de los métodos más fiables para poder evaluar daño al ADN, pues permite evaluar la pérdida y rotura cromosómica (Fenech, 2005). La amalgama dental es una mezcla de Hg y polvo de aleación de plata que se ha utilizado para restaurar las superficies dentales cariadas por más de 150 años. Las restauraciones de amalgama pueden descargar Hg elemental inorgánico (Hg⁰) en la cavidad oral, sobre todo a través del vapor,



Gráfica 4. Comparación de MN y AN en células mucosa bucal entre los grupos control y el grupo con amalgama dental. MN: Micronúcleos; PN: Prolongación Nuclear; BN: Binucleada; CL: Cariólisis; CR: Cariorrexis; CC: Cromatina condensada; PIC: Picnosis (Fuente directa).

que luego pueden ser absorbidos por el torrente sanguíneo y llegar a varios tejidos y órganos (Nairi, 2008). Existen diversos estudios que demuestran que los niveles de Hg en orina y sangre son mayores en individuos que poseen restauraciones con amalgama dental (Dieter, 2008), por ello la importancia de investigar los daños citotóxicos y genotóxicos que esta liberación de Hg puede ocasionar a las células de la mucosa bucal. En los resultados de esta investigación se observó relación entre el incremento de MN y AN en células de mucosa bucal con la presencia de restauraciones con amalgama dental, al igual que en el estudio realizado por Vissalli y cols., en el 2012 y otro realizado por Bloching y cols., en el 2008, donde la frecuencia de MN de células de mucosa bucal fue significativamente mayor en los sujetos con restauraciones dentales (resina y amalgama) que en los sujetos libres de restauraciones; sin embargo en este estudio no se le atribuye el daño genotóxico solo a la presencia de la amalgama dental; sino también a las restauraciones resinosas (Bloching, 2008; Visalli, 2011). En este estudio también se compararon los dos grupos expuestos a restauraciones con amalgama dental (grupo 2 y 3) ya que se esperaba que el grupo 2 con amalgama dental a cual se le colocaron

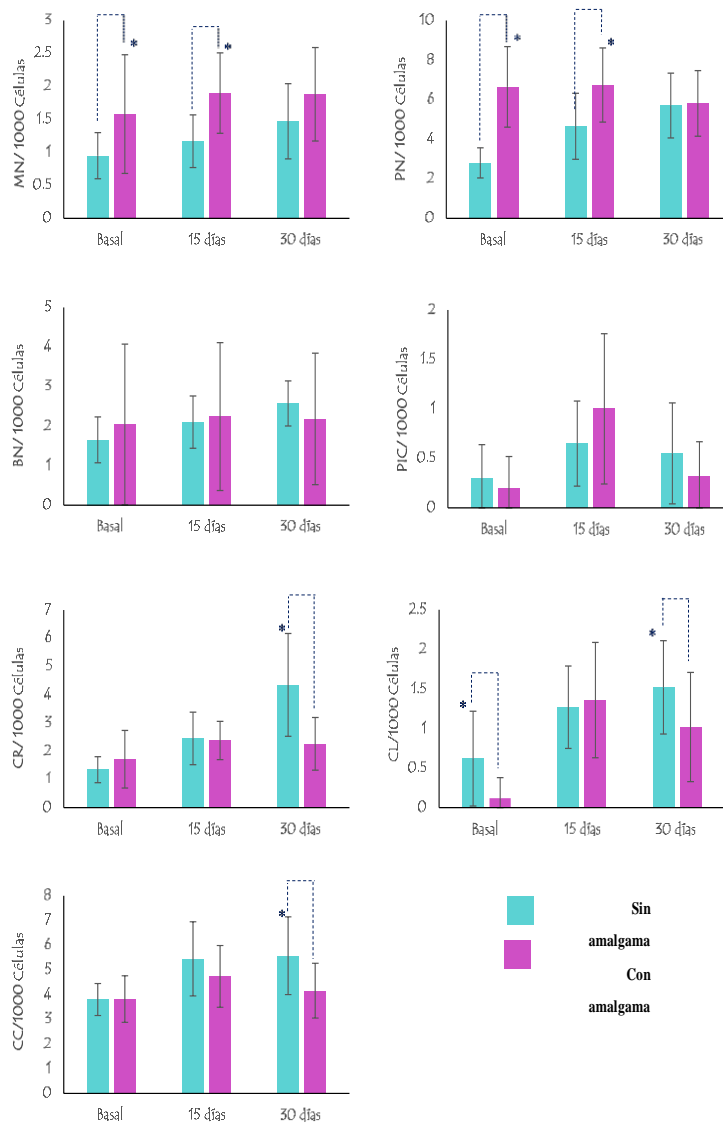
otras restauraciones con este material incrementara los valores de los marcadores genotóxicos y citotóxicos debido a que la concentración de mercurio aumenta proporcionalmente al número de amalgamas encontradas en las superficies dentales. (Nylander, 1987); como lo demostrado por Woods en el 2007 donde el observó que la concentración urinaria promedio de mercurio antes de realizar obturaciones fue de 1.5 µg/L., mientras que la concentración promedio de mercurio en orina en los niños tratados con amalgama aumentó hasta un pico de 3.2 µg/L a los 2 años del tratamiento y hasta los 7 años de seguimiento los niveles de Hg habían descendido hasta los niveles basales; demostrando que el tiempo de exposición de este tipo de obturación está en estrecha relación con los niveles de concentración de mercurio y el daño celular; además de que en este grupo tenía la necesidad de atención dental por la



Gráfica 5. Comparación de MN y AN en células de mucosa bucal entre los grupos control y sin amalgama MN: Micronúcleos; PN: Prolongación Nuclear; BN: Binucleada; CL: Cariolisis; CR: Cariorrexis; CC: Cromatina condensada; PIC: Pícnosis (Fuente directa).

presencia de lesiones cariosas, factor que incrementa el número de MN y AN (Bloching, 2008).

Por lo tanto se concluye que las restauraciones de amalgama dental contribuyen al daño genotóxico y citotóxico celular por lo que la prescripción de este tipo de obturaciones y su uso deben estar indicados responsablemente usando aislamiento absoluto y observando características específicas de cada paciente para personalizar el tratamiento.



Gráfica 6. Comparación de MN y AN en células de mucosa bucal entre los grupos con amalgama dental y sin amalgama dental. MN: Micronúcleos; PN: Prolongación Nuclear; BN: Binucleada; CL: Cariolisis; CR: Cariorrexis; CC: Cromatina condensada; PIC: Picnosis (Fuente directa).

BIBLIOGRAFIA

Aberg, B (1969). Metabolism of methyl mercury (^{203}Hg) compounds in man: Excretion and distribution. *Archives of Environmental Health: An International Journal*, 19(4), 478-484.

Akiyama, M. (2001). Genotoxicity of mercury used in chromosome aberration tests. *Toxicology in vitro*, 15(4), 463-467.

Amorim MIM (2000). Cytogenetic damage related to low levels of methyl mercury contamination in the Brazilian Amazon. *Anais da Academia Brasileira de Ciências*, 72: 497-507.

Anwar WA & Gabal MS (1991). Cytogenetic study in workers occupationally exposed to mercury fulminate. *Mutagenesis*, 6: 189-192.

Baird C. (1997) Toxic heavy metals. In Baird C, ed. *Environmental chemistry*. New York: WH Freeman. p. 386-95

Björkman, (1992). Factors influencing mercury evaporation rate from dental amalgam fillings. *European Journal of Oral Sciences*, 100(6), 354-360.

Bloching (2008). Micronucleus rate of buccal mucosal epithelial cells in relation to oral hygiene and dental factors. *Oral oncology*, 44(3), 220-226

Clarkson (1988). The prediction of intake of mercury vapor from amalgams. In *Biological monitoring of toxic metals* (pp. 247-264). Springer US.

Corazza (1990). Howell-Jolly body counting as a measure of splenic function. A reassessment. *Clinical & Laboratory Haematology*, 12(3), 269-275.

Crespo-López (2005). Mercurio y neurotoxicidad. *Rev Neurol*, 40(7), 441-447.

Curry, A. S. (1972). *Advances in forensic and clinical toxicology*.

De Flora S (1994). Genotoxicity of mercury compounds. A review. *Mutation Research*, 317: 57-79.

Dieter Melchart, (2008). Biomonitoring of mercury in patients with complaints attributed to dental amalgam, healthy amalgam bearers, and amalgam-free subjects: a diagnostic study. *Clinical Toxicology*, 46(2), 133-140.

Ehrenstein, (2002). Methyl mercury uptake and associations with the induction of chromosomal aberrations in Chinese hamster ovary (CHO) cells. *Chemico-biological interactions*, 141(3), 259-274.

Etzel, R. A. (2003). How environmental exposures influence the development and exacerbation of asthma. *Pediatrics*, 112(Supplement 1), 233-239.

Fenech, M., & Bonassi, S. (2011). The effect of age, gender, diet and lifestyle on DNA damage measured using micronucleus frequency in human peripheral blood lymphocytes. *Mutagenesis*, 26(1), 43-49.

Gómez CA, (2010). Estudio del desempeño preclínico y clínico de una amalgama dental comercial. *Rev Fac Odontol Univ Antioq.* 22(1): 63-71.

Ham A. Tratado de histología. Interamerica 7 ma ed. México 1976; p. 52.

International Agency for Research on Cancer (IARC), Beryllium, Cadmium, Mercury and Exposures in the Glass Manufacturing Industry, vol. 58, International Agency for Research on Cancer (IARC), 1993.

Livingston, (1990). Induction of nuclear aberrations by smokeless tobacco in epithelial cells of human oral mucosa. *Environmental and molecular mutagenesis*, 15(3), 136-144.

Morales Fuentes, (2003). Mercurio y salud en la odontología. *Rev. Saúde Pública*, 37(2), 266-272.

Nairi Maserejian, Trachtenberg, F. L., Assmann, S. F., & Barregard, L. (2008). Research| Children's Health.

Nylander, M., Friberg, L., & Lind, B. (1986). Mercury concentrations in the human brain and kidneys in relation to exposure from dental amalgam fillings. *Swedish dental journal*, 11(5), 179-187.

Schmid, W. (1975). The micronucleus test. *Mutation Research/Environmental Mutagenesis and Related Subjects*, 31(1), 9-15.

Schurz (2000). Mutagenicity of mercury chloride and mechanisms of cellular defence: the role of metal-binding proteins. *Mutagenesis*, 15: 525-530.

Silva-Pereira, (2005). Cytotoxicity and genotoxicity of low doses of mercury chloride and methylmercury chloride on human lymphocytes in vitro. *Brazilian journal of medical and biological research*, 38(6), 901-907

Thomas, P (2009). Buccal micronucleus cytome assay. *Nature protocols*, 4(6), 825

Tolbert, P. E., Shy, C. M., & Allen, J. W. (1992). Micronuclei and other nuclear anomalies in buccal smears: methods development. *Mutation Research/Environmental Mutagenesis and Related Subjects*, 271(1), 69-77.

Torres Bugarín (1998). Determination of diesel genotoxicity in firebreathers by micronuclei and nuclear abnormalities in buccal mucosa. *Mutat Res*; 413: 277-281.

Torres Bugarín (2004). Evaluation of cisplatin + 5-FU, carboplatin + 5-FU, and ifosfamide + epirubicine regimens using the micronuclei test and nuclear abnormalities in the buccal mucosa. *Mutat Res*; 565: 91-101.

Velázquez Reyes, V. (1999). Utilización de la amalgama en la odontopediatria actual. *Odontología Sanmarquina*, 1(3), 53-58.

Visalli, (2013). Genotoxic damage in the oral mucosa cells of subjects carrying restorative dental fillings. *Archives of toxicology*, 87(1), 179-187.

Woods, J. S (2007). The contribution of dental amalgam to urinary mercury excretion in children. *Environmental health perspectives*, 1527-1531.

Zamora Pérez (2004). Induction of micronucleated cells in the shed skin of salamanders (*Ambystoma* sp.) treated with colchicine or cyclophosphamide. *Environ Mol Mutagen*; 44: 436-440

Zúñiga G, (1996). Spontaneous micronuclei in peripheral blood erythrocytes from 35 mammalian species. *Mutat Res*; 369: 123-127.

Zúñiga González (1998). Induction of micronuclei in the domestic cat (*Felis domesticus*) peripheral blood by colchicine and cytosine-arabioside. *Mutat Res*; 43:187-189.

Zúñiga-González (2003). Induction of micronucleated erythrocytes in mouse peripheral blood after cutaneous application of 5-Fluorouracil. *Arch Med Res*; 34:141-14.

**“NIVELES DE POLIAMINAS EN PLASMA DE RATONES CON L5178Y
TRATADOS CON 5´-DESMETOXI-DESOXIPODOFILOTOXINA,
DESOXIPODOFILOTOXINA Y ACETIL PODOFILOTOXINA AISLADAS
DE *Bursera fagaroides*”**

FABIOLA RODRÍGUEZ ARÉVALO ⁽¹⁾, ANA MARÍA PUEBLA PÉREZ ⁽²⁾ &
JORGE IVÁN DELGADO SAUCEDO ⁽³⁾

⁽¹⁾ Departamento de Farmacología, Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingenierías, Universidad de Guadalajara, Guadalajara, México,

qfb.fabiolara@gmail.com

⁽²⁾ Departamento de Farmacobiología y Departamento de Ingeniería Química, Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingenierías, Universidad de Guadalajara, Guadalajara, México,

ampueblap@yahoo.com.mx

⁽³⁾ Departamento de Farmacobiología y Departamento de Ingeniería Química, Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingenierías, Universidad de Guadalajara, Guadalajara, México,

ivanovith@yahoo.com

RESUMEN:

El interés por las plantas medicinales a través de métodos científicos ha aumentado y la identificación de los componentes responsables del efecto terapéutico sustenta la etnomedicina de manera que abogan por su extenso uso para el tratamiento de enfermedades. Una de las plantas que ha llamado la atención en la búsqueda de nuevos antitumorales es *Bursera fagaroides* que posee actividad antitumoral y se han logrado aislar y caracterizar las moléculas 5´-desmetoxi-desoxipodofilotoxina (5-dM-dOPF), desoxipodofilotoxina (dO-PF) y acetil podofilotoxina (Act-PF), y podrían ser usadas como tratamiento antitumoral, en el cual resultaría de utilidad monitorear la respuesta al tratamiento con un biomarcador: las poliaminas (PAs) moléculas policatiónicas y ubicuas, las principales son putrescina (Pu), espermidina (Spd) y espermina (Spm) en tejidos con alta proliferación se encuentran en concentraciones elevadas y cuando se inhiben se detiene el ciclo celular, por lo que pueden ser una diana farmacológica en el desarrollo de nuevos compuestos quimioterapéuticos.

El objetivo de este trabajo fue evaluar los niveles de PAs en plasma de ratones BALB/c con L5178Y tratados con 5-dM-dOPF, dO-PF y Act-PF aisladas de *Bursera fagaroides*. Se tomaron muestras de plasma de ratones sanos, con L5178Y y ratones con L5178Y tratados con 5-dM-dOPF, dO-PF, Act-PF y podofilotoxina estándar (PFstd) y se analizó por HPLC columna C18, elusión en gradiente, fase móvil: buffer de fosfatos/ acetoniitrilo (80:20) y (5:95), flujo 1 mL/min, derivatización con OPA a una longitud de onda de excitación de 360 y 530 nm de emisión. Los resultados fueron analizados por ANOVA (SPSS ver.10). Los tratamientos con dO-PF resultaron con mayor efecto, al disminuir en un

62.52 , 55.31 y 6.88 % los niveles de Pu, Spd y Spm respectivamente, además cabe resaltar que la Pu y la Spm funcionaron como mejor biomarcador en respuesta a un tratamiento.

Palabras clave: Poliaminas (PAs); Putrescina (Pu); Espermidina (Spd); Espermina (Spm); *Bursera fagaroides*; linfoma murino L5178Y.

ABSTRACT:

The interest for the medicinal plants through the scientific methods it is been increased and the identification of the responsible components of the therapeutic effect sustain the etnomedicine so that advocates for their extensive use for the treatment of diseases. One of the plants that has attracted attention in the investigation of new antitumor is *Bursera fagaroides* that has antitumor activity and which it has been isolated and characterized the molecules 5'-demethoxy-deoxypodophyllotoxin (5-dM-dOPF), deoxypodophyllotoxin (dO-PF) and acetyl podophyllotoxin (Act-PF) that could be used as antitumor treatment in which it is useful monitor their response by a biomarkers: the polyamines (PAs) polycationics and ubiquitous molecules, the main are putrescine (Pu), spermidine (Spd) and spermine (Spm), on tissues with high proliferation they are found in high concentrations and when they inhibit, cellular cycle stops, so they can be a drug target in the development of new chemotherapeutic compounds.

The aim of this work was evaluate the levels of PAs in plasma of mice BALB/c with lymphoma L5178Y treated with 5-dM-dOPF, dO-PF y Act-PF isolated from *Bursera fagaroides*. They were taken samples of plasma of healthy mice, with L5178Y and mice with L5178Y treated with 5-dM-dOPF, dO-PF, Act-PF and podophyllotoxin standard (PFstd) and they analyzed by HPLC column C18, elution in gradient, mobile phase: buffer of phosphates/acetonitrile (80:20) and (5:95), flow rate 1 mL/min, derivatization with OPA to a wavelength of excitation of 360 and 530 nm of emission. The results were analyzed by ANOVA (SPSS ver. 10). The treatments with dO-PF showed higher effect, decreasing in 62.52, 55.31 and 6.88 % the levels of Pu, Spd and Spm respectively, also worth nothing that Pu and Spm worked as better biomarkers in response to a treatment.

Key words; Polyamines; Putrescine (Pu); Spermidine (Spd); Spermine (Spm); *Bursera fagaroides*; Murine Lymphoma L5178Y.

1. ANTECEDENTES

El cáncer es una enfermedad caracterizada por la producción excesiva, descontrolada y no programada de células malignas que originan un tumor y que en algunos casos invaden tejidos circundantes generando metástasis, la cual consiste en la propagación a distancia de las células cancerígenas produciendo el crecimiento de nuevos tumores (Balkwill & Mantovani 2012).

Los diferentes tipos de cáncer pueden comportarse de manera distinta, crecen a diferente velocidad y la respuesta al tratamiento es diferente lo cual requiere de una terapia dirigida al tipo específico de cáncer y prácticamente personalizado es por eso que se requiere de nuevas moléculas con actividad biológica (Oronsky *et al.* 2015).

El interés por estudiar las plantas con propiedades medicinales a través de métodos científicos va en aumento y la identificación de los componentes responsables del efecto terapéutico sustentan la sabiduría popular de la curación de manera que abogan por su amplio uso para el tratamiento de diversas enfermedades (Noguera *et al.* 2004).

Los tratamientos convencionales para el cáncer que se emplean hoy en día además de tener una actividad limitada, son costosos y causan amplios efectos secundarios. Estos efectos además de disminuir considerablemente la calidad de vida de los pacientes, desalientan en la continuidad de los protocolos de medicación contribuyendo a la progresión del cáncer. Tales acontecimientos han generado un interés en incrementar el estudio de estrategias alternativas como el uso de los mismos productos naturales (Reynoso-Orozco *et al.* 2008; Alonso-Castro *et al.* 2011).

Una de las plantas que ha llamado la atención en la búsqueda de nuevos oncológicos pertenece al género *Bursera* que se encuentra ampliamente distribuido en la ecología de los bosques secos de México, contando con alrededor de 75 especies endémicas en todo el país. La planta *Bursera fagaroides* se ubica en México con el nombre común de: “copal”, “aceitillo” o “cuajote amarillo”, por sus amplios usos en medicina tradicional en las regiones centrales de México y se distingue que su perfil fitoquímico abarca una amplia variedad de grupos de moléculas con diferentes actividades. La planta *B. fagaroides* tiene actividad antitumoral y se ha logrado aislar y caracterizar las moléculas 5'-desmetoxi-desoxipodofilotoxina, desoxipodofilotoxina y acetil podofilotoxina, en un futuro podrían ser usadas como tratamiento contra el cáncer en el cual resultaría de mucha utilidad monitorear la respuesta al tratamiento con un biomarcador como las poliaminas (Noge & Becerra 2009; Velázquez-Jiménez *et al.* 2011; Rojas-Sepúlveda *et al.* 2012).

Las Poliaminas (PAs) forman parte de los compuestos nitrogenados que se encuentran ampliamente distribuidas en los sistemas biológicos y son esenciales para la viabilidad de las células (Acosta *et al.* 2012; Ruiz-Cano *et al.* 2012) así como para la realización de diversas funciones en condiciones fisiológicas a nivel celular, tanto para las células sanas como para las cancerígenas, al interactuar con varias macromoléculas, (Reynoso-Orozco *et al.* 2008; Reynoso-Orozco *et al.* 2012).

Las PAs son consideradas esenciales para la diferenciación, crecimiento y multiplicación celular por su capacidad para estabilizar a los ácidos nucleicos y su interacción en diferentes niveles del ciclo celular al participar en la regulación y síntesis del ácido desoxirribonucleico (DNA), el ácido ribonucleico (RNA) y la síntesis de proteínas; en procesos como la apoptosis, la expresión génica, diversos eventos metabólicos, y sobre todo en muchas enfermedades entre las cuales se incluyen el cáncer, padecimientos parasitarios, entre otras (Reynoso-Orozco *et al.* 2005; Gómez *et al.* 2008; Reynoso-Orozco *et al.* 2008; Ruiz-Cano *et al.* 2012; Reynoso-Orozco *et al.* 2012).

La concentración de las PAs en el organismo es bien favorecido en aquellos tejidos y órganos que se encuentran en crecimiento y división celular activos, lo cual las propone como indicadores de la presencia de procesos proliferativos, así como su biosíntesis está directamente relacionada con el desarrollo tumoral, estando relacionados los niveles de algunas enzimas participantes en su biosíntesis con el grado de malignidad del tumor. Debido a esto se realizan investigaciones para utilizar los niveles de PAs como biomarcadores en tejidos con crecimiento anormal con el propósito de pronosticar y brindar un seguimiento del cáncer y utilizar compuestos que disminuyan los niveles celulares de PAs (Reynoso-Orozco *et al.* 2005; Reynoso-Orozco *et al.* 2012).

En el metabolismo de las PAs, la enzima ornitina descarboxilasa (ODC), es la primera enzima de la síntesis de estos poliaminas y es limitante para su biosíntesis, su actividad también permite dar seguimiento en la evolución de los distintos tipos de cáncer; de igual forma, se ha demostrado que al inhibir la síntesis de esta enzima se obtienen efectos antitumorales. Los niveles de PAs en fluidos y tejidos, así como la actividad de la ODC son excelentes bioindicadores del desarrollo tumoral, implicando a las PAs esencialmente en los procesos de carcinogénesis y crecimiento tumoral posiblemente por ser precursores de nitrosaminas (Gómez-Gallego *et al.* 2008).

Las PAs están implicadas en la diferenciación de las células del sistema inmune y en la regulación de la respuesta inflamatoria. De igual modo los niveles de PAs pueden resultar excelentes marcadores en los casos de cánceres recurrentes dado que se observan incrementos

en los niveles de poliaminas de 1 a 6 meses antes de que aparezcan los primeros signos clínicos y radiológicos (Ekegren & Gomes-Trolin 2005; Gómez- Gallego *et al.* 2008).

2. JUSTIFICACIÓN

Los biomarcadores fungen un papel importante para el monitoreo del funcionamiento de un tratamiento en diversas enfermedades, pudiendo arrojar datos que proporcionen información importante a cerca de la evolución de una enfermedad en particular y posibles alternativas de mejora en el tratamiento.

El extracto hidroalcohólico de *Bursera fagaroides* ha demostrado tener un uso potencial en el campo de los tratamientos alternativos para mitigar el cáncer, mostrando resultados con efecto antitumoral, sin embargo, la evaluación de los principios activos aislados y caracterizados de *Bursera fagaroides* requieren un amplio estudio. Se desconoce si existe un efecto significativo en la reducción de los niveles plasmáticos de poliaminas en ratones BALB/c portadores de linfoma L5178Y para usarlos como biomarcador en respuesta a un tratamiento. En virtud de lo antes mencionado, se plantea la necesaria evaluación de la actividad biológica de 5'-desmetoxi-desoxipodofilotoxina (5-dM-PF), desoxipodofilotoxina (dM-PF) y acetil podofilotoxina (Act-PF) sobre los niveles de poliaminas para así proponer nuevas moléculas obtenidas de productos naturales y con un posible biomarcador para monitorear la respuesta de un fitofármaco con actividad anticancerígena.

3. HIPÓTESIS

Los niveles de PAs son biomarcadores en el modelo murino L5178Y al ser tratados con 5'-desmetoxi-desoxipodofilotoxina, desoxipodofilotoxina y acetil podofilotoxina aisladas de *Bursera fagaroides*.

4. OBJETIVOS

4.1 Objetivo general.

Evaluar los niveles de PAs en plasma de ratones BALB/c con linfoma L5178Y tratados con las moléculas 5'-desmetoxi-desoxipodofilotoxina (5-dM-dOPF), desoxipodofilotoxina (dO-PF) y acetil podofilotoxina (Act-PF) aisladas de *Bursera fagaroides*.

4.2 Objetivos específicos.

1. Cuantificar los niveles de poliaminas en respuesta al tratamiento con 5'-desmetoxi-desoxipodofilotoxina, desoxipodofilotoxina y acetil podofilotoxina de *Bursera fagaroides* en ratones con L5178Y.
2. Evaluar si existe una asociación entre los niveles de PAs y la remisión tumoral en ratones BALB/c con L5178Y cuando son tratados con las moléculas 5'-desmetoxi-desoxipodofilotoxina, desoxipodofilotoxina y acetil podofilotoxina.

5. METODOLOGÍA

5.1 Diseño experimental

Sede: Laboratorio de Inmunofarmacología

Las moléculas serán proporcionadas por la Dra. Álvarez Berber de la Universidad del Estado de Morelos UAEM.

Tipo de estudio: Experimental y comparativo entre grupos independientes.

Universo de estudio: ratones de la cepa BALB/c portadores o no de linfoma L5178Y tratados con 5'-desmetoxi-desoxipodofilotoxina, desoxipodofilotoxina y acetil podofilotoxina aisladas de *Bursera fagaroides*.

5.2 Variables independientes: 5'-desmetoxi-desoxipodofilotoxina, desoxipodofilotoxina y acetil podofilotoxina de *Bursera fagaroides*.

5.3 Variables dependientes: Niveles de poliaminas en plasma de ratones con o sin linfoma.

Modelo murino: Linfoma L5178Y, ratones de la cepa BALB/c, Bioterio-CIBO

5.4 Grupos de estudio

Grupos experimentales: sanos y tumor n= 5 por grupo

Grupo 1: ratones sanos sin tratamiento (control).

Grupo 2: ratones con linfoma L5178Y (2×10^4) vía i.p.

Grupo 3: ratones con linfoma + 5'-desmetoxi-desoxipodofilotoxina

Grupo 4: ratones con linfoma + desoxipodolifotoxina

Grupo 5: ratones con linfoma + acetil podofilotoxina

Grupo 6: ratones con linfoma + podofilotoxina (control estándar)

Tumor: Día 0 inoculación de 20,000 células L5178Y vía intraperitoneal (i.p.).

5.5 Aspectos éticos

Los animales serán manipulados de acuerdo a la guía y cuidado de los animales experimentales y a la Norma Oficial Mexicana NOM-062-ZOO-1999 publicada por la secretaria de agricultura, ganadería desarrollo rural, pesca y alimentación en el diario oficial del gobierno Mexicano.

5.6 Preparación de la muestra:

Las células del linfoma L5178Y (2×10^4) serán inoculadas por vía i.p. y se dejarán establecer 24 h, posteriormente se continuará el tratamiento con las moléculas aisladas de *Bursera fagaroides* a una dosis de 5 mg/kg por vía i.p. dosis cada 24 h durante 15 días.

Se inyectará vía intramuscular (i.m) a cada ratón con 10 UI de heparina, se anestesiará a cada grupo de ratones para realizar la toma de muestra. Cada muestra de sangre se centrifugará a 10,000 rpm durante 10 minutos para obtener el plasma el cual se tratará con ácido perclórico (HClO_4) al 5% en proporción 1:1 para precipitar las proteínas plasmáticas.

Se centrifugará cada una de las muestras tratadas con HClO_4 a 10,000 rpm durante 10 minutos para obtener un sobrenadante, el cual se filtrará con filtros (Millipore $0.45 \mu\text{m}$) estériles.

Se prepararán curvas de concentración de estándares para Pu (10.0, 20.0, 40.0, 80.0, 160.0 µg/mL), Spm (100.0, 200.0, 400.0, 800.0, 1600.0 µg/mL) y Spd (100.0, 200.0, 400.0, 800.0, 1600.0 µg/mL).

5.7 Cuantificación de poliaminas por HPLC

Los niveles de poliaminas en plasma se determinarán mediante un equipo de cromatografía líquida de alta resolución (HPLC Agilent 1100 series), equipado con una columna C18 bajo las siguientes condiciones:

- Fase móvil: A) Buffer fosfatos/Acetonitrilo (80:20); B) Buffer fosfatos/Acetonitrilo (5:95).
- Flujo: 1mL/min.
- Derivatización con OPA.
- Elusión: gradiente (tiempo 12min).
- Longitud de onda: excitación 360nm; emisión 530nm.

5.8 Análisis estadístico

Los datos de los niveles de poliaminas se expresaran como concentración del analito en µg/mL y se analizaran por ANOVA utilizando un programa SPSS v.10. Los resultados de los niveles de poliaminas se calcularan a partir de curvas de concentración de estándares.

Referencias Bibliográficas:

Acosta A., Peña E.J., Paez M.I., Benitez B. (2012) Correlación de la concentración de poliaminas con el desarrollo “ in vitro ” de *Annona muricata* L . Biotecnología en el Sector Agropecuario y Agroindustrial, 10(2), pp.71–78.

Alonso-Castro, A.J., Villareal M.L., Salazar-Olivo L.A., Gomez-Sanches M., Dominguez F., Garcia-Carranca A. (2011) Mexican medicinal plants used for cancer treatment: pharmacological, phytochemical and ethnobotanical studies. Journal of ethnopharmacology [Internet]. [Consultado el 21 Ene 2014]; 133(3), pp.945–972. Disponible en: <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/21146599>.

Balkwill F.R., & Mantovani A. (2012). Cancer-related inflammation: Common themes and therapeutic opportunities. *Seminars in Cancer Biology* [Internet]. [Consultado el 17 Feb 2015]; 33(30), pp.34-38. Disponible en: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1044579X11001064#>

Ekegren, T. & Gomes-Trolin, C., (2005). Determination of polyamines in human tissues by precolumn derivatization with 9-fluorenylmethyl chloroformate and high-performance liquid chromatography. *Journal of Analytical biochemistry* [Internet]. [Consultado 30 Sep 2014]; 338(2), pp.179–85. Disponible en: <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/15745737>

Gómez-Gallego C., Ros-Berruezo G., Bernal-Cava M.J., Pérez-Conesa D. Peregrino-Castro M.J. (2008). Papel de las poliaminas en la alimentación . Importancia de las poliaminas en la alimentación infantil. *Archivos latinoamericanos de nutrición*, 58(3), pp.117–125.

Noge K. & Becerra J. (2009) Germacrene D, A Common Sesquiterpene in the Genus *Bursera* (Burseraceae). *Molecules*, 14(2), pp.5289–5297.

Noguera B., Díaz E., García M.V., San Feliciano A., López-Perez J.L., Israel A. (2004). Antiinflammatory activity of leaf extract and fractions of *Bursera simaruba* (L.) Sarg (Burseraceae). *Journal of ethnopharmacology*, [Internet]. [Consultado 10 de Feb 2015]; 92(1), pp.129–33. Disponible en: <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/15099859>.

Oronsky B., Carter C.A., Mackie V., Scicinski J., Oronsky A., Oronsky N., et al., (2015). *Frontiers in Oncology*, [Internet]. [Consultado 17 de Feb 2015]; 4(387), pp.1-5. Disponible en: <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC4306310/pdf/fonc-04-00387.pdf>

Reynoso-Orozco R., Márquez-Reynoso M.I., Noa-Lima E., Noa-Pérez M. (2012). Particularidades del metabolismo de las poliaminas y su posible aplicación en medicina veterinaria. *Salud animal*, 34(3), pp.144–150.

Reynoso-Orozco R., Delgado-Saucedo J.I., Puebla-Pérez A.M., Calvo-Méndez C., Carr D., Velázquez-Magaña S. et al., (2008). Difluorometil ornitina y el extracto acuoso de *Bursera fagaroides* en el modelo de linfoma murino L5178Y en ratones BALB / c : comparación de su efecto en el metabolismo de las poliaminas. *Salud animal*, 30(2), pp.128–132.

Reynoso-Orozco R. , Delgado-Saucedo J.I, Puebla-Pérez A.M., Calvo-Méndez C., Nieto-Arteaga P., Santerre A. (2005). Biología celular de las poliaminas: monografía de los conocimientos básicos. *scientia-CUCBA*, 7(2), pp.161–170.

Rojas-Sepúlveda, A.M., Mendieta-Serrano M., Antúnez Mojica M.Y., Salas-Vidal E., Marquina S., Villarreal M.L., et al. (2012). Cytotoxic podophyllotoxin type-lignans from the steam bark of *Bursera fagaroides* var. *fagaroides*. *Molecules* (Basel, Switzerland) [Internet].[Consultado 9 Feb 2015]; 17(8), pp.9506–19. Disponible en: <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/22878225> .

Ruiz-Cano D., Pérez-Llamas F., Zamora S. (2012). Implicaciones de las poliaminas en la salud infantil. *Revista Argentina de Pedriatria*, 110(3), pp.244–250.

Velázquez-Jiménez, Torres-Valencia M.J., Cerda-García-Rojas M., Hernández-Hernández D., Román-Marín L.U., Manríquez-Torres J.J. et al. (2011). Absolute configuration of podophyllotoxin related lignans from *Bursera fagaroides* using vibrational circular dichroism. *Phytochemistry*, [Internet].[Consultado 10 feb 2015]; 72(17), pp.2237–43. Disponible en: <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/21840559>.

SOCIO-PSYCHOLOGICAL ASPECT OF DECEIT

YELYZAVETA BORODYNIA

Kremenchuk School #10, advanced in English, Kremenchuk, Ukraine, lborodynia@gmail.com

SUMMARY: While the history of deception begins with the early sprouts of the creation of society, the concept remains topical today. Psychologists, sociologists, philosophers, law enforcements and PR people are all studying and developing theories to explain it.

Scientists are particularly interested in how today's teenagers behave and what their attitude is towards various forms of deceit. Growing up, the teenagers will sculpture the moral, ethical and psychological profile of the Ukrainian society in the near future.

During September-December 2015 we were studying if there is strong correlation between the ability to guess the emotions by the person's facial expression and the ability to uncover deceit. To achieve this aim it is necessary to create hypothesis and to solve several goals:

1. to study respondents' attitude towards lies;
2. to explore whether respondents use any of the defined types of lies in their lives;
3. to check their ability to recognize other people's emotions by demonstrating them a set of photos;
4. to check their ability to distinguish liar from the truth-teller;
5. to define whether a bias view has any influence on respondents' decisions.

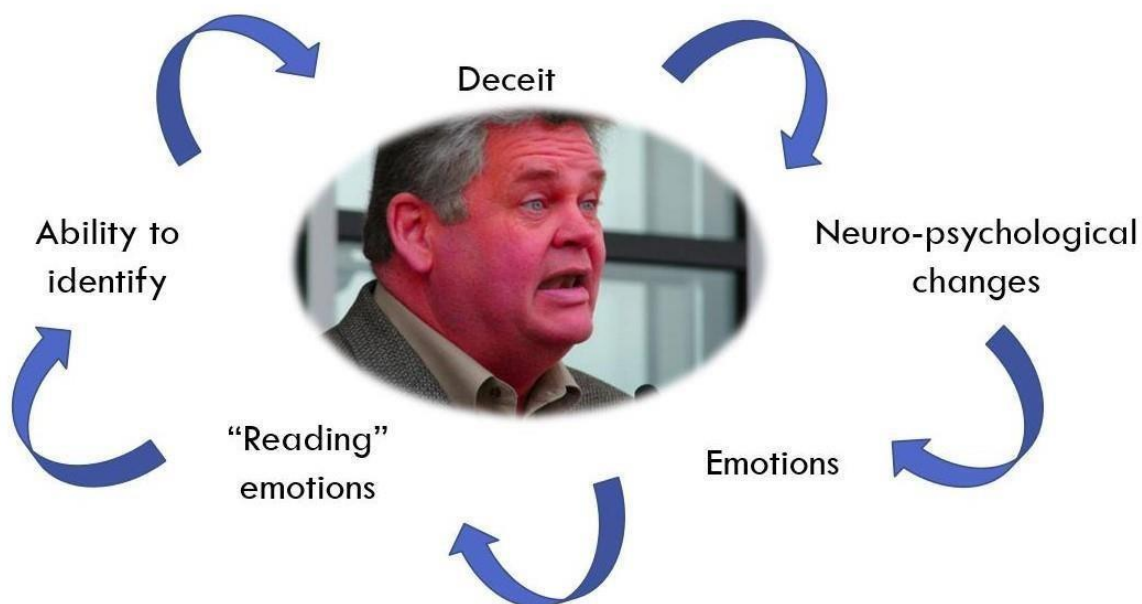


Figure 1. Example of hypothesis

KEYWORDS: Deceit, emotion, analysis

1. INTRODUCTION

Do you know that an average person lies 3 times for every 10 minutes in a conversation and that polygraph determines the emotional condition of a person rather than if he lies? Liar can be detected only by his particular behavior. You just need to be able to spot this unusual behavior.

Eric Berne in his book "Sex in human loving" wrote: "The majority of people's relationships is based on tricks and lies – sometimes cheerful and amusing, sometimes low and vicious." Life is deceptive. Everybody lies: people, countries, philosophy, art, religion, moral – our culture is impregnated with lies. The history of deceit begins on early stages of development of the society. Evidences of the presence of deception in an ancient world are found on the pages of Egyptian papyruses. Ancient philosophers were particularly interested in the psychology of deception, created recommendation to prevent spreading of lies.

Paul Ekman, a lie expert, said: "In my definition of a lie or deceit, then, one person intends to mislead another, doing so deliberately, without prior notification of this purpose, and without having been explicitly asked to do so by the target."

The concept of deceit becomes even more popular topical today. Psychologists, sociologists, philosophers, law enforcements and PR people are investigating phenomenon of deception to explain it.

1.1. The aim and goal of the investigation

The object of our research is deceit as psychological phenomenon. Subject - the notion of deceit, depending on the age of the target group.

The phenomenon of deceit involves people's emotions, which are extremely difficult to hide. During September-December 2015 we were studying if there is strong correlation between the ability to guess the emotions by the person's facial expression and the ability to uncover deceit. In order to do so we used the works of Paul Ekman, who is one the most recognized psychologist for now.

2. PROCEDURE

Our main goal was to study the deceit. We approached people and asked them about their attitude towards lies, whether they use any of the defined types of lies in their lives. We also checked their ability to recognize other people's emotions by demonstrating them a set of photos and their ability to distinguish liar from the truth.

We polled 73 people: 17 adults (age 45-55), 27 teenagers (15-17) and 29 kids (8-10).

Processing of statistical data, mathematical calculations were carried out in the software package Microsoft Excel.

We received the following results:

2.1. The primary way to lie as

- Falsifying was marked by 73% of respondents
- Concealing was marked by 27% of respondents

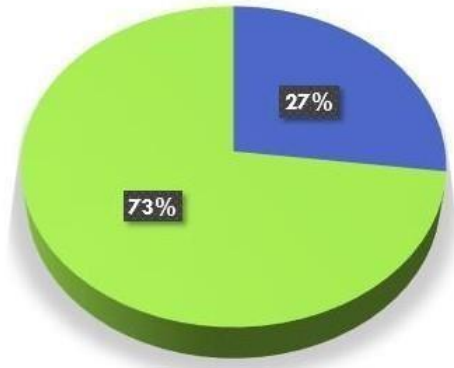


Figure 1. Ratio of falsifying (green) to concealing (blue)

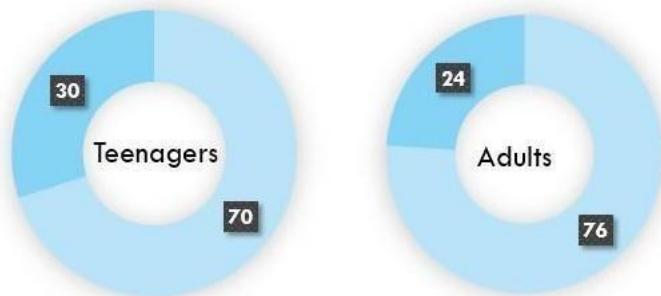


Figure 2. Ratio of falsifying to concealing of teenagers and adults

2.2. The aim of the second part of the poll was to determine motivation for deceit

- Deception-politeness was marked by 40% of respondents (94% of teachers, 7% of seniors)
- Deception for achieving goals was marked by 34% of respondents (6% of teachers, 52% of seniors)
- Deception for fairness was marked by 32% of respondents (0% of teachers, 37% of seniors)

Table 1. Motivation for deceit

	Deception- politeness	Deception for achieving goal	Deception- fairness
In general	40%	34%	32%
Adults	94%	6%	0%
Teenagers	7%	52%	37%

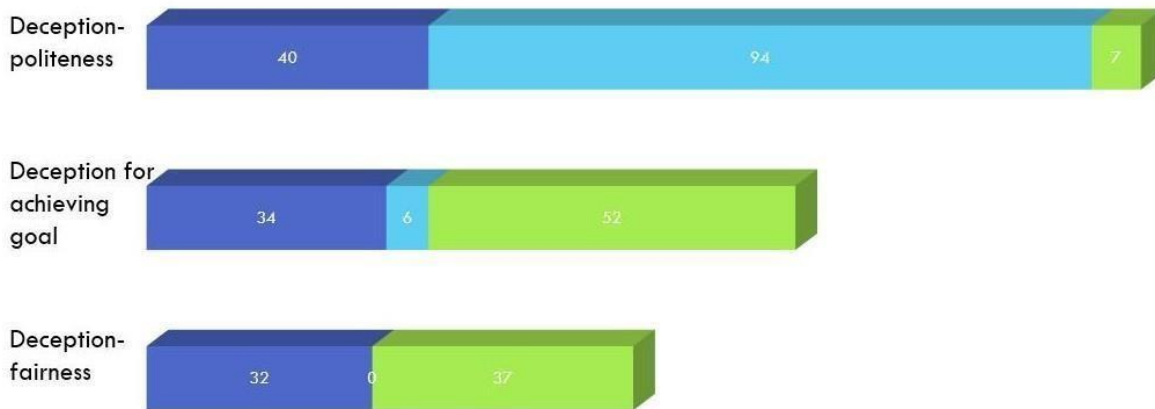


Figure 3. Motivation for deceit in general (indigo color), of adults (blue), of teenagers (green)

2.3. People can spot deceit on two levels:

- Nonverbal – facial expressions, voice, body movements, gestures, posture, respiration and so on.
- Verbal – logical analysis of the information and signals from nonverbal level

We continued with conducting an emotion recognition experiment. We demonstrated 5 photos of people’s faces, demonstrating sadness, joy, disgust, fear and anger. On the nonverbal level the most recognizable emotion was joy (was marked by 77% of respondents), the least recognizable – sadness (20%). Seniors better identified anger – 82%.

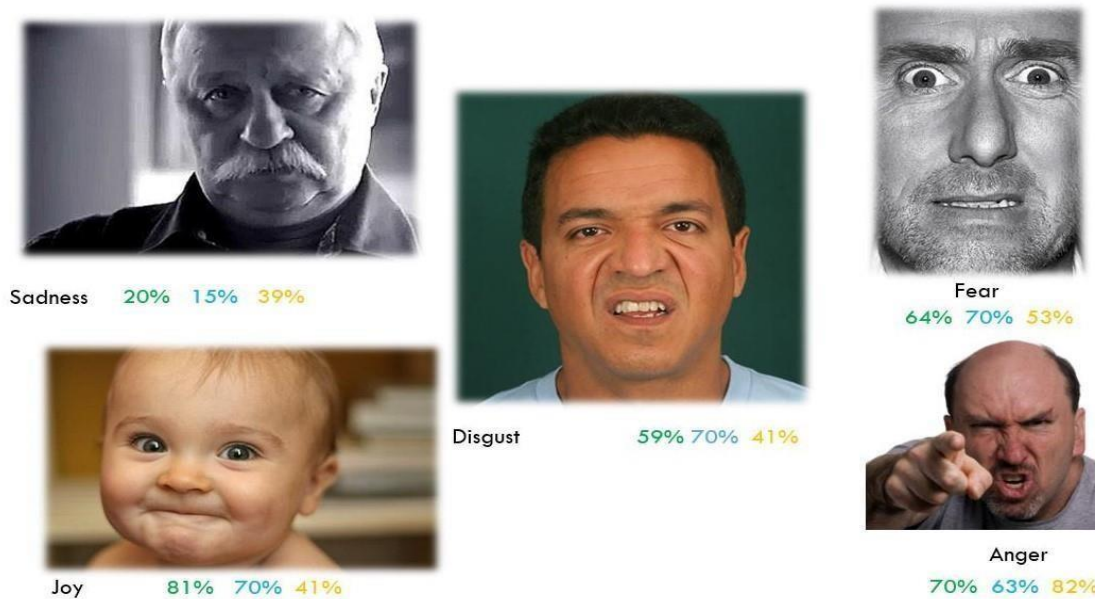


Figure 4. Example of demonstrated photos and ratio of those, who recognized these emotions in general (green), adults (blue) and teenagers (yellow)

We continued with demonstration of two videos, in which one of the students continuously lied and a second one told strictly the truth. After watching the videos, deception was detected by 71% of teachers, 67% of seniors and 10% of elementary school students.

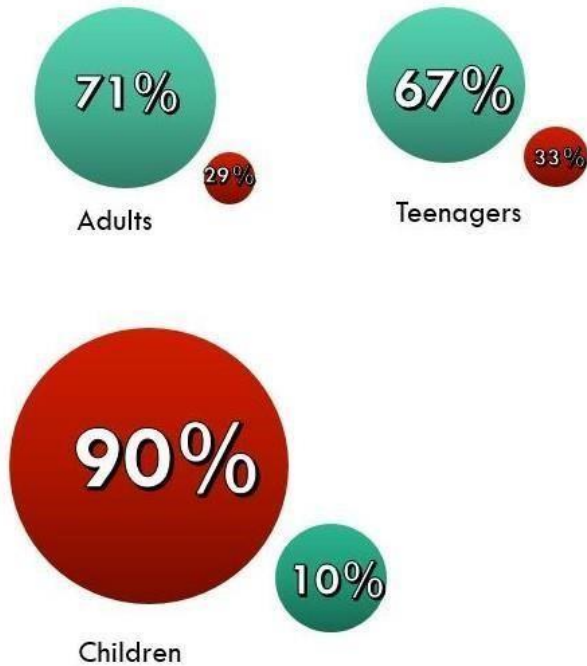


Figure 6. Ratio of respondents, who identified deception correct (green) and mistakenly (red)

Our experiment had a twist: our performers had very different background. The girl was an excellent student, activist, educated, humble and the boy had a difficult character with problems in studying and behavior).

24% of teachers and 19% of seniors had a bias view caused by the personal attitude towards the characters of students-performers rather than to the stories they told.



Figure 7. Ratio of adults to teenagers, who ad bias view

3. CONCLUSIONS

As a result of our research we make such conclusions:

1. Lies is an intrinsic characteristic of our life. Everybody lies.
2. When people hear lies they tend to believe it's half-truth. This is one of the most important social functions of deceit – to save communicative structures in a collision of practically incompatible interests.
3. Deception is always followed by emotions. No facial expression, gesture or voice change is a sign of lying itself. These behaviors only signal emotional arousal or difficulty in thinking. Lying can be inferred from them because the emotion doesn't fit the line being taken or the person appears to be making up his line.
4. The younger a person is the better he recognizes emotions (intuitive level, visual thinking, considering face as an image). It is easier for people to identify joy, more difficult – sadness.
5. Older people better identify deception. Children learn to lie when they grow up. Children usually start lying at the age of 4.
6. Personal bias can lead to wrong conclusions.

We believed the results of our study can be used:

- In pedagogy, in preventive education. Main reason for formation of mendacity is socialization, especially upbringing.
- To improve the ability to detect deceit by those, who need it their profession. Information in a positive light is more easily accepted. Neither emotion is 100% sign of deceit. Emotions could be caused by different reasons.
- By general people, who tend to become victims of the deceit in their everyday lives. The only question is: "Do you always want to know the truth?" And we think that can become the subject of our future research.

4. REFERENCES

1. Eric Berne "Sex in human loving," Pocket Books, 1971, p.10-20
2. Paul Ekman "Telling Lies: Clues to Deceit in the Marketplace, Politics, and Marriage" (W. W. Norton & Company, 1985) ISBN 0-393-32188-6
3. Adrian Furnham "The clues to deceit: The psychology of lie detection," A Sideway View, 2014
- 4 Paul M. Clikeman "The 10 Tell-Tale Signs of Deception," Fraud Magazinetm

PLANTS-SALICYLATES AS THE NATURAL SUBSTITUTES OF ACETYLSALICYLIC ACID IN THE PREVENTION OF THROMBOSIS

TETIANA NOVOSOLOVA ¹, YEVHENIIA DUBROVA ²

Poltava Regional Makarenko Gymnasium, Poltava, Ukraine, e-mail: dubrovaevgeniya13@gmail.com

SUMMARY: Content of sodium salicylate in water extracts of white willow bark, berries of red raspberry, little-leaved linden blossom and black currant leaves was determined. The amount of plants-salicylates water extracts required to substitute 0.075 g of acetylsalicylic acid was calculated. It is shown that the quantitative content of sodium 2-oxybenzencarboxylate in plants-salicylates allow to use this objects as the natural substitutes of prophylactic dose of aspirin. Comparative analysis of the natural and synthetic salicylates influence on vascular-platelet hemostasis was carried out by performing the control experiments on domestic rabbits of silver breed. Capillary bleeding duration, the fibrin clot formation time and platelet number in all three experimental groups were studied. As a result, salicylates of herbal origin do not possess typical antithrombotic pharmacological properties inherent for aspirin; the information from unverified sources was disproved.

KEYWORDS: plants-salicylates, acetylsalicylic acid, vascular-platelet hemostasis.

1. INTRODUCTION

Nowadays, cardiovascular diseases are among the leading causes of life expectancy reduction. Despite the intensive development of modern pharmacology, the most popular antithrombotic preparation is still aspirin. The antithrombotic properties of acetylsalicylic acid came in focus and opened a new therapeutic field for the prevention of atherothrombotic manifestations.

Oxford University clinical studies determined that prophylactic usage of aspirin significantly increases the risk of internal bleeding. There are many recommendations from unverified sources which suggest substituting plants that contain salicylates for thrombosis prevention. But we still haven't got open information about the quantitative content of these compounds in plants and their influence on the hemostasis. Possibility of reasonable confirmation or rejection of mentioned information with substitution of synthetic preparation for available plant material determines the timeliness of our research.

Hypothesis. Pharmacological characteristics of natural salicylates and quantitative content of sodium salicylate in plant material render possible to consider these objects as the substitutes of acetylsalicylic acid in thrombosis prevention.

Objective. To determine the possibility of plants-salicylates usage as the natural substitutes of aspirin in thrombosis prevention.

The aim includes solution of the following tasks:

- to examine the quantitative content of sodium salicylate in plant material by titrimetric analysis;
- to calculate the amount of water extracts from plant material necessary for substitution of aspirin prophylactic dose;
- to carry out an experiment and define the influence of aspirin and natural salicylates on vascular-platelet hemostasis.

2. EXAMINATION OF SODIUM SALICYLATE IN PLANT MATERIAL

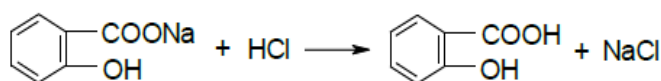
Medicinal plants, which are widespread in our area, were used to study their sodium salicylate content. Decoctions or teas are the most favorable form of such raw materials usage. Thus, the objects of our study were extracts of white willow (*Salix alba*) bark, berries of red raspberry (*Rubus idaeus*), little-leaved linden (*Tilia cordata*) blossom and black currant (*Ribes nigrum*) leaves, prepared by the water extraction method of medicinal plant raw materials (Yarnykh, 2007).

Preliminary, plant raw materials were powdered finely in a porcelain dish to increase the surface area. Finely powered plant raw materials in the number of 20 g was poured by 200 mL of boiling water (1:10) and boiled the decoction on a water bath for 30 min from the start

of boiling. The extract was cooled 10 min at room temperature and was filtered through gauze (Gerush, 2008).

The standard method of acid-base titration used for determination of given substance amount in medical preparations was chosen for examination of sodium 2-oxybenzencarboxylate in plant material.

Sodium salicylate was determined quantitatively by the method of neutralization with standard solution of hydrochloric acid (acidimetry).



Titration was carried out using ether, as produced salicylic acid changes pH of the water solution to pH 2.5 - 3.0, resulting the indicator color changing before the equivalence point (Stoyanova, 2005).

Water extract in the number of 20 sm³ was poured into glass stopper flask with capacity of 100 sm³ by Mohr pipette. It was added 20 sm³ of distilled water (to increase extract transparency), 4 sm³ of diethyl ether (in dry box), 5 drops of mixed indicator (1 sm³ of methyl orange solution and 1 sm³ of methylene blue solution) and was titrated with 0.1 M solution of hydrochloric acid until the purple color in the water layer appeared; finally, the content of the flask was thoroughly shaken.

The research was carried out at the Department of Chemistry of Yu. Kondratyuk Poltava National Technical University.

Experiment # 1. Determination of quantitative content of sodium salicylate in the water extract of white willow young bark.

Table 1. The results of extract titration of white willow young bark.

Experiment №	Volume of titrant (V HCl), mL	Content of C ₇ H ₅ NaO ₃ (x _i), g
№ 1	1.6	0.0256
№ 2	1.6	0.0256
№ 3	1.45	0.0232
№ 4	1.5	0.0240
№ 5	1.55	0.0248
n=5		\bar{x} 0.0248

Mass x_i of sodium salicylate in the extract was calculated by formula:

$$x_i = \frac{C_2 V_i}{1000} M, \quad [1]$$

where C₂ – molarity of HCl (0.1 mol/L);

V_i – volume of titrant (V HCl), used for given probe titration, mL;

M_{e1} – molar mass of sodium salicylate equivalent, calculated by formula:

$$M_d = \frac{M}{n} \quad [2]$$

where M – molar mass of sodium salicylate (160.11 g/mol); N – number of cations in formula;
 n – formal cation charge.

Consequently, $M_{e1} = 160.11$ g/mol.

Before data processing according to the mathematical statistics method, the blunders were revealed and excluded from the number of obtained results of the sampling. The presence of blunders was evaluated by Q-criterion.

Experimental data (x_i) were distributed in ascending order: 0.0232; 0.0240; 0.0248; 0.0256. Questionable data 0.0232 and 0.0256 were examined; for this purpose the data $Q_{exp.1}$ and $Q_{exp.2}$ were calculated by formulas:

$$Q_{q1} = \frac{x_2 - x_1}{x_n - x_1} \quad [3]$$

$$Q_{exp.2} = \frac{x_n - x_{n-1}}{x_n - x_1}, \quad [4]$$

where x_1 – the least result;
 x_n – the highest result.

$$Q_{exp.1} = \frac{0.0240 - 0.0232}{0.0256 - 0.0232} = 0.33;$$

As $P=0.95$ and $n=5$, datum of Q-criterion equals 0.64.

$Q_{exp.1} < 0.64$; $Q_{exp.2} < 0.64$, so, there were no blunders.

Arithmetic mean (\bar{x}) of the analysis results was calculated by formula:

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=0}^n x_i}{n} \quad [5]$$

$$\bar{x} = \frac{0.0232 + 0.0240 + 0.0248 + 2 * 0.0256}{5} = 0.0246 \text{ g};$$

Standard deviation (S) was calculated by formula:

$$S = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n-1}} \quad [6]$$

$$S = 1.09 * 10^{-6}.$$

Confidence interval (ε), where the true datum ranged, was calculated by formula:

$$\varepsilon = \pm \frac{t_{p,f} * S}{\sqrt{n}} \quad [7]$$

where $t_{p,f}$ – Student distribution ratio;

S – standard deviation, rated for sampling of n

data. Student distribution ratio = 2.57 (as $P=0.95$;

$f=5$).

$$\varepsilon = \pm \frac{2.57 * 1.09 * 10^{-6}}{\sqrt{5}} = \pm 1.25 * 10^{-6}.$$

Thus, the average content of sodium salicylate in the water extract of young white willow bark ($V=20$ mL), prepared according to presented above method is $0.0246 \pm 1.25 \cdot 10^{-6}$ g.

Experiment # 2. Determination of sodium salicylate quantitative content in water extract from the old bark of white willow.

The calculations were performed similarly to experiment # 1.

Table 2. The results of extract titration of white willow old bark

Experiment №	Volume of titrant (V HCl), mL	Content of $C_7H_5NaO_3$ (x_i), g
№ 1	0.7	0.0112
№ 2	0.8	0.0128
№ 3	0.75	0.0120
№ 4	0.8	0.0128
№ 5	0.8	0.0128
n=5		$\bar{x}=0.0123$

The experimental data (x_i) were distributed in ascending order: 0.0112; 0.0120; 0.0128. Questionable data 0.0112 and 0.0128 were examined.

$$Q_{\text{exp.1}} = \frac{0.0120 - 0.0112}{0.0128 - 0.0112} = 0.5;$$

$Q_{\text{exp.1}} < 0.64$; $Q_{\text{exp.2}} < 0.64$, so, there were no blunders.

$$\bar{x} = \frac{0.0112 + 0.0120 + 3 \cdot 0.0128}{5} = 0.0123 \text{ g};$$

$$S = 5.13 \cdot 10^{-7}.$$

$$\varepsilon = \pm \frac{2.57 \cdot 5.13 \cdot 10^{-7}}{\sqrt{5}} = \pm 5.9 \cdot 10^{-7}$$

Thus, the average content of sodium salicylate in water extract of white willow old bark ($V=20$ mL), prepared according to the presented above method is $0.0123 \pm 5.9 \cdot 10^{-7}$ g.

Experiment # 3. Determination of sodium salicylate quantitative content in water extract of red raspberry berries.

Table 3. The results of extract titration of red raspberry berries

Experiment №	Volume of titrant (V HCl), mL	Content of $C_7H_5NaO_3$ (x_i), g
№ 1	4.8	0.0769
№ 2	5.0	0.0801
№ 3	4.8	0.0769
№ 4	4.9	0.0737
№ 5	4.95	0.0793
n=5		$\bar{x}=0.0774$

The experimental data (x_i) were distributed in ascending order: 0.0737; 0.0769; 0.0793; 0.0801. Questionable data 0.0737 and 0.0801 were examined.

$$Q_{\text{exp.1}} = \frac{0.0769 - 0.0737}{0.0801 - 0.0737} = 0.5;$$

$Q_{\text{exp.1}} < 0.64$; $Q_{\text{exp.2}} < 0.64$, so, there were no blunders.

$$\bar{x} = \frac{0.0737 + 2 \cdot 0.0769 + 0.0793 + 0.0801}{5} = 0.0774 \text{ g};$$

$$S = 1.25 \cdot 10^{-5}.$$

$$\varepsilon = \pm \frac{2.57 \cdot 1.25 \cdot 10^{-5}}{\sqrt{5}} = \pm 1.44 \cdot 10^{-5}.$$

Thus, the average content of sodium salicylate in the water extract of red raspberry berries ($V=20$ mL), prepared according to presented above method is $0.0774 \pm 1.44 \cdot 10^{-5}$ g.

Experiment # 4. Determination of sodium salicylate quantitative content in water extract of little-leaved linden blossom.

Table 4. The results of extract titration of little-leaved linden blossom

Experiment №	Volume of titrant (V HCl), mL	Content of $C_7H_5NaO_3$ (x_i), g
№ 1	1.8	0.0288
№ 2	1.7	0.0272
№ 3	1.8	0.0288
№ 4	1.75	0.0280
№ 5	1.9	0.0304
n=5		$\bar{x}=0.0286$

The experimental data (x_i) were distributed in ascending order: 0.0272; 0.0280; 0.0288; 0.0304. Questionable data 0.0272 and 0.0304 were examined.

$$Q_{\text{exp.1}} = \frac{0.0280 - 0.0272}{0.0304 - 0.0272} = 0.25;$$

$Q_{\text{exp.1}} < 0.64$; $Q_{\text{exp.2}} < 0.64$, so, there were no blunders.

$$\bar{x} = \frac{0.0272 + 0.0280 + 2 \cdot 0.0288 + 0.0304}{5} = 0.0286 \text{ g};$$

$$S = 1.41 \cdot 10^{-6}.$$

$$\varepsilon = \pm \frac{2.57 \cdot 1.41 \cdot 10^{-6}}{\sqrt{5}} = \pm 1.62 \cdot 10^{-6}.$$

Thus, the average content of sodium salicylate in the water extract of little-leaved linden blossom ($V=20$ mL), prepared according to presented above method is $0.0286 \pm 1.62 \cdot 10^{-6}$ g.

Experiment # 5. Determination of sodium salicylate quantitative content in water extract of black currant leaves.

Table 5. The results of extract titration of black currant leaves

Experiment №	Volume of titrant (V HCl), mL	Content of $C_7H_5NaO_3$ (x_i), g
№ 1	5.0	0.0801
№ 2	5.5	0.0881
№ 3	5.5	0.0881

Nº 4	6.0	0.0961
Nº 5	5.0	0.0801
n=5		$\bar{x}=0.0865$

The experimental data (x_i) were distributed in ascending order: 0.0801; 0.0881; 0.0961. Questionable data 0.0801 and 0.0961 were examined.

$$Q_{\text{exp.1}} = \frac{0.0881-0.0801}{0.0961-0.0801} = 0.5;$$

$Q_{\text{exp.1}} < 0.64$; $Q_{\text{exp.2}} < 0.64$, so, there were no blunders.

$$\bar{x} = \frac{2*0.0801+2*0.0881+0.0961}{5} = 0.0865 \text{ g};$$

$$S = 4.48 * 10^{-5}$$

$$\varepsilon = \pm \frac{2.57*4.48*10^{-5}}{5} = \pm 5.15*10^{-5}.$$

Thus, the average content of sodium salicylate in the water extract of black currant leaves ($V=20$ mL), prepared according to presented above method is $0.0865 \pm 5.15*10^{-5}$ g.

Table 6. The average content of sodium 2-oxybenzencarboxylate in plants water extracts

	Experiment Nº	Titrant V	m $C_7H_5NaO_3$ (x_i), g	\bar{x}	S	$\bar{\varepsilon}$	$\bar{x} \pm \varepsilon$
White willow	1	1.6 mL	0.0256 g	0.0246 g	$1.09*10^{-6}$	$1.29*10^{-6}$	$0.0246 \pm 1.25*10^{-6}$
	2	1.6 mL	0.0256 g				
	3	1.45 mL	0.0232 g				
	4	1.5 mL	0.0240 g				
	5	1.55 mL	0.0248 g				
	n=5						
White willow	1	0.7 mL	0.0112 g	0.0123 g	$5.13*10^{-7}$	$5.9*10^{-7}$	$0.0123 \pm 5.9*10^{-7}$
	2	0.8 mL	0.0128 g				
	3	0.75 mL	0.0120 g				
	4	0.8 mL	0.0128 g				
	5	0.8 mL	0.0128 g				
	n=5						
Red raspberry	1	4.8 mL	0.0769 g	0.0774 g	$1.25*10^{-5}$	$1.44*10^{-5}$	$0.0774 \pm 1.44*10^{-5}$
	2	5.0 mL	0.0801 g				
	3	4.8 mL	0.0769 g				
	4	4.9 mL	0.0737 g				
	5	4.95 mL	0.0793 g				
	n=5						
Linden (blossom)	1	5.0 mL	0.0801 g	0.0865 g	$4.48*10^{-5}$	$5.15*10^{-5}$	$0.0865 \pm 5.15*10^{-5}$ g
	2	5.5 mL	0.0881 g				
	3	5.5 mL	0.0881 g				
	4	6.0 mL	0.0961 g				
	5	5.0 mL	0.0801 g				
	n=5						
curr ant	1	5.0 mL	0.0801 g	0.0865 g	$4.48*10^{-5}$	$5.15*10^{-5}$	$0.0865 \pm 5.15*10^{-5}$ g
	2	5.5 mL	0.0881 g				

	3	5.5 mL	0.0881 g				
	4	6.0 mL	0.0961 g				
	5	5.0 mL	0.0801 g				
	n=5						

Amount of the plants-salicylates water extracts, necessary for substitution 0.075 g (prophylactic preparation dose) of acetylsalicylic acid was calculated by formula:

$$k_{1i} = \frac{0,075 \cdot 20}{\bar{x}_i} \quad [8]$$

Consider k_{1i} as the number of plant water extract necessary for substitution 0.075 g of acetylsalicylic acid. As 20 mL of the extract contains \bar{x} g of sodium salicylate, to obtain 0.075 g of this compound it is necessary to take k_{1i} of decoction. Thus, $k_{1i} = \frac{0,075 \cdot 20}{\bar{x}_i}$.

Table 7. The number of plants-salicylates water extracts, necessary for substitution of acetylsalicylic acid prophylactic dose

Type of plant raw material	Content of sodium salicylate in 20 mL of extract, g	k_{1i} , mL
Young willow bark	0,0246±1,25*10	60,98
Old willow bark	0,0123±5,9*10	121,95
Raspberry berries	0,0774±1,44*10	19,38
Linden blossom	0,0286±1,62*10	52,45
Black currant leaves	0,0865±5,15*10	17,34

3. THE NATURAL AND SYNTHETIC SALICYLATES INFLUENCE ON VASCULAR-PLATELET HEMOSTASIS

Comparative analysis of the natural and synthetic salicylates influence on vascular-platelet hemostasis was carried out by performing the control experiments on domestic rabbits of silver breed.

For the experiment 15 rabbits were selected and three experimental groups each of 5 animals were formed according to principle of analogues. All animals were of the same age – 105 days since the beginning of experiment; approximately one weight category (1.8 kg - 2kg); the same sex – females.

The dietary intake of the animals was changed according to their physiological needs to determine the influence of preparations on hemostasis. The first control group had a standard feed allowance for the autumn-winter period of animals weighing 2 kg. The second animals group took fresh solution of aspirin every day. The dietary intake of the third experimental group included the branches of the white willow.

Screening methods that specify hemostasis disorders and do not cause negative consequences for animals' health were chosen. Methods that determine the causes of the changes were not regarded. Examination of capillary bleeding duration, coagulation rate of venous blood and platelet count were the methods used in research.

Evaluation of capillary bleeding duration according to Duke method. Capillary blood was taken from the inner surface of the ear, previously removing hair and treating the puncture site with alcohol. The ear was punctured. First drop of blood was removed, as it contained incidental impurities and the lymph. Every 30 seconds appearing blood drops were removed without pressing by filter paper. Observations pertaining droplet size reduction until total bleeding arrest were carried out. The experiment was considered as completed when the filter paper was not colored. Normal range was up to 3min (Pervushin, 2009).

Determination of the whole blood clotting time and formation of fibrin clot according to Burker method. The ear of rabbit was disinfected, puncture of the marginal vein by the needle was performed, the first 2 drops were removed. Blood (2 mL) was put to mixer and blown into the cavity slide. The cavity slide was placed to Petri dish. This point was fixed on the clock as the start of experiment. Every two minutes a thin elongated tip of glass rod was set to the edge of the drop. Several spiral movements from the center to the periphery were done inside the drop. The glass rod was removed from the drop of the examined blood. The beginning of coagulation was determined since the moment when the fibrin clot appeared on removed tip of the glass rod. The coagulation time was registered. Normal range – 4-5min (Rykalo, 2011).

Platelet number counting by automatic hematological analyzer BC-3000 plus according to electrical impedance method. The marginal vein was found and pressed by two fingers below the injection point. The vessel increased in size and became visible. Syringe was held in the right hand, the bevel of needle was upward. The marginal vein was punctured and 2 mL of blood was taken into the test tube, treated by heparin. Counting of platelet number was conducted at veterinary clinic.

Experiment # 6.

After the first blood sampling of examined blood it can be summarized, that all animals since the beginning of research were healthy. The indicators of vascular-platelet hemostasis fully meet the standards.

Table 8. Indicators of rabbit's hemostasis before the experiment

Group №	Object (rabbit) №	Weight	Age	Number of platelets in blood	Burker test (minutes)	Duke test (minutes)
1	1	1.85 kg	15 weeks	176*10 ⁹ /L	4 min	2 min
1	2	2 kg	14 weeks	184*10 ⁹ /L	4 min	2 min
1	3	1.93 kg	15 weeks	197*10 ⁹ /L	5 min	2 min
1	4	1.9 kg	14 weeks	180*10 ⁹ /L	5 min	2 min
1	5	1.98 kg	15 weeks	200*10 ⁹ /L	4 min	1,5 min
Middle:		1.93 kg	14.6 w	187*10 ⁹ /L	4.4 min	1.9 min
2	1	2 kg	15 weeks	187*10 ⁹ /L	4 min	1,5 min
2	2	1.88 kg	15 weeks	196*10 ⁹ /L	5 min	2 min
2	3	1.82 kg	14 weeks	205*10 ⁹ /L	4 min	1,5 min
2	4	1.9 kg	15 weeks	209*10 ⁹ /L	4 min	2 min
2	5	1.95 kg	14 weeks	176*10 ⁹ /L	4 min	2 min
Middle:		1.9 kg	14.6 w	194*10 ⁹ /L	4.2 min	1.8 min

3	1	1.97 kg	14 weeks	212*10 ⁹ /L	4 min	1,5 min
3	2	1.79 kg	15 weeks	190*10 ⁹ /L	5 min	2 min
3	3	1.98 kg	14 weeks	192*10 ⁹ /L	4 min	2 min
3	4	2 kg	15 weeks	182*10 ⁹ /L	4 min	2 min
3	5	1.99 kg	14 weeks	194*10 ⁹ /L	4 min	1,5 min
Middle:		1.95 kg	14.4 w	194*10 ⁹ /L	4.2 min	1.8 min
Norm:		-	-	125-250*10 ⁹ /L	4-5 min	1.5-2 min

Table 9. Indicators of rabbit's hemostasis after 4 weeks of experiment

Group №	Object (rabbit) №	Weight	Age	Number of platelets in blood	Burker test (minutes)	Duke test (minutes)
1	1	2.09 kg	19 weeks	175*10 ⁹ /L	4 min	2 min
1	2	2.25 kg	18 weeks	182*10 ⁹ /L	4 min	2 min
1	3	2.19 kg	19 weeks	199*10 ⁹ /L	5 min	2 min
1	4	2.26 kg	18 weeks	177*10 ⁹ /L	5 min	2 min
1	5	2.2 kg	19 weeks	203*10 ⁹ /L	4 min	1,5 min
Middle:		1.93 kg	2.2 kg	18.6 w	187*10 ⁹ /L	4.4 min
2	1	2.26 kg	19 weeks	185*10 ⁹ /L	6 min	3 min
2	2	2.1 kg	19 weeks	195*10 ⁹ /L	6 min	3,5 min
2	3	2.06 kg	18 weeks	204*10 ⁹ /L	6 min	3 min
2	4	2.18 kg	19 weeks	205*10 ⁹ /L	6 min	2,5 min
2	5	2.2 kg	18 weeks	180*10 ⁹ /L	6 min	3 min
Middle:		1.9 kg	2.2 kg	18.6 w	93*10 ⁹ /L	6 min
3	1	2.2 kg	18 weeks	211*10 ⁹ /L	4 min	2,5 min
3	2	2.07 kg	19 weeks	189*10 ⁹ /L	4 min	2,5 min
3	3	2.21 kg	18 weeks	192*10 ⁹ /L	4.5 min	2 min
3	4	2.25 kg	19 weeks	180*10 ⁹ /L	4 min	1,5 min
3	5	2.2 kg	18 weeks	195*10 ⁹ /L	4 min	1,5 min
Middle:		1.95 kg	2.2 kg	18.4 w	193*10 ⁹ /L	4.1 min
Norm:		-	-	-	125-250*10 ⁹ /L	4-5 min

It was observed, that after the first week of the experiment the indicators of vascular-platelet hemostasis of rabbits from the first (control group) did not change. The number of platelets in all three groups of animals was also unchanged. Changes in the time of capillary bleeding and formation of fibrin clot were determined. The formation of fibrin clot in animals of the second experimental group increased by 1 minute. Duration of capillary bleeding increased in all animals of the second group by 0.5-1 minute. All indicators stated that in animals that took the aspirin solution, the coagulation time and formation of fibrin clot had increased. In animals of the third experimental group average statistical indicators remained constant within the normal range. Antithrombotic action of herbal salicylates after the first week of taking is questionable.

The experiment lasted four weeks. It was defined that the time of fibrin clot formation and the duration of capillary bleeding exceeded normal range. Further experiment could be harmful for the health condition of the rabbits, so we stopped a pilot experiment.

For proper evaluation of the difference between two experimental groups that took acetylsalicylic acid and salicylates of herbal origin, non-parametric statistical Mann-Whitney test was used.

- Null hypothesis (H0) – the difference between the time of fibrin clot formation in rabbits of the second and third experimental groups is evidential insignificant.
- Alternative hypothesis (H1) – the difference between the time of fibrin clot formation in rabbits of the second and third experimental groups is evidential significant.
- Null hypothesis (H2) – the difference between the time duration of capillary bleeding in rabbits of the second and third experimental groups is evidential insignificant.
- Alternative hypothesis (H3) – the difference between the time duration of capillary bleeding in rabbits of the second and third experimental groups is evidential significant.

The hypothesis H0 is true, if $U_{rab} < U$. Otherwise, hypothesis H1 is rejected and the alternative is confirmed. The following results were obtained:

- $U_{rab1} > U_1$, as $32 > 25$, so the hypothesis H0 was rejected, the hypothesis H1 was confirmed.
- $U_{rab2} > U_2$, as $33 > 26$, so the H2 hypothesis was rejected, the hypothesis H3 was confirmed.

It was concluded that the difference between the time duration of capillary bleeding and fibrin clot formation in rabbits of the second and third experimental groups is evidential at the significance level $p = 0.05$.

The examination results of the platelets number counting that remained constant in three experimental groups during 4 weeks, represented that neither acetylsalicylic acid nor salicylate of plant origin did not influence the number of platelets in blood. Therefore, this factor was not used while comparing the influence of synthetic and natural salicylates on vascular-platelet hemostasis.

4. CONCLUSIONS

Obtained experimental results and statistically processed data (blunders were not revealed) stated that the highest content of the sodium salt of salicylic acid among the examined objects was defined in the black currant leaves – $0.0865 \pm 5.15 \cdot 10^{-5}$ g. The relatively high content of this compound in raw materials was observed in red raspberry berries – $0.0774 \pm 1.44 \cdot 10^{-5}$ g. Decoctions of red raspberry berries have the most favorable gustatory qualities.

The maximum calculated quantity of plants-salicylates water extracts necessary for substitution of prophylactic aspirin doses according to a content of active substance – 121.95 mL that is feasible for person to take per day. So the quantitative content of sodium 2-oxybenzencarboxylate in plants-salicylates allow to use this objects as the natural substitutes of prophylactic dose of aspirin.

The results of platelets number counting by electronic automatic method remained constant in three experimental groups and stated that neither acetylsalicylic acid nor salicylate of plant origin did not influence the number of platelets in blood. The results of time pertaining fibrin clot formation and capillary bleeding duration within a month indicate that salicylates of herbal origin do not possess typical pharmacological properties inherent for aspirin. Changes of hemostasis indicators of animals taking aspirin were noted in a week, and after four weeks it could be observed that indicators did not meet standards. As exemplified by rabbit, that as well as human being belongs to the class of Mammals, it can be argued that uncontrolled systematic usage of aspirin is dangerous for human health.

The represented hypothesis was disproved.

It should be remembered that natural preparations provide no guarantees of the proper result, so the idea of complete substitution of artificial preparations is incorrect. Any preparation, both artificially synthesized and plant extracts should be taken only under medical supervision with obligatory laboratory diagnostics. Before using the advice of any publication, make sure that it will be useful for your health.

REFERENCES

1. Altınterim B. (2013). "Effects of Willow Bark (*Salix Alba*) and It's Salicylates on Blood Coagulant". *Karaelmas Science and Engineering Journal*, No. 3 (1), 2013 – P. 37-39.
2. Bode-Böger, S.M and others (1998). "Effects of very low dose and enteric-coated acetylsalicylic acid on prostacyclin and tromboxane formation and on bleeding time in healthy subjects". *Eur J Clin Pharmacol*, 1998 - P. 707-714.
3. Feingold Association of the United States. Salicylate List. № 1-631-9340 – P. 54-57.
4. Gerald A. Higgs and others. "Pharmacokinetics of aspirin and salicylate in relation to inhibition of arachidonate cyclooxygenase and anti-inflammatory activity". *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States*. Vol. 84, 1987 - P. 1417-1420.
5. Gerush, O.V., O.M. Goroshko and I.M. Sakhats'ka (2008). "Infusions and decoctions as medicinal plants water extracts or specially prepared extracts solutions". Chernivtsi, Ukraine.
6. Karsten Schror (2009). *Acetylsalicylic Acid*. Weinheim, 2009.
7. Mel'nikova, N.B., S.V. Kononova and others (2004). "Organic medicines. Aromatic compounds". Abstract of lectures. Nizhny Novgorod, Russia.
8. Pervushin, Y.V., S.S. Rogova, and N.I. Kovalevich (2009). "Laboratory methods of hemostasis system research and diagnostics coagulation disorders". Stavropol- Moskva, Russia.
9. Rozhdestvens'kiy, Y.Y., T.O. Mytrofanova, V.I. Pavlenko and others (2010). *Methodical instructions for practical classes in organic chemistry*. Donetsk, Ukraine.
10. Rykalo, N.A., V.V. Pylypovana and others (2011). *Methodical recommendations for medical students (pathophysiology)*. Vinnytsia, Ukraine.
11. Stoyanova, O.P., I.V. Shkutina and others (2005). *Titrimetric methods in pharmaceutical analysis*. Voronezh, Russia.

12. Tytenkov, I.V (2012). "Pharmacological effects of plants salicylates on the vascular-platelet hemostasis". *Clinical Pharmacology and Therapeutics*, No. 4, 2012, P. 59-63.
13. Wu, K.K (2000). "Aspirin and salicylate: An old remedy with a new twist". *Circulation*, Vol. 102, 2000. P. 2022-2023.
14. Yarnykh, T.G (2007). *Infusions and decoctions: lecture for the students of specialty "Pharmacy" and "Clinical Pharmacy"*. Kharkiv, Ukraine.

CAPÍTULO 2

-Ingeniería Biomédica-

DESARROLLO DE ALGORITMO BASADO EN VISIÓN COMPUTACIONAL PARA LA CLASIFICACIÓN DE EDAD A PARTIR DE IMÁGENES FACIALES

Alumnos: González-Sandoval Josué, Cervantes Ramirez Faviola Stephanye, Segovia Morales Adán y Supervisor: E. Gerardo Mendizabal-Ruíz.

peyken20@gmail.com

gerardo.mendizabal@red.cucei.udg.mx

adan_segovia.mor@hotmail.com

Departamento de Electrónica, CUCEI - Universidad de Guadalajara, Guadalajara, México. Estudiante de la Universidad de Guadalajara; CUCEI- Licenciatura en Ingeniería Biomédica. Departamento de Ciencias Computacionales, CUCEI - Universidad de Guadalajara, Guadalajara, México. Instituto Tecnológico Superior de Zapopan, Zapopan Jalisco, México.

Resumen

En el presente trabajo se atacó la problemática de la estimación de la edad de un individuo mediante un algoritmo que combina la visión computacional y el aprendizaje máquina. Se empleó una pequeña base de datos con la finalidad de que el algoritmo fuese lo suficientemente capaz de discernir entre 3 diferentes clases: niño, adulto joven y adulto maduro. De todo el conjunto de imágenes faciales se extrajeron características basadas en intensidad e invariantes a transformaciones geométricas como la traslación, rotación y escala

Por lo tanto se emplearon los filtros propuestos por Laws (en 1980) para de esta manera cuantificar energéticamente las texturas de un pixel y sus vecinos de una fotografía del rostro de una persona determinada. Complementando dicha técnica, y con la intención de proporcionarle robustez al algoritmo computacional, se calcularon los siete momentos invariantes de Hu (1962) para cada filtro de Laws

Después se hizo una reducción de dimensión de estos features utilizando la herramienta Weka®, discriminando las características menos influyentes para la clasificación de las 3 clases ya mencionadas.

Finalmente se implementó un árbol de decisión que evalúa únicamente 2 valores de información para una imagen dada y lograr clasificar con un 88.67% de efectividad la imagen del rostro de un individuo.

Palabras claves: Procesamiento de Imágenes, Mascaras de Texturas de Law, Momentos de Hu

Abstract

In this paper the problem of estimating the age of an individual is attacked by an algorithm that combines computer vision and machine learning. He used a small database in order that the algorithm was sufficiently able to discern between 3 different classes: child, adult and mature adult. The entire set of facial features based on intensity images and invariant to geometric transformations such as translation, rotation and scale were extracted

Therefore the filters proposed by Laws (in 1980) to quantify energy this way the textures of a pixel and its neighbors of a photograph of the face of a certain person were employed. Complementing this technique, and with the intent to provide robustness to the computational algorithm, seven invariant moments of Hu (1962) for each filter were calculated Laws

Then it made a dimensionality reduction of these features using the tool Weka@ discriminating less influential characteristics for the classification of the three classes mentioned above. Finally a decision tree that evaluates only two information values for a given rate and achieve a 88.67% effective image of the face of an individual image was implemented.

Keywords: Image processing, hu moments, Laws texture masks.

Introducción

En los últimos años ha incrementado considerablemente el interés en la estimación automática de la edad mediante algoritmos basados en visión artificial, esto radica en las múltiples e importantes aplicaciones que la técnica abarca; por ejemplo en monitores de vigilancia, control en la seguridad, interacción humano-computadora, entre otras. La necesidad de identificar la edad de las personas que acceden a distintas páginas y servicios disponibles en la red es de vital importancia, el acceso a internet ofrece una gran cantidad de oportunidades, pero a su vez esconde muchos peligros, en especial para los niños. Sin embargo, los recientes trabajos relacionados con estas aplicaciones dejan muy en claro que es una tarea complicada debido a que el proceso de envejecimiento es relativo en cada individuo, afectando factores tanto intrínsecos como extrínsecos (factores genéticos, estilo de vida, expresiones, hábitos alimenticios, consumo de drogas, cigarrillos, etc.).

Definición de los rangos de edad

Primeramente, se define como rango de edad a un intervalo de edad de usuarios con características similares entre ellos. Es decir, el rango de edad (en adelante, RE) entre los 20 y los 30 años, posee características diferentes que el rango de edad entre los 10-14 años, por ejemplo. Muchos estudios en percepción y estimación de edad están basados en el uso de imágenes faciales. En el área de la psicología una de nuestras edades reconocidas es la edad subjetiva la cual engloba diversos factores (Azuma, 2009).

Los rangos propuestos que mejor resultado ofrecen son aquellos donde (Goudong, 2008):

- El número de intervalos/rangos de edad es pequeño, normalmente 2 o 3 como máximo.
- Cada rango de edad se corresponde con las etapas naturales de crecimiento de los individuos, es decir, crecimiento, adolescencia, mayoría de edad, y madurez.
- Basado en imágenes de la edad humana de aprendizaje múltiple localmente ajustado con una regresión robusta.

Se planteó la hipótesis de que la cantidad de arrugas y la variación de contrastes en un rostro humano son directamente proporcional a la edad del mismo. Teniendo lo anterior en cuenta se declararon 3 rangos de edad: I. Infante: Individuo entre 0 y 17 años. II. Adulto Joven: Individuo entre 18 y 40 años. III. Adulto Maduro: Individuo mayor a 41 años.

Máscaras de textura de Laws

Teniendo en cuenta esto se determinó emplear los filtros propuestos por Laws (en 1980) para de esta forma cuantificar energéticamente las texturas de un pixel y sus vecinos de una fotografía del rostro de una persona determinada. Laws propuso que se puede cuantificar la energía de una textura con una máscara de convolución uni-dimensional, y que al combinar las máscaras se puede garantizar que sus filtros son invariantes a transformaciones de rotación (Laws, 1980).

Máscaras de convolución uni-dimensional

$$5 = [1 \ 4 \ 6 \ 4 \ 1]$$

$$5 = [-1 \ -2 \ 0 \ 2 \ 1]$$

$$5 = [-1 \ 0 \ 2 \ 0 \ -1]$$

$$5 = [1 \ -4 \ 6 \ -4 \ 1]$$

Cada uno de estos filtros resalta una característica textural distinta:

- L5 – (Gaussiana) Da una media ponderada en un centro local.
- E5 – (Gradiente) Responde al paso en los bordes en filas o columnas.
- S5 – (LOG) Detecta manchas.
- R5 – (GABOR) Detecta rizos.

En su trabajo Laws explica que a partir de estas 4 máscaras de convolución unidimensionales se pueden crear 16 máscaras bi-dimensionales realizando una multiplicación producto punto unas entre otras.

Con las cuales probó su efectividad utilizando una base de datos experimental, para después reportar una tabla con las máscaras 2D ordenadas y sus respectivos coeficientes de mayor a menor relevancia.

En el presente trabajo se implementaron las primeras 9 máscaras de la tabla anteriormente citada.

- L5E5 • E5L5 • E5R5
- L5S5 • E5E5 • S5L5
- L5R5 • E5S5 • S5E5

Momentos Invariantes Los momentos y sus invariantes relacionados han sido ampliamente analizados para caracterizar los patrones en las imágenes obteniendo como resultado una variedad de aplicaciones. Los momentos más conocidos son:

- Momentos geométricas (H. Ming-Kuei, 1962).
- Momentos de Zernike (M.R. Teaque, 1980).
- Momentos de rotación (J. F. Boyce, 1983).

El concepto de momento invariante se introduce por primera vez por Hu (1962) (H. Ming-Kuei, 1962).

Hu deriva seis invariantes ortogonales absolutos y una posición oblicua ortogonal invariante sobre la base de invariantes algebraicos, que no sólo son independientes de la posición, tamaño y orientación, sino también de la proyección paralela.

Los momentos invariantes de Hu han demostrado ser las medidas adecuadas para el trazado de patrones de una imagen, bajo el supuesto de imágenes con funciones continuas y libres de ruidos. Estos momentos se han aplicado ampliamente para el reconocimiento de patrones en imágenes, en el registro y la reconstrucción de imágenes.

Los momentos invariantes de Hu se calculan de la siguiente manera.

Tomemos (I, J) como la intensidad del punto (x, y) en una región. El momento de orden (p, q) para la región se define como,

$$M_{pq} = \iint_R I(x, y) x^p y^q dx dy \quad [1]$$

Donde la sumatoria se toma sobre todas las coordenadas espaciales (x, y) de puntos de la región. El momento central de orden (p, q) viene dado por,

$$\mu_{pq} = \iint_R I(x, y) (x - \bar{x})^p (y - \bar{y})^q dx dy \quad [2]$$

Donde

$$\bar{x} = \frac{M_{10}}{M_{00}} \quad [3] \quad \bar{y} = \frac{M_{01}}{M_{00}} \quad [4]$$

Los momentos centrales normalizados de orden (p, q) se definen como

$$\eta_{pq} = \frac{\mu_{pq}}{\mu_{00}^{\frac{p+q}{2}}} \quad \text{donde } \gamma = \frac{p+q}{2} + 1 \text{ para } (p+q) = 2, 3, \dots \quad [5]$$

El siguiente conjunto de momentos invariantes propuesto por Hu (1962), se puede obtener usando únicamente los momentos centrales normalizados de órdenes 2 y 3

$$1 = \mu_{20} + \mu_{02} \quad [6]$$

$$2 = (\mu_{20} - \mu_{02})^2 + 4 \mu_{11}^2 \quad [7]$$

$$3 = (\mu_{30} - 3 \mu_{12})^2 + (3 \mu_{21} - \mu_{03})^2 \quad [8]$$

$$4 = (\mu_{30} + \mu_{12})^2 + (\mu_{21} + \mu_{03})^2 \quad [9]$$

$$5 = (\mu_{30} - 3 \mu_{12})(\mu_{30} + \mu_{12})[(\mu_{30} + \mu_{12})^2 - 3(\mu_{21} + \mu_{03})^2] + (3 \mu_{21} - \mu_{03})(\mu_{21} + \mu_{03})[3(\mu_{30} + \mu_{12})^2 - (\mu_{21} + \mu_{03})^2] \quad [10]$$

$$6 = (20 - 02)[(30 + 12)^2 - (21 + 03)^2] + 4 \cdot 11(30 + 12)(21 + 03) \quad [11]$$

$$7 = (3 \cdot 21 - 03)(30 + 12)[(30 + 12)^2 - 3(21 + 03)^2] + (3 \cdot 12 - 03)(21 + 03)[3(30 + 12)^2 - (21 + 03)^2] \quad [12]$$

Para que todos los momentos contribuyan por igual en la función de discriminación, y por tanto estén dentro del mismo orden de magnitud, a veces es necesario proceder a una normalización del tipo,

$$' = \ln(()) \quad [13]$$

Este conjunto de momentos resulta ser invariante a la traslación, la rotación y el cambio de escala. (Gonzalo, 2008).

Objetivos

Desarrollar un algoritmo computacional basado en visión artificial y aprendizaje máquina capaz de clasificar en tres categorías (infante, adulto joven y adulto maduro) rostros de individuos con respecto a su edad. Con un enfoque para atacar problemáticas en materia de seguridad en la web.

Tomar como referencia la variabilidad de tonalidades y las arrugas para después calcular matemáticamente características pertinentes a texturas, mediante las máscaras de Laws y los momentos invariantes de Hu.

Y por último implementar un árbol de decisión para evaluar los features más discriminativos dada una fotografía del rostro de un individuo.

Materiales y Metodología

Con base en la premisa de que la variación en intensidad y la cantidad de arrugas (textura) en el rostro puede llegar a ser un factor importante para distinguir la edad de una persona, nos vimos en la necesidad de conseguir fotografías del rostro de personas que pertenecieran a las tres categorías de edad anteriormente declaradas.

Se consideró además que la fotografía que se deseara analizar garantice una estandarización, por lo cual, debería de estar libre de cualquier fondo, ya que de no ser así,

éste afectaría significativamente los cálculos matemáticos que se llegasen a realizar, y se reflejaría en la desatinada elección del modelo para la clasificación.

Teniendo lo anteriormente en cuenta, se implementó un algoritmo para la sustracción del fondo de una fotografía del rostro de una persona. El algoritmo funciona de la siguiente manera:

Con la cámara web, se toma primeramente una fotografía del fondo, y de preferencia que las condiciones ambientales (luz) estén lo más controladas posibles. Después entra en escena el rostro que se desea segmentar. Ambas imágenes se convierten a escala de grises calculando una media ponderada de las distintas componentes de color de cada pixel (RGB).

Una vez teniendo la imagen del fondo (,) y la imagen del rostro más el fondo (,), se calcula una resta pixel a pixel entre ambas imágenes:

$$(,) - (,) = (,) [14]$$

Esperando así que la imagen resultante (,) tenga valores muy cercanos a cero en los pixeles donde solía estar el fondo. Después, la imagen resultante se umbraliza teniendo al final el rostro segmentado.



Figura 1.- sustracción del fondo

Se comenzó pues, el proceso de la adquisición de las fotografías faciales mediante el algoritmo de sustracción de fondo anteriormente descrito.

Dado por hecho que se cuenta con un conjunto significativo de fotografías de personas con diferente sexo y edad además de características propias de cada individuo, como por

ejemplo bigote, barba, anteojos, piercing entre otras. La metodología propuesta consta de 4 pasos:

1) Filtros de Laws

La imagen en escala de grises a la que previamente se le sustrajo el fondo se sometió al proceso de filtrado propuesto por Kenneth Ivan Laws en 1980.

Se pretendía que esta técnica pudiese ayudar a la extracción de descriptores propios basados en la distribución y cantidad de arrugas y manchas en la piel (textura).



Figura 2.- L5E5

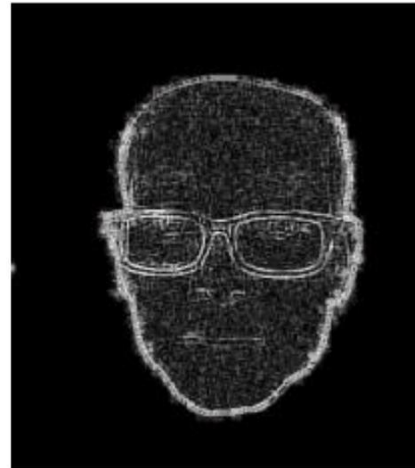


Figura 3.- L5S5



Figura 4.- L5R5



Figura 5.- E5L5

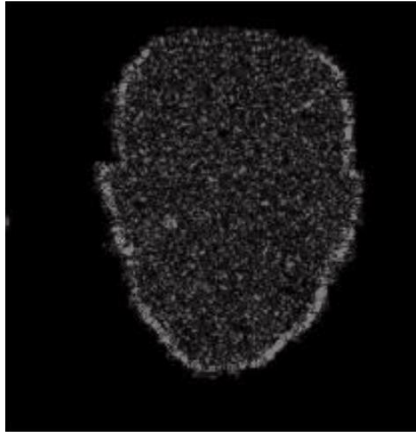


Figura 6.- E5E5

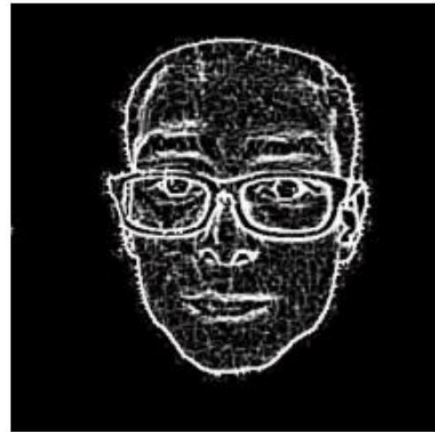


Figura 7.- E5S5



Figura 8.- E5R5

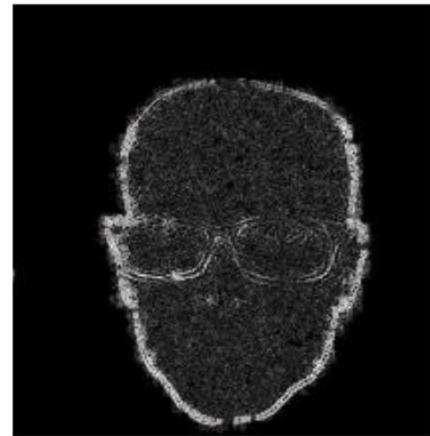


Figura 9.- S5L5

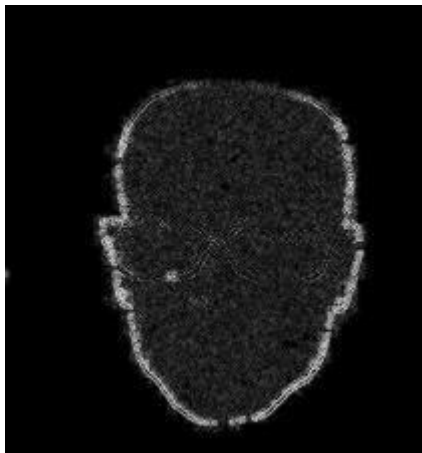


Figura 10.- S5L5

Las imágenes resultantes describen a la imagen original en términos de textura, teniendo en cuenta los conceptos de detección de manchas mediante el filtro S5 y la detección de rizos con el R5.

A manera de complementar la técnica, y con la intención de obtener características en zonas más específicas, el algoritmo permite realizar un recorte en el área de la mejilla, y así, de igual manera realizar los 9 filtros en dicha porción facial.

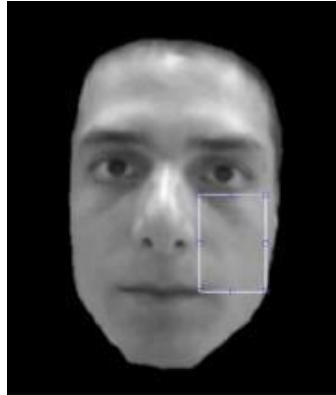


Figura 11.- Recorte de la porción de la mejilla

Se espera que, por tratarse de una zona que concentra más información relativa a la edad del individuo, permita al algoritmo definitivo disponer de más características descriptivas de la piel del sujeto en cuestión.

2) Obtención de los Momentos Invariantes de Hu

Las imágenes resultantes (rostro completo y recorte de mejilla) se sometieron a la extracción de los momentos invariantes de Hu con la intención de contar con descriptores robustos basados en la distribución de intensidad e inertes a diversas transformaciones geométricas.

Proceso que arroja como resultado 126 valores descriptivos para cada fotografía.

3) Etapa de Aprendizaje Máquina

Se procesaron 53 imágenes de sujetos con diferente edad y sexo, teniendo finalmente 53 puntos dispersos en un espacio con 126 dimensiones.

Posteriormente se empleó la herramienta computacional Weka® para el análisis estadístico y la determinación de un óptimo algoritmo para la clasificación de los descriptores.

Se hicieron pruebas con diferentes métodos de clasificación obteniendo a su vez diferentes porcentajes de efectividad.

- Logistic 94.33%
- Multilayer Perceptron 94.33%

- IB1, IBk y LWL 90.56%
- J48 Tree 88.67%
- KStar 88.67%
- Sequential Minimal Optimization (SMO) 73.58%
- Radial Basis Function Network 50.94%

4) Implementación del clasificador

Hemos sometido a estudio los datos con los diferentes clasificadores que proporciona Weka® y, como veremos, algunos consiguen excelentes soluciones mientras que otros (como el Radial Basis Function Network) dan peores aproximaciones a priori.

Los sistemas de aprendizaje basados en árboles de decisión son quizás el método más fácil de utilizar y de entender.

Un árbol de decisión es un conjunto de condiciones organizadas en una estructura jerárquica, de tal manera que la decisión final a tomar se puede determinar siguiendo las condiciones que se cumplen desde la raíz del árbol hasta alguna de sus hojas.

Árbol de decisión

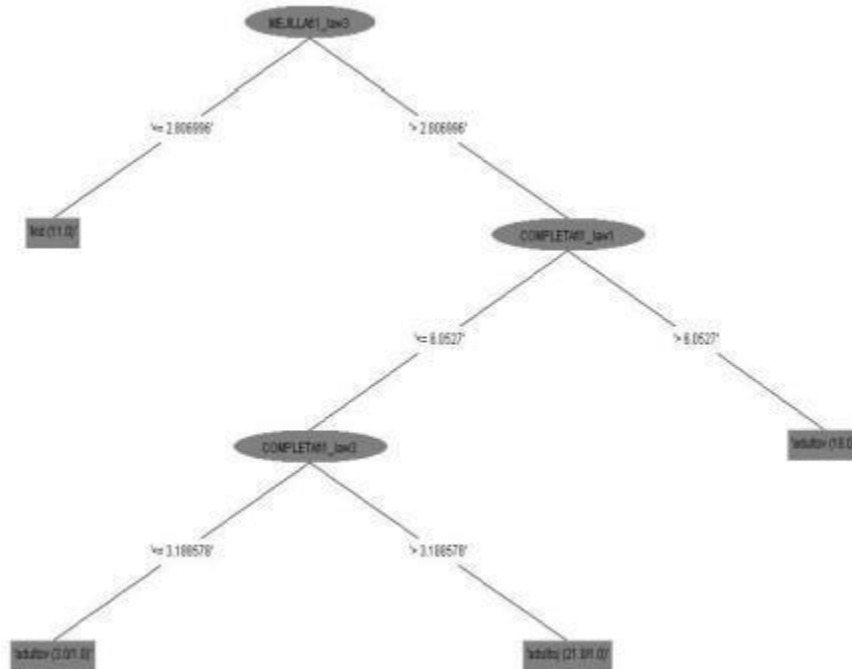


Figura 12.- Árbol de decisión

Matriz de confusión

Tabla 1.- Matriz de Confusión

a	b	c	clasificación
10	1	0	a= Niño
0	19	2	b= Adulto Joven
0	3	18	c= Adulto Maduro

Resultados



El Rostro pertenece a la clase: Niño.

OK



El Rostro pertenece a la clase: Adulto Joven

OK



El Rostro pertenece a la clase: Adulto Maduro

OK



El Rostro pertenece a la clase: Adulto Joven

OK



El Rostro pertenece a la clase: Adulto Joven

OK



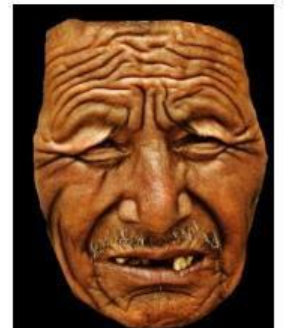
El Rostro pertenece a la clase: Adulto Joven

OK



El Rostro pertenece a la clase: Niño

OK



El Rostro pertenece a la clase: Adulto Maduro

OK



Figura 13.- Resultados

Para validar la efectividad del algoritmo de clasificación se utilizó un conjunto de 30 imágenes ajenas al set de entrenamiento que se empleó para el árbol de decisión. Algunos de los resultados arrojados por el algoritmo se presentan a continuación.

Con este set de validación de 30 imágenes se logró clasificar correctamente 27 rostros, lo cual concuerda aproximadamente con lo que arrojó Weka® al momento de la experimentación.

Discusión

Se implementó el método propuesto utilizando Matlab® y se hicieron pruebas con un set de 30 imágenes ajenas al entrenamiento pertenecientes a las 3 clases.

Los resultados concuerdan con el porcentaje de efectividad que se obtuvo al momento de la experimentación con la ayuda del software de aprendizaje máquina y sus algoritmos de clasificación.

Gracias a esta herramienta computacional se logró hacer una reducción de dimensionalidad, acotando de esta forma el número de variables aleatorias que se trataron, que en este caso en particular resultaron 126 descriptores para cada imagen. Con la ayuda del clasificador estadístico (J48) se consiguió que el algoritmo evaluara únicamente 3 descriptores, disminuyendo a su vez el peso computacional y el tiempo de ejecución del algoritmo implementado. Los descriptores con mayor relevancia fueron:

- Del filtro L5R5 de Laws, el primer momento de $Hu(1)$ del recorte de la mejilla.
- Del filtro L5E5 de Laws, el primer momento de $Hu(1)$ de la imagen completa.
- Del filtro L5R5 de Laws, el primer momento de $Hu(1)$ de la imagen completa.

Al parecer el filtro gaussiano en combinación con el que involucra el gradiente y los rizados resultaron ser los más importantes para este caso en particular. Además el primer momento de Hu demostró ser el más valioso en el modelo de clasificación, al menos para tratar la problemática en cuestión.

En las primeras versiones del algoritmo se habían probado distintas metodologías para la extracción de características relativas a cambios en los valores de intensidad de un grupo de píxeles analizados. Se hicieron pruebas en primera instancia con la extracción de bordes mediante el cálculo del gradiente (se implementaron diferentes métodos:

canny, sobel y prewitt), se pretendía que esta técnica pudiese ayudar a la obtención de descriptores propios basados en la distribución y cantidad de arrugas así como manchas en la piel (textura). Pero una vez que se analizaban dichos descriptores con la herramienta Weka®, denotaban nulidad en la influencia para un modelo óptimo de clasificación.

También se probó el calcular descriptores en un recorte de la porción de la frente y de los ojos del individuo, pero de igual manera se obtuvieron resultados desfavorables.

Se cree que, el bigote, la barba y accesorios como los lentes, perjudican significativamente la clasificación de las imágenes.

Conclusiones y Trabajo Futuro

La clasificación de imágenes mediante técnicas de análisis de texturas supone una alternativa cuando las clases informacionales son heterogéneas o cuando no se dispone de imágenes multiespectrales o su resolución espacial es inferior a la necesaria. Al poder emplear fotografías, estas técnicas permiten obtener clasificaciones temáticas con un bajo coste de adquisición de datos.

El desarrollo de nuevas herramientas que permitan garantizar la protección de los menores es indispensable ya que al entrar en contacto con el internet, a su vez lo hacen con peligros latentes como entrar a sitios no aptos para su edad o ser víctimas de personas perjudiciales.

Con el desarrollo de esta herramienta se sienta un precedente importante ya que de manera eficaz podemos identificar y clasificar en rangos de edades, con una efectividad bastante aceptable y que puede mejorar si se realizan algunas mejoras, como por ejemplo, la implementación de un clasificador más robusto, así como realizar pruebas con una base de datos mayor.

Se demostró que mediante el uso de la segmentación por textura y en especial lo propuesto por Laws arroja resultados con unos buenos parámetros de confiabilidad, que al final era el propósito inicial, crear una herramienta funcional y con estabilidad que tenga oportunidad de crecer y mejorarse en un futuro no muy lejano.

Nos dimos cuenta que la porción de la mejilla concentraba gran cantidad de información característica relativa a cada clase. También nos percatamos que el momento ϕ_1 de Hu en el primer mapa de energías de Laws juega un papel importante para la clasificación entre niños y adultos maduros, arrojando un porcentaje de asertividad de 95%; a su vez, para discernir una clase intermedia, fue necesario calcular diferentes mapas de Laws para la correcta clasificación.

Bibliografía

Azuma, M. Nishimoto. (2009) (N. Miyamoto, T.X. Fujisawa, N. Nagata, and A. Kosaka). "A comparative assessment of one's own age from facial images of others: Two case studies for the americans and the japanese. In Systems, Man and Cybernetic" 2009. SMC 2009.

Gonzalo Pajares Martinsanz. (2008), (Jesús M. de la Cruz García). "Visión por Computador, Imágenes digitales y aplicaciones". 2da Edición. Marzo 2008. Alfaomega.

Guodong Guo, Yun Fu. (2008), C.R. Dyer, and T.S. Huang, Image Processing, IEEE Transactions on, 17(7):1178 –1188, july 2008.

H. Ming-Kuei. (1962)"Visual pattern recognition by moment invariants," Information Theory, IRE Transactions, vol. 8, pp. 179-187, 1962.

J. F. Boyce. (1983). (W. J. Hossack) "Moment Invariants for Pattern Recognition," Pattern Recognition Letters, vol. 1, pp. 451-456, 1983.

Laws Kenneth Ivan. (1980) "Textured Image Segmentation", Department of Electrical Engineering, University of Southern California, 1980.

M. R. Teaque. (1980) "Image Analysis via the General Theory of Moments," Journal of the Optical Society of America, vol. 70, pp. 920-930, 1980.

CAPÍTULO 3

-Ingeniería Ambiental-

EVALUACIÓN DEL ESTADO AMBIENTAL DEL ECOSISTEMA FLUVIAL EN LAS COMUNIDADES DE LA MICROCUENCA EL CANGREJO, AUTLÁN, JALISCO

Enriquez-Brambila, Enya Roseli¹, Aispuro-Chávez, José Abad² y Claudia Irene Ortiz-Arrona³

¹ Centro Universitario de la Costa Sur. Universidad de Guadalajara. Autlán, Jalisco, México. enya.roseli@hotmail.com

² Centro Universitario de la Costa Sur. Universidad de Guadalajara. Autlán, Jalisco, México.

abad_aispuro@hotmail.com

³ Departamento de Ecología y Recursos Naturales, Centro Universitario de la Costa Sur, México. cortiz@cucsur.udg.mx

RESUMEN

Se evaluó estado del ecosistema fluvial de la microcuenca El Cangrejo, ubicado en el municipio de Autlán de Navarro, Jalisco, para evaluar la calidad de las riveras, identificar los principales impactos ambientales y conocer la percepción de sus pobladores respecto a la calidad de su río y las riveras.

El área de estudio se caracterizó con sistema de información geográfica. Se valoraron tres tramos de 200 m de longitud a lo largo del corredor ribereño, incluyendo el cauce y sus riveras. Los tramos de estudio están próximos a las comunidades de la microcuenca El Cangrejo: -Ayutita, La Lima y El Jalocote-. En el estudio se empleó una metodología con enfoque socio-ambiental, que consistió en: a) la aplicación del índice de calidad de riveras (RQI), que evalúa siete atributos de estructura y funcionamiento del río y sus riveras, b) identificación de impactos ambientales y c) entrevistas semiestructuradas a actores clave de las tres comunidades para conocer su percepción sobre la calidad de su río y riveras. La calidad de las riveras indica un estado bueno, malo y regular para Ayutita, La Lima y El Jalocote, respectivamente. Se identificaron los impactos ambientales en base a observaciones en campo y en la percepción de las comunidades de su ecosistema fluvial. Se concluye que es necesario planificar prácticas de educación ambiental y talleres enfocados a disminución de impactos y acciones de restauración en los atributos más dañados del ecosistema fluvial; proponiendo con ello una serie de acciones para conservar y restaurar las condiciones ambientales del ecosistema fluvial en la microcuenca.

Palabras clave: calidad de las riveras, ecosistema fluvial, percepciones sociales.

ABSTRACT

The current state of the river ecosystem of the watershed El Cangrejo, located in the municipality of Autlán, Jalisco, was evaluated to evaluate the riparian quality and identify the main environmental impacts and to know the perception of its residents regarding the quality of their river and the riverbanks.

The study area was characterized with Geographic Information System. Three sections of 200 meters in length each along the river corridor were assessed, including the riverbed and its banks. The study sections are close to the communities of the watershed El Cangrejo - Ayutita, La Lima and El Jalocote-. A methodology with socio-environmental approach was applied, consisting of: a) Riparian Quality Index (RQI), which measures seven attributes of structure and operation of the river and its banks, b) identification of environmental impacts and c) semi-structured interviews to key actors from the three communities to know their perception about the estate of the river and the riparian areas. The current situation of the river banks indicates good, poor and regular conditions for Ayutita, La Lima and El Jalocote, respectively. Environmental impacts were identified with the corresponding observations and the perception of the communities. In conclusion, it is necessary to plan environmental education practices and workshops focused on the reduction of impacts and restoration actions in the most damaged river ecosystem attributes. A number of actions to preserve and restore environmental conditions of the watershed are projected.

Key words: riparian quality, river ecosystem, social perceptions.

INTRODUCCIÓN

El recurso agua sin lugar a dudas es uno de los elementos principales del cual dependen todos los organismos de la Tierra y, a través de los siglos, ha permitido el desarrollo de las diferentes sociedades en el planeta, desde tiempos inmemoriales hasta la era actual. No obstante, no se toma en cuenta la importancia de éste recurso y se ignora por completo el hecho de que es vulnerable, limitado y últimamente escaso (Mejía, 2005).

La mayoría de los países del mundo en el S. XXI están siendo desafiados a uno de los mayores retos de la historia de la humanidad para preservar la diversidad biológica y los servicios ambientales que se obtienen gratuitamente de la naturaleza (Meli y Carrasco-Carballido, 2011), pero no se le da la importancia requerida, ni tampoco se respeta a ninguno de los diferentes ecosistemas que preservan lo antes mencionado, tal es el caso de los ecosistemas fluviales.

Los ecosistemas fluviales se componen principalmente por la interacción y dinámica del cauce de un río o arroyo y su ribera. Son muy importantes por su capacidad de generar servicios (alimento, recreación, paisajismo, entre otros) y mantener recursos (agua, nutrientes, vegetación y flora) que abastecen las necesidades de la sociedad (Postel y Richter 2010, 2007).

Sin embargo, estos ecosistemas son de los más degradados por las actividades humanas, afectando su estructura y funcionamiento (Reche, 2003). Por ello es importante conocer la calidad del ecosistema fluvial en zonas pobladas para reconocer problemáticas e identificar soluciones para su restauración y conservación, en conjunto con la participación social.

En este contexto, en el presente trabajo se plantea la evaluación del ecosistema fluvial en la micro-cuenca El Cangrejo, para hacer un diagnóstico del estado de salud que guardan las riberas y problemáticas de la zona, obteniendo con ello información sobre el estado actual de dicho ecosistema para identificar los impactos ambientales que lo degradan y conocer la percepción de las comunidades ubicadas en la micro-cuenca acerca del estado del río y sus riberas. A partir de este análisis se plantean propuestas de conservación y restauración del ecosistema fluvial en base a sus atributos de estructura y funcionamiento dañados y, a las actividades humanas que deterioran un ecosistema que necesitan como comunidad rural para continuar obteniendo beneficios en servicios y recursos naturales del entorno.

OBJETIVO GENERAL

Evaluar el estado del ecosistema fluvial de la microcuenca El Cangrejo y conocer la percepción de sus pobladores respecto al estado de su ecosistema fluvial.

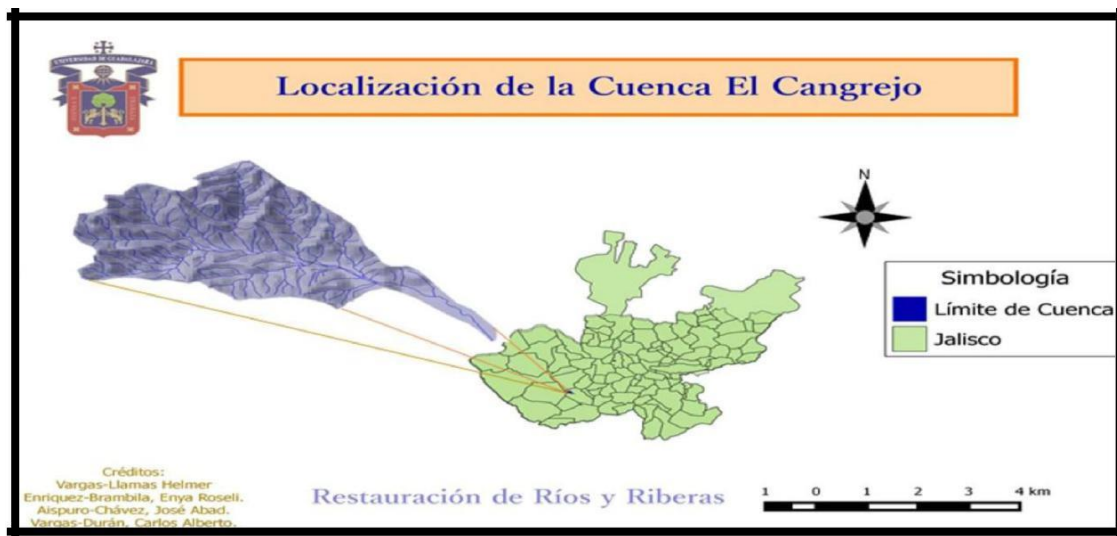
OBJETIVOS PARTICULARES

1. Evaluar el estado del río y las riberas de la microcuenca El Cangrejo.
2. Identificar los impactos y problemas más importantes en el ecosistema fluvial.
3. Conocer la percepción social de los habitantes de las comunidades de la microcuenca sobre la calidad del ecosistema fluvial.
4. Generar propuestas de acciones para la protección y restauración del ecosistema fluvial.

MATERIALES Y METODOLOGÍA

Área de estudio

La micro-cuenca El Cangrejo está situada en el municipio de Autlán de Navarro del estado Jalisco, entre las coordenadas geográficas $19^{\circ}45'40''$ y $19^{\circ}51'55''$ latitud Norte y $104^{\circ}28'29''$ y $104^{\circ}19'58''$ longitud Oeste, Suroeste de Jalisco (Mapa 1) (Beltrán, 2005) y es un tributario importante del río Ayuquila.



Mapa 1.- Ubicación de Cuenca El Cangrejo en el municipio de Autlán de Navarro, Jalisco

En el presente estudio la evaluación del estado del ecosistema fluvial se realizó en tres tramos de 200 metros cada uno en el río principal de la micro-cuenca El Cangrejo, situados en las cercanías de las tres comunidades principales de la micro-cuenca: Ayutita, La Lima y El Jalocote.

La localidad Ayutita está situada a una altitud de 1020 msnm (Longitud $19^{\circ}48'12''$, Latitud $-104^{\circ}23'00''$) en el municipio de Autlán de Navarro, y cuenta con 343 habitantes y 96 viviendas (INEGI, 2005). La población económicamente activa en la localidad de Ayutita es de 139 (38.94% de la población total) (SEDESOL, 2011).

Mientras que, la localidad de La Lima de los Gómez está situada en el Municipio de Autlán de Navarro y tiene 84 habitantes, se encuentra a 1180 msnm (IIEG, 2014). Con una población alrededor de 84 habitantes y 21 viviendas (SEDESOL, 2011).

Finalmente, la comunidad El Jalocote está situada a 1250 msnm (Longitud $19^{\circ}49'10''$, Latitud $-104^{\circ}25'$). El Jalocote tiene 201 habitantes y 54 viviendas (INEGI, 2005).

MÉTODOS

La caracterización de la micro-cuenca El Cangrejo se realizó a partir de la delimitación y caracterización hidrológica y geomorfológica, usando las herramientas del sistema de información geográfica (SIG) con el programa Quantum GIS e información cartográfica de capas de edafología, curvas de nivel, escurrimientos y geología, a partir de los cuales se generaron los mapas de ubicación, modelo digital de elevación, red fluvial y perfil longitudinal.

Para evaluar la calidad de las riberas se aplicó el índice de calidad de riberas RQI (Riparian Quality Index) (González del Tánago y García de Jalón, 2011), en los tramos seleccionados. Evaluando los dos márgenes de riberas de cada tramo de 200 metros de longitud. Con este índice se valora la estructura y dinámica de las franjas ribereñas con base hidrológica y geomorfológica, y ayuda a identificar los problemas existentes para formular estrategias de gestión para su recuperación y restauración ecológica y valorar con criterios cuantitativos.

En la aplicación del RQI se evaluaron los siguientes atributos: 1- Continuidad longitudinal, 2- Dimensiones del espacio ocupado por vegetación riparia, 3- Composición y estructura de la vegetación ribereña, 4- Condiciones de las orillas, 5- Regeneración natural de la vegetación riparia nativa, 6- Conectividad lateral del cauce con las riberas, y 7- Permeabilidad y grado de alteración del sustrato del lecho del río (González del Tánago y García de Jalón, 2011).

Para obtener una valoración final del estado de las riberas, se suma la puntuación otorgada a cada atributo, en base a los criterios descritos en la hoja de campo del protocolo del RQI. La puntuación total puede oscilar entre >10 y 150 puntos, donde una puntuación >10 puntos representa la condición más alterada y una puntuación entre 130-150 una condición óptima del ecosistema que refleja un muy buen estado de conservación del cauce y ribera, y de todos los atributos evaluados.

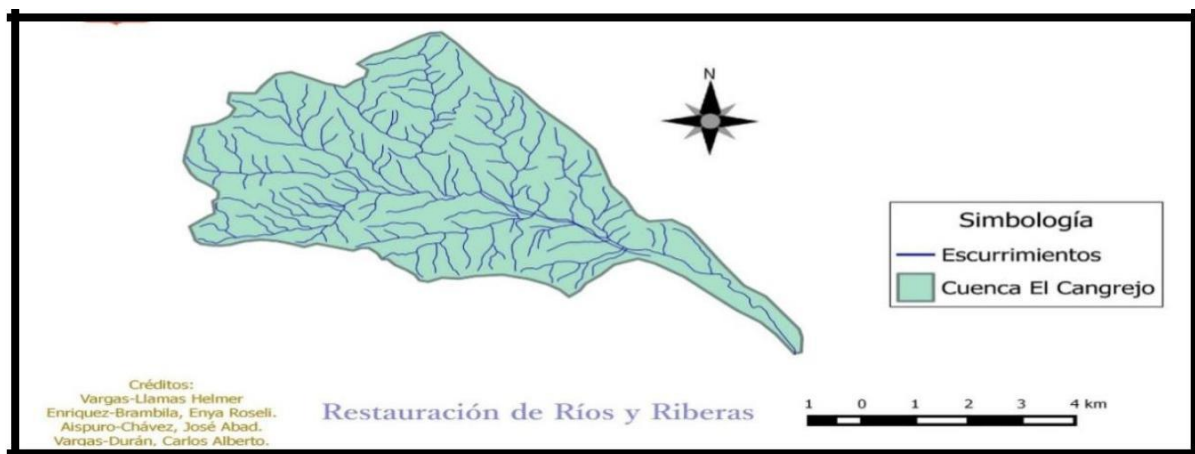
Además, en los tramos de estudio, se realizaron observaciones en campo identificando y contabilizando con ello algunos de los impactos ambientales producidos por el hombre en donde se hizo un registro fotográfico y perfiles transversales de cada tramo.

Para conocer las percepciones de los pobladores, se aplicaron 15 entrevistas semiestructuradas en cada una de las comunidades (Ayutita, La Lima y El Jalocote) con actores clave como amas de casa, agricultores, el delegado (representante de la comunidad) y estudiantes.

RESULTADOS

Caracterización de la micro-cuenca El Cangrejo

El área de la micro-cuenca El Cangrejo es de 41.27 km². La cuenca El Cangrejo se sitúa entre altitudes de 900 a 2100 msnm y tiene una longitud de 12.68 km. La red hidrológica es de tipo dendrítico y de orden cinco (Beltrán-Aldaco, 2005). En el Mapa 2 de hidrología, hay un tramo con una doble línea, esta representa el acueducto para toma de agua dirigida a las comunidades y la zona urbana del municipio.



Mapa 2.- Hidrología de la micro-cuenca El Cangrejo

Los tramos de muestreo se encuentran muy próximos a las tres comunidades, como se muestra en la figura 1, donde se puede observar que la pendiente del río va disminuyendo río abajo, generando algunas diferencias en las condiciones hidrológicas y morfológicas de los tramos de estudio (Tabla 1).

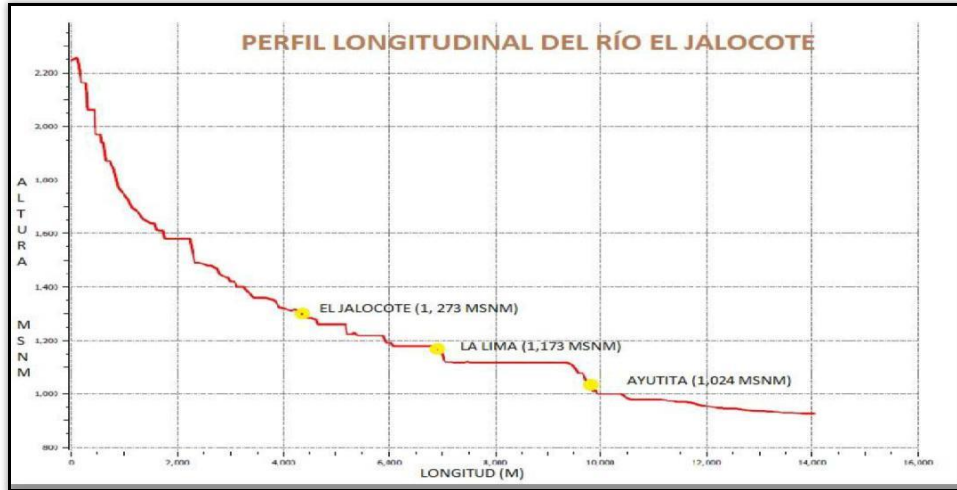


Figura 1.-Perfil longitudinal del río principal de la microcuenca El Cangrejo.

Tabla 1.- Características de los tres tramos de estudio.

Características de cada tramo						
Tramo	Localidad	Coordenadas Punto Inicial	Coordenadas Punto Final	Altitud Máx. (msnm)	Altitud Mín. (msnm)	Pendiente
1	Ayutita	X: 564378 / Y: 2190189	X: 564519 / Y: 2190133	1029	1020	4.5%
2	La Lima	X: 561701 / Y: 2191366	X: 561800 / Y: 2191194	1181	1165	8%
3		X: 560446 /	X: 566560 /	1293		

	Jalocote	Y: 2191816	Y: 2191653		1265	14%
--	----------	------------	------------	--	------	-----

Índice de Calidad de las Riberas (RQI)

Los resultados de la calidad de las riberas, así como cada uno de los parámetros evaluados de cada una de las comunidades se muestran en la tabla 2.

Tabla 2.- Resultados de la valoración de la calidad de las riberas, usando el RQI.

Tramo Atributos	El Jalocote		La Lima		Ayutita	
	Margen Derecho	Margen Izquierdo	Margen Derecho	Margen Izquierdo	Margen Derecho	Margen Izquierdo
1. Dimensiones del espacio con vegetación riparia	5	7	8	5	9	10
2. Continuidad longitudinal y cobertura del corredor ripario.	7	9	5	4	10	11
3. Composición y estructura de la vegetación riparia.	7	10	6	4	10	11
4. Diversidad de edades y regeneración natural.	4		7		10	
5. Condición de las orillas.	7		8		11	
6. Conectividad lateral del cauce con sus riberas.	10		11		12	

7. Calidad del sustrato y conectividad vertical.	11	8	12
Puntuación total	77	66	106
Estado de la Ribera	Moderado (Regular)*	Pobre**	Bueno***
Perfil transversal	Figura 2	Figura 3	Figura 4

***Moderado (Regular):** Muchos de sus atributos están moderadamente afectados. El sistema ripario necesita medidas de restauración que aseguren el correcto funcionamiento hidrológico y ecológico, eliminando o reduciendo presiones e impactos en la mayor medida posible.

****Pobre:** Gran número de los atributos están moderadamente afectados. El sistema ripario necesita medidas de rehabilitación o restauración, para así mejorar y recuperar las funciones hidrológicas y ecológicas. Reducir presiones e impactos lo más posible y diseñar medidas de compensación para mejorar las condiciones ambientales.

*****Bueno:** La mayoría de sus atributos se encuentran en muy buenas condiciones y uno o dos pueden ser alterados. Es necesario aplicar medidas de protección para prevenir nuevos impactos y medidas de restauración para lograr la integridad óptima en las funciones riparias. Eliminar presiones e impactos en la mayor medida posible.

A continuación se muestran los perfiles transversales del cauce y ribera de cada uno de los tramos evaluados en las tres diferentes comunidades, donde es posible observar de forma gráfica las características del cauce y su ribera, incluyendo la vegetación ribereña presente.

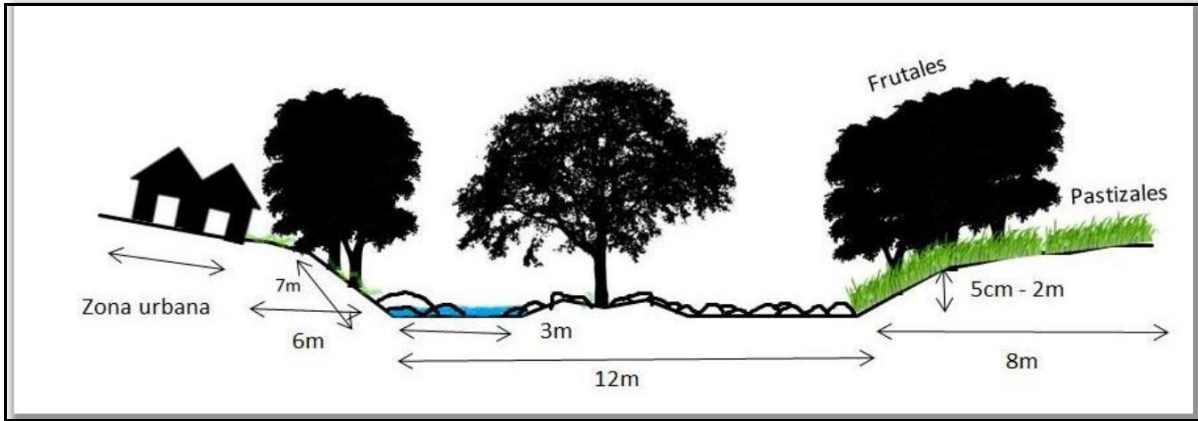


Figura 2.- Perfil transversal del cauce y ribera del tramo 1: Ayutita.

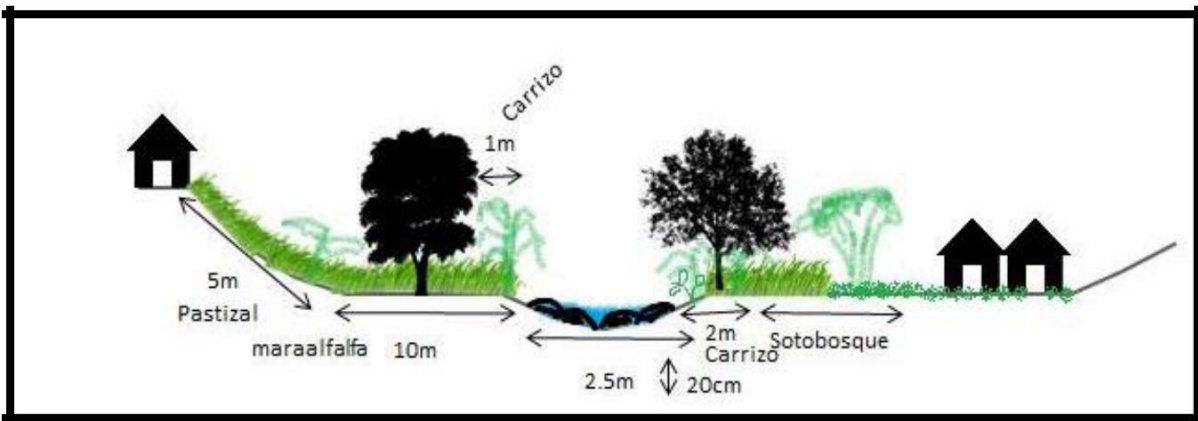


Figura 3.- Perfil transversal del cauce y ribera del tramo 2: La Lima.

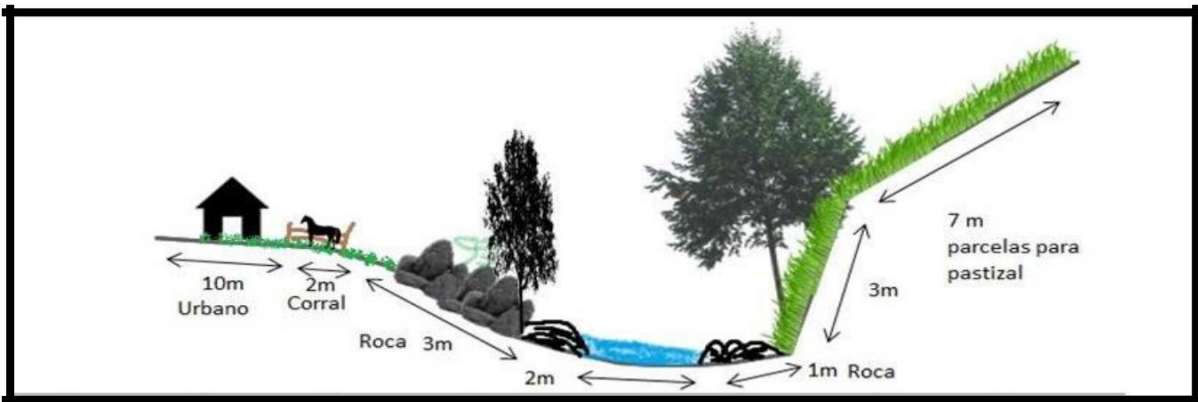


Figura 4.- Perfil transversal del cauce y ribera del tramo 3: El Jalocote.

Impactos en el ecosistema fluvial observados en campo

En el tramo de la comunidad de Ayutita se identificaron tres principales impactos ambientales: basura en el cauce y riberas, especies vegetativas exóticas e invasoras y agroquímicos tóxicos tirados en el cauce (Figura 5).



Figura 5.- Principales impactos ambientales en Ayutita.

En la comunidad de La Lima se presenta un trecho de ecosistema fluvial con cinco impactos ambientales, todo el tramo está cubierto por corrales en las riberas y cercos atravesando el cauce, especies exóticas e invasoras como el carrizo, deforestación, basura y tomas irregulares de agua (Figura 6).



Figura 6.- Principales impactos ambientales en La Lima.

El tramo de ecosistema fluvial de El Jalocote presenta tres impactos ambientales, basura en las riberas y el cauce, vertimiento de aguas grises residuales y corrales para ganado dentro de la ribera (Figura 7).



Figura 7.-Principales impactos ambientales en El Jalocote.

Percepciones sociales del estado ambiental del río

La mayoría de las personas saben que su río es de suma importancia y según su percepción el ecosistema fluvial se encuentra en buen estado (tabla 3).

Los pobladores de las comunidades enlistan impactos ambientales observados por ellos mismos, los cuales son deforestación, vertimientos químicos, erosión, desechos animales, basura, desvío de agua y lienzos en el cauce. Ellos propusieron las siguientes medidas para cuidar y proteger su río y ribera: no tirar basura, campañas de recolección de basura, reforestación, concientizar, no cortar árboles, poner letreros y vigilancia.

Es importante indicar que el resultado del RQI es diferente para las tres comunidades, el estado es bueno en Ayutita, pobre en La Lima y regular en El Jalocote. En cuanto a la percepción de los entrevistados sobre buena calidad del río, los porcentajes van desde 50, 70 y 80%. Finalmente, en el número de impactos observados en campo, la comunidad de La Lima es en donde se observó un mayor número de impactos.

Tabla 3.-Percepción de la calidad del río

	RQI	PERCEPCIÓN DE LA CALIDAD DEL RÍO EN LAS COMUNIDADES	IMPACTOS OBSERVADOS
AYUTITA	BUENO	70% menciona buen estado	Deforestación, especies exóticas y basura.
LA LIMA	POBRE	80% menciona buen estado	Deforestación, especies exóticas, basura, desvío de agua y lienzos en el

			río.
JALOCOTE	REGULAR	50% menciona buen estado	Vertimiento de aguas grises, basura y lienzos en el río.

Los resultados obtenidos en la aplicación del RQI (Índice de Calidad de Riberas), contrario a lo esperado y a las observaciones hechas a lo largo de cada uno de los tramos, el mejor resultado del RQI se obtuvo en la comunidad de Ayutita en comparación de las otras comunidades, aún cuando es el tramo localizado en la parte más baja de la micro-cuenca, y tiene una población y número de viviendas mayor que la comunidad de La Lima con menor población.

Al analizar la alteración de los cauces y ríos en la microcuenca, es posible deducir de manera general que la ocupación de la zona de ribera por casas es uno de los principales problemas y difícil de solucionar en el corto plazo. Por lo que, los esfuerzos de recuperación podrían ser más efectivos en recuperar la conectividad longitudinal del corredor ripario en la zona.

En general, los resultados arrojados por el método del RQI en cuanto a vegetación riparia, mostraron un estado de degradación considerable en los tres tramos observados. Resultados similares fueron obtenidos por Brito *et al.* (2014), en la parte alta del tramo de su estudio. El valor del estado general del río y la ribera que más se asemeja al trabajo de Brito *et al.* (2014), fue el de la comunidad de Ayutita (parte baja del muestreo) con 106 puntos (bueno), contra 102 (bueno), contrario a lo que se esperaba, ya que se especuló en el presente trabajo que a mayor altura en la cuenca mejores condiciones se encontrarían.

En cuanto a la percepción de los entrevistados en las tres comunidades, estos coinciden en varios puntos, especialmente en la importancia que el arroyo representa para todos y en los beneficios que obtienen, sobre todo el agua, que se usa para el riego de plantas en las casas, para el ganado, para regar los sembradíos y para el uso doméstico en general. Además, la mayoría considera que el cuidado del río, el agua y la vegetación riparia es importante, aunque los resultados del RQI demostraron lo contrario, ya que tanto en el agua como las orillas del cauce y la vegetación, no están en las mejores condiciones ni con el mejor manejo.

Finalmente, todos los encuestados coincidieron en que están dispuestos a participar y hacer su parte para que el río como las zonas aledañas (riberas), se mantengan libres de basura y contaminantes en general. Así como para que se recuperen especies de flora que se ven poco o ya no se encuentran, las cuales atraían una diversidad de fauna asociada a ésta.

Las propuestas de las comunidades para la mejora de las condiciones del río y sus riberas han sido tomadas en cuenta para plantear acciones de restauración (conservación y protección) del ecosistema fluvial en estas comunidades. Así como los resultados del trabajo de Brito *et al.* (2014) realizados en esta microcuenca y un enfoque similar.

Por lo tanto, se proponen como medidas de restauración del río y sus riberas las siguientes acciones: a) implementación de curso talleres de educación ambiental y b) acciones participativas de restauración. A partir de las siguientes actividades: 1. Curso-taller sobre la importancia del río y sus riberas y buen uso del agua, a través de charlas, material didáctico y material audiovisual. 2. Actividades participativas con los habitantes de la comunidad, como reforestación y limpieza de los cauces de los ríos de basura y vegetación exótica. 3. Establecer un grupo de vigilancia y monitoreo comunitario para el río y zona de ribera. 4. Talleres sobre el uso de sus recursos como plantas medicinales de la vegetación ribereña y otros tipos de vegetación presentes alrededor de sus comunidades y elaboración de productos (medicinales y cosméticos), devolviéndole a la comunidad la capacidad de elaborar sus propios productos de sus recursos en el ambiente.

Este conjunto de propuestas se debe llevar a cabo vinculando acuerdos entre las autoridades de las comunidades, habitantes, el gobierno municipal y la universidad, para que se le dé el seguimiento correspondiente y que haya un programa de monitoreo, el cual evalúe el desarrollo y progreso de las acciones aplicadas. Esta primera fase de diagnóstico socioambiental ha sido fundamental para movernos a la siguiente etapa de implementación de acciones del proyecto.

CONCLUSIONES

El estado de las riberas según el RQI fueron de pobre a buen estado (La Lima, El Jalocote y Ayutita, respectivamente), siendo los atributos de 1) dimensiones del espacio con vegetación riparia, 2) continuidad longitudinal y cobertura del corredor ripario, y 3) composición y estructura de la vegetación riparia los más alterados. Los principales impactos ambientales observados fueron basura en las riberas y el cauce, vertimiento de aguas grises residuales, lienzos atravesando el cauce, presencia de especies exóticas e invasoras, deforestación y basura tanto en el cauce como en la ribera. En la percepción de las personas el estado de los tramos Ayutita, La Lima y El Jalocote lo perciben como bueno.

Los métodos utilizados se complementan para obtener una mejor imagen de la calidad del ecosistema fluvial y reconocer las problemáticas en el río de las comunidades. Entre más impactos encontrados más decrece el valor del RQI. Con las percepciones se identifica una

falta de monitoreo y una desvalorización de los efectos de sus impactos al ambiente, sin embargo reconocen la importancia del río para su subsistir, y creen necesario recuperarlo.

Por lo que, es necesario planificar reuniones y talleres con los pobladores en espacios claves para dar a conocer los resultados y planificar conjuntamente un programa de acciones para la recuperación de los atributos más dañados del ecosistema fluvial en la microcuenca del río El Cangrejo, y promover la revalorización de la importancia del río y sus riberas en el aporte de beneficios ambientales y sociales, a través de la comunicación ambiental.

Los ecosistemas fluviales garantizan la estabilidad de bienes y servicios en nuestro entorno, por lo que es necesario valorizarlos y cuidarlos, siendo responsables de nuestras acciones, e invirtiendo en un mejor manejo de los recursos naturales para abonar al mantenimiento de la dinámica adecuada de estos ecosistemas.

AGRADECIMIENTOS

A Helmer Vargas y Carlos Durán por su colaboración en este trabajo. Así como a la Dra. Claudia Ortiz-Arrona por la supervisión de este proyecto, que se desarrolló durante el curso de Restauración de Ríos y Riberas, en la carrera de Ingeniero en Recursos Naturales y Agropecuarios (IRNA) del CUCSur.

BIBLIOGRAFÍA

Brito, G., Flores, C., Hernández, O., Mancilla, R. (2014). Riqueza de avifauna asociada a las condiciones de las riberas en la microcuenca El Cangrejo, Autlán, Jalisco. Memorias del IV Congreso Internacional de Ciencia y Arte del Paisaje, p. 383-403.

Beltrán, R. (2005). Impacto del cambio de uso de suelo sobre el hábitat de fauna y flora silvestre en la cuenca del arroyo El Cangrejo, Mpio. De Autlán de Navarro Jalisco. Tesis. Universidad de Guadalajara. México.

González del Tánago, M. y D. García de Jalón (2011). Riparian Quality Index (RQI): A methodology for characterizing and assessing the environmental conditions of riparian zones. *Limnetica*, 30 (2): 235-254.

INEGI (2005). II Censo de Población y Vivienda 2005, en base a los habitantes en las viviendas particulares habitadas. Revisado en abril de 2015. (En línea). Disponible en: <http://www.inegi.org.mx/est/contenidos/Proyectos/ccpv/default.aspx>

IEEG, Instituto de Información Estadístico y Geográfico (2014). Revisado el 24 de abril de 2015. (En línea), Disponible en: <http://www.ieeg.gob.mx/>

Mejía, M. (2005). Análisis de la calidad del agua para consumo humano y percepción local de las tecnologías apropiadas para su desinfección a escala domiciliaria, en la microcuenca El Limón, San Jerónimo, Honduras. Programa de educación para el desarrollo y la conservación escuela de posgrado. Centro agronómico tropical de investigación y enseñanza. Costa rica.

Meli, P. y Carrasco-Carballido, V. (2011). Restauración ecológica de riberas. Manual para la recuperación de la vegetación ribereña en arroyos de la Selva Lacandona. Colección Corredor Biológico Mesoamericano México. Comisión Nacional para el Conocimiento y Uso de la Biodiversidad. México.

Postel , S. y Richter B. (2010). Ríos para toda la vida. La gestión del agua para las personas y la naturaleza. INE/The Nature Conservancy, 284p.

Reche, I. (2003). Sensibilidad de los ecosistemas acuáticos a la radiación ultravioleta: el papel de la materia orgánica disuelta. Ecosistemas, XII (1) 1-11.

SEDESOL (2010). Revisado en abril de 2015. (En línea), Disponible en: Catálogo de localidades:<http://www.microrregiones.gob.mx/catloc/LocdeMun.aspx?tipo=clave&campo=loc&ent=14&mun=015>

ANÁLISIS HIDRÁULICO Y JUSTIFICACIÓN DE USO DE LA BOMBA DE GOLPE DE ARIETE

ANA XÓCHITL VIDRIO SAHAGÚN

*Universidad de Guadalajara, Guadalajara,
México, chishoc@hotmail.com*

RESUMEN:

Actualmente, en México como en el Mundo, las nuevas tecnologías, la generación de energía eléctrica y otras demandas de energía por parte de la sociedad global, en gran medida, requieren de la quema de derivados del petróleo. Tal proceso trae como consecuencia la destrucción de las condiciones saludables del medio ambiente para la vida.

Ante este panorama vale la pena poner la mirada en algunas tecnologías antiguas como posible solución en determinadas aplicaciones. El uso de la Bomba de golpe de Ariete es un ejemplo de máquina en la que se aprovecha la energía potencial hidráulica (la cual es gratuita) y efectos de variación de presión por golpe de ariete para realizar trabajo.

El objetivo es estructurar un procedimiento que permita analizar y evaluar las principales características de funcionamiento de esa máquina hidráulica para suministrar agua de manera sustentable a espacios físicos ubicados a mayor altura que las aguas que corren en arroyos contiguos.

Se hicieron pruebas y medición de parámetros principales; se realizaron cálculos; se incluyen resultados y comentarios del análisis y de las pruebas; también de costos y beneficios. Se muestra una aplicación particular de este proyecto en apoyo a una familia rural.

La teoría cumple estrictamente con la primera ley de la termodinámica y el principio de la conservación de la masa.

La base para el estudio hidráulico del fluido en movimiento es la ecuación de Bernoulli; para la onda de presiones por golpe de ariete es el momentum; y para las pérdidas por fricción la fórmula de Darcy-Weissbach.

El procedimiento para calcular la celeridad y la onda de presiones por golpe de ariete, es de nuestra adaptación.

Este sistema es sustentable y de muy bajo costo; se amortiza en un lapso de 5 años y su vida útil es de alrededor de 15 años. Sus componentes pueden ser adquiridos en los mercados locales ubicados en cualquier ciudad.

KEYWORDS: Golpe de ariete, celeridad, ecología.

ABSTRACT:

Currently, in Mexico and in the world, new technologies, power generation and other energy demanded by global society, largely require the burning of petroleum. This process results in the destruction of healthy environmental conditions for life.

Against this background it is worth us to look to some old technology as a possible solution in certain applications. The use of a ram pump is an example of machine in which the hydraulic potential energy (which is free) and effects of water hammer are used to produce work.

The objective is to structure a process to analyze and evaluate the main operating characteristics of that hydraulic machine to supply water, sustainably, to physical spaces located higher than the waters flowing in adjacent streams.

Proofs and measuring main parameters were made; calculations are performed; results and comments of analysis and testing are included; also costs and benefits. It is shown a particular implementation of this project in support of a rural family.

The base of the hydraulic study of all fluid in motion is the Bernoulli equation and the Darcy-Weissbach formula for friction losses.

The procedure for calculating the swiftness and pressure wave of water hammer, is of our adaptation.

This system is sustainable and very low cost; it is amortized over a period of 5 years and life expectancy is around 15 years. Its components can be purchased in local markets located in any city.

KEYWORDS: Water hammer, swiftness, ecology.

1. Introducción

A través de los años y con el crecimiento demográfico de las poblaciones surge el problema de abastecimiento de agua. El ser humano, gracias a su inteligencia, ha resuelto sus problemas de supervivencia y bienestar.

En 1772 John Whitehurst diseñó y fabricó el primer prototipo de un dispositivo para bombeo de agua llamado *Bomba de Ariete* que no tuvo aceptación entre los potenciales usuarios porque funcionaba manualmente.

En 1796, el inventor francés Joseph Montgolfier diseñó y construyó una bomba de ariete automática que sí tuvo aceptación; pero fue perdiendo preferencias al no poder competir tecnológicamente con otros dispositivos que ofrecían mayores “comodidades” y mejores resultados en el trasiego de agua.

En la actualidad, sabemos que los dispositivos modernos para bombeo utilizan fuentes energéticas que causan contaminación del medio ambiente.

Es posible utilizar agua de escurrimientos superficiales aprovechando su energía potencial gravitatoria (la cual es gratuita y limpia), haciendo uso del fenómeno del golpe de ariete mediante un dispositivo mecánico para elevar una parte del caudal de agua que provee de energía a tal dispositivo, y así abastecer a pequeñas comunidades que se ubican en terrenos de mayor altura topográfica en relación a arroyos contiguos.

El proyecto surge de esta problemática del suministro de agua; es una alternativa para proveer el vital líquido a familias de nuestro país en condiciones geográficas especiales, utilizando la bomba de ariete de tecnología antigua, automática, amigable con el medio ambiente.

Este trabajo toma como caso ejemplo el de una familia campesina que dispone de un terreno de 400 m² en la Agencia El Jalocote, Municipio de Autlán de Navarro, Jalisco. En 100 m² planean tener su casa y corral y en 300 m² desean cultivar hortalizas regando con agua de un arroyo contiguo. No disponen de energía eléctrica.

2. Objetivos.

2.1 Objetivo General

Estructurar un procedimiento que permita evaluar las principales características de funcionamiento de bombas de ariete económicas y sustentables para suministrar agua en espacios físicos a cierta mayor altura que las aguas que corren en cauces de arroyos contiguos.

2.2Objetivos Específicos

2.2.1 Objetivo específico 1.

Evaluar los procesos que ocurren en la conducción de alimentación

2.2.2Objetivo específico 2.

Evaluar los procesos que ocurren en la conducción de descarga

2.2.3Objetivo específico 3.

Evaluar y mostrar resultados de los procesos que ocurren en la bomba de golpe de ariete.

3. Materiales

Se construye y utiliza una bomba de golpe de ariete de 2.54 cm (1”), dispositivo que es objeto de estudio en esta investigación, para resolver el problema planteado.

4. Marco Teórico

4.1 Metodología

Al ser este trabajo un proyecto de investigación tecnológica las explicaciones y fórmulas que se aplican se ciñen estrictamente a la primera ley de la termodinámica y al principio de la conservación de la masa.

4.1.1. Para las conducciones

La base del estudio hidráulico de todo fluido en movimiento es la ecuación de Bernoulli:

$$z_i + \frac{v_i^2}{2g} + \frac{p_i}{\rho g} = z_f + \frac{v_f^2}{2g} + \frac{p_f}{\rho g} + h_{\text{pérdidas}} \tag{1}$$

Las “**hp**” son alturas o cargas de presión, “**hv**” son alturas o cargas de velocidad; las “**z**” son alturas del sistema con respecto a un plano de referencia; la letra “**i**” significa “inicial o entrada” y la letra “**f**” denota “final o salida” de cualquier tramo del sistema hidráulico destinado a conducción del fluido; “**hpérdidas**” son las pérdidas de carga por fricción y cambios de dirección del flujo.

Las pérdidas por fricción del flujo interno en la tubería se evalúan mediante la fórmula de Darcy-Weissbach:

$$\Delta p = f \cdot \frac{L}{D} \cdot \frac{\rho \cdot v^2}{2} \tag{2}$$

en Pascales

$$h = f \cdot \frac{L}{D} \cdot \frac{v^2}{2g} \tag{3}$$

en metros de columna de agua

Para calcular la celeridad y las presiones por golpe de ariete se aplican las fórmulas deducidas en este trabajo; la cuales coinciden aceptablemente con la recomendada por la Comisión Nacional del Agua (CNA).

$$[4] \quad \text{Celeridad en m/s;} = \sqrt{\frac{1}{\frac{1}{K} + \frac{1}{E} + \frac{1}{\rho \cdot a^2}}} \quad \text{Pa}$$

$$[5] \quad = \frac{1}{\frac{1}{K} + \frac{1}{E} + \frac{1}{\rho \cdot a^2}}$$

El cambio en el valor de la presión debido a un cierre rápido de una válvula, depende de las velocidades del flujo y de la onda de presión (celeridad)

$$\Delta = \pm (\pm^2) \text{ Sobrepresión o depresión en Pa} \quad [6]$$

"K" es el módulo de compresibilidad volumétrica y "ρ" es la densidad del fluido; "K_{modificado}" es el módulo de compresibilidad volumétrica para el fluido confinado en la tubería especificada; "E" es el módulo de deformación elástica lineal para sólidos (tubería); "d" el diámetro interno de la tubería y "t" su espesor; "Δp" es la variación de presión (Pa); "ρ" es la densidad del agua(kg/m³); "a" es la celeridad (m/s); "V" es la velocidad de flujo de agua (m/s).

Para evaluar las eficiencias:

$$[7]$$

4.1.2. Sobre el sistema de bombeo por golpe de ariete.

Para su evaluación se utiliza el algoritmo formulado por la autora especialmente para este trabajo.

4.1.3 Sobre el funcionamiento de la bomba.

Sabiendo que los coeficientes de pérdidas de las válvulas pichancha y check varían rápidamente en el primer 10% de la apertura (último 10% del cierre), aquí se consideran aperturas y cierres rápidos; a cada ciclo de funcionamiento de la bomba lo consideramos dividido en CUATRO fases:

Inicia el primer ciclo de la bomba asumiendo como primera fase el *cierre completo y rápido* de la válvula pichancha (O DE AGUA GASTADA (AG)) causado por el empuje del agua que fluye por la conducción de alimentación, proveniente del arroyo-fuente (aguas arriba); el empuje es sobre el disco obturador de la válvula; todo el caudal se descarga en el cauce del mismo arroyo (aguas abajo). Casi instantáneamente, se tiene la *apertura total y rápida* de la válvula de no retorno (NR) a causa de sobrepresión del fluido al producirse el *cierre rápido* de la válvula pichancha.

En la segunda fase luego de que se abrió completamente la válvula de no retorno (NR), fluye el agua por la conducción de descarga subiendo a niveles superiores que el de la bomba misma y el del espejo de agua del arroyo-fuente aguas arriba. Esta agua sube en virtud de la diferencia de la presión ambiente (afuera de la bomba, “después del final de la conducción de descarga”) y de la sobrepresión (adentro de la bomba antes de la válvula NR).

A continuación en la tercera fase la válvula NR *experimenta cierre total y rápido* al disminuir la presión en la cara anterior (que da al interior de la bomba) del disco obturador de dicha válvula y por el empuje que experimenta la cara posterior (que no da al interior de la bomba) de tal disco obturador. Casi instantáneamente *se tiene apertura total y rápida* de la válvula pichancha (AG) debido a que al cerrarse la válvula NR causa disminución de la presión en el tercer cuarto del primer ciclo de la onda por golpe de ariete. Esta apertura de AG se da por la diferencia de la presión ambiente (afuera de la bomba, “después del final de la conducción de alimentación”) y el vacío (adentro de la bomba antes de la válvula AG).

Termina el primer ciclo de la bomba con la cuarta de cuatro fases del primer ciclo de la bomba de ariete estando la válvula AG abierta y saliendo AGUA GASTADA hacia el arroyo. Esta agua gastada fluye por la conducción de alimentación desde la fuente (arroyo aguas arriba) hasta la salida por la válvula AG (arroyo aguas abajo) en virtud de la energía potencial debida a la diferencia de alturas entre el espejo de agua en la fuente arriba y la

salida por la válvula pichancha. Hay empuje de este flujo sobre el disco obturador ayudando a que la válvula AG se cierre.

Los ciclos se repiten, como se describió para el primer ciclo de la bomba.



Figura 1.- Fotografía del sistema de bombeo en una de sus pruebas de funcionamiento.

4 Memoria de Cálculos específicos del problema ejemplo.

A continuación se hacen los cálculos numéricos para el problema que en particular se ha tomado como ejemplo (el caso de la no disponibilidad de “agua a la mano” de una familia campesina de la Delegación El Jalocote, Municipio de Autlán de Navarro, Jalisco).

5.1. Caudal Medio del Arroyo

Para la elaboración de este trabajo me inspiro en un micro arroyo que nace de un ojo de agua, con caudal mayor que el que requiere la familia rural a la que este proyecto atiende.

5.2. Sistema de Bombeo de Agua de escurrimientos superficiales bajos.

Para encontrar los resultados del problema ejemplo, aquí se plantea construir una micro represa para retener el agua del micro escurrimiento. Luego, mediante un dispositivo mecánico (llamado bomba de golpe de ariete), construido por la autora de este proyecto, colocado en un plano 0.60 metros por debajo del espejo de agua del embalse, aprovechar esa altura para llevar agua hasta una pila situada en un plano a 2.5 metros más alta que la bomba y una distancia lineal de 20 metros. Esta agua servirá para el consumo en la casa de la familia campesina y para riego de hortalizas. Ambos, casa y terreno que se ubican a una altura de 1.70 metros más arriba que el cauce del micro escurrimiento aledaño.

Eficiencia total del sistema (p.u.) = 0.112725279

5.3. Conducción de Alimentación (Caudal Gastado)

Con los datos establecidos en el planteamiento del problema, se hace corrida de programa en EXCEL que elaboramos mi asesor y yo, habiendo obtenido los siguientes resultados principales.

Caudal de agua $Q = 35.648996821/\text{min} = 0.594149947 \text{ l/s}$

Pérdidas de presión por fricción $\Delta p = 2452.062229 \text{ Pa}$

Pérdidas de altura de presión por fricción $\frac{\Delta p}{\rho g} = 0.251 \text{ metros}$

Para el golpe de ariete:

La celeridad para tubería de polietileno vale

$$a = 404.8031652 \text{ m/s}$$

Tiempo de viaje de la onda ida y vuelta en L:

$$T = 0.014822018 \text{ s}$$

Sobrepresión:

$$P = 121077.8208 \text{ Pa}$$

$$h = 12.34277368 \text{ m de columna de agua}$$

$$\text{Eficiencia de la conducción (p.u.)} = 0.52388105$$

5.4. Conducción de Descarga y Caudal Elevado.

También con datos y con corrida de programa en EXCEL que elaboramos mi asesor y yo, habiendo obtenido

$$\text{Caudal de agua } q = 0.964450344 \text{ l/min} = 0.0161 \text{ l/s}$$

$$\text{Pérdidas de presión por fricción } \Delta = 277.0278651 \text{ Pa}$$

$$\text{Pérdidas de altura de presión por fricción} = 0.0283 \text{ metros de columna de fluido}$$

$$h_e \rightarrow \Delta h = \Delta$$

[8]

$$h \text{ de presión al inicio} = 2.528305566 \text{ m}$$

$$\text{Presión al inicio} = 24744.61936 \text{ Pa}$$

=

$$\text{Eficiencia de la conducción (p.u.)} = 0.988804531$$

5.5. Bomba de Golpe de Ariete

Nuevamente, también con datos del sistema de bombeo y con corridas de otros programas en EXCEL que elaboré con la guía y colaboración de mi asesor para el cálculo de golpe de ariete y para la bomba de ariete con información reportada en el marco teórico, obtuvimos:

Para celeridad, tiempos, caudales y rendimiento:

La celeridad para tubería de polietileno vale

$$a = 895.5185 \text{ m/s}$$

$$\text{Tiempo de ciclo (s): } t_{\text{ciclo}} = 1.278686663$$

$$\text{Caudal de agua elevada (l/min)} \quad q = 0.964450344$$

$$\text{Caudal de agua gastada (l/min)} \quad Q = 35.64899682$$

$$\text{Rendimiento de la bomba (p.u.)} \quad = 0.085671212$$

De acuerdo a nuestros propios cálculos:

$$\text{Eficiencia de la bomba de ariete (p.u.)} \quad = 0.217609665$$

5.6. Factibilidad Económica

Prácticamente para cualquiera de los individuos a quienes va dirigido este producto les es posible adquirirlo, ya que su costo es muy bajo (el prototipo que aquí se trabaja tiene un costo aproximado de 1447 pesos). Los componentes de la bomba de golpe de ariete son de fácil acceso; están en existencia y pueden ser adquiridos en los mercados locales ubicados en ciudades pequeñas en adelante.

Además, este equipo es sustentable; es amigable con la naturaleza y se amortiza en el corto plazo y por lo tanto factible aún en familias con economía de pobreza.

Por ahorro con base en la tarifa mínima mensual de la CFE para servicio doméstico, el costo del sistema de bombeo se amortizaría en un lapso de 5 años. La vida útil de la bomba de ariete es de alrededor de 15 años.

Este proyecto representa una aportación solidaria para aminorar carencias que impiden la satisfacción de necesidades básicas del ser humano bajo condiciones especiales de ubicación geográfica. Por la sencillez del producto del Proyecto, cualquier persona independientemente de su preparación académica es capaz de operar el equipo.

Tabla 1.- Componentes de la bomba de golpe de ariete, con sus correspondientes especificaciones y precios

Número	Cantidad	Unidad	Nombre Técnico	Especificación	\$ Precio unitario	\$ Sub Total
1	7	Pieza	Nipple galvanizado	Acero 1"x3/2"	15.20	106.4
2	1	Pieza	Pichancha, válv. de choque	Bronce 1"	88.90	88.90
3	2	Pieza	Tuerca Unión Universal	PVC 1"	29.00	58.00
4	2	Pieza	Nipple galvanizado	Acero 1/2"x2"	4.50	9.00
5	1	Pieza	Reducción bushing	Acero 1" x 1/2"	22.90	22.90

6	2	Pieza	Tee Galvanizada	Acero 1"	27.50	55.00
7	1	Pieza	Válvula de esfera	Acero ½"	85.00	85.00
8	2	Pieza	Tuerca Unión Universal	PVC ½"	11.99	23.98
9	2	Pieza	Kit de empaques	"O" rings poliuretano	60.00	120.00
10	1	Pieza	Codo galvanizado	Acero 1" 90°	19.00	19.00
11	3	Pieza	Cinta	Teflón ½"	3.00	9.00
12	1	Pieza	Tubo de pegamento	Cemento para PVC	12.90	12.90
13	1	Pieza	Válvula check	Bronce 1"	240.00	240.00
14	1	Pieza	Válvula esfera	Acero 1"	163.00	163.00
15	1	Pieza	Reducción campana	PVC 1" x ¾"	29.90	29.90
16	1	Pieza	Niple botella	Acero ¾"	15.00	15.00
17	3	Metro	Manguera	Polietileno 1"	30.00	90.00
18	20	Metro	Manguera	Polietileno ½"	10.00	200.00
19	1	Pieza	Acumulador de presión (envase desechable)	Polietileno 1.5 l	0.00	0.00
20	1	Lote	Accesorios (base, tornillería, etc.)	Varias	100.00	100.00
					Total	\$ 1447.98

5.7. Beneficio Neto Aportado por el Proyecto

5.7.1. Agua para usos Doméstico y Agrícola

Respecto del caudal medio mínimo anual de agua elevado para usos doméstico, y agrícola en pequeñas poblaciones rurales, suministrado por concepto de bombeo por golpe de ariete desde microescurrimientos bajos, es deseable que se aproveche la energía potencial del agua del escurrimiento bajo, que está disponible y sin costo.

Al utilizar agua para riego de hortalizas y de algunas otras como las gramíneas que requieran (en promedio diario) solo alrededor de 3 litros/metro cuadrado en riego por goteo con cultivos de ciclos de producción de 4 meses, mediante el uso del producto de este proyecto, familias rurales en condiciones como la del caso “El Jalocote” pueden tener ganancias netas económicas.

Es decir, el Arroyo que se considera en este estudio resulta ser un depósito de la energía que se requiere para aportar agua mediante el uso de bomba de golpe de ariete para toda familia que vive en un ambiente rural en condiciones geográficas como la del ejemplo en El Jalocote.



Figura 4.- Esquema de la ubicación del micro embalse y de la bomba de golpe de ariete en el micro escurrimiento superficial de El Jalocote, Autlán de Navarro, Jal.

5 Resultados

La potencia (tasa de energía) del microescurrimiento superficial bajo, que se aprovecha en El Jalocote para elevar agua en la conducción de descarga: 0.393 W

Energía anual utilizada para vencer la resistencia al flujo y para trasiego de agua elevada trabajando la bomba de ariete continuamente (365 días/año) vale 3.48428367KWh = 12543421.21Joules.

Para el "sistema de bombeo" su eficiencia energética vale 11.273 %

En este Proyecto hemos dividido al sistema de bombeo por golpe de ariete en tres partes: 1) alimentación de agua; 2) bomba de ariete (propriadamente dicha); 3) descarga de agua elevada. En cuanto a eficiencias, el investigador Acitores Martínez encuentra en su trabajo la eficiencia del sistema total; nosotros encontramos la eficiencia de cada una de sus partes.

Tabla 2.- Eficiencias energéticas debidas a las irreversibilidades en el sistema total y en cada una de sus 3 partes expresadas por unidad (p.u.)

EFICIENCIAS EN EL SISTEMA DE BOMBEO		
Conducción de Alimentación	Bomba de Ariete	Conducción de Descarga
0.524	0.218	0.989
EFICIENCIA TOTAL (PRODUCTO DE LAS EFICIENCIAS PARCIALES)		
0.113		

En esta tabla puede observarse que la parte más ineficiente del sistema corresponde a la bomba de golpe de ariete propiamente dicha.

6 Discusión

Los resultados de este proyecto están mostrando la importancia de enfocar los esfuerzos en dotar sustentablemente de agua para varios usos a la población rural de El Jalocote.

Los resultados obtenidos también confirman la pertinencia de la propuesta de este proyecto de aprovechar de manera sustentable la energía verde que la naturaleza pone a nuestra disposición en el micro escurrimiento bajo.

Este trabajo es de suma trascendencia porque toma en cuenta una fuente de energía diferente a las que resultan ser dañinas al medio ambiente.

Este proyecto tendrá continuidad desarrollando investigación de ingeniería mecánica ambiental hasta realizar estudios a mediano plazo, en profundidad y completitud. También para realizar investigación de otros casos relacionados con la temática que aquí se aborda.

7 Conclusiones

Como resultado de experiencias que tuve mientras realizaba este proyecto he aprendido y por lo tanto considero que ha sido para mí una etapa de superación académica y como persona.

Será en beneficio de la humanidad y de la naturaleza la globalización de la práctica para la solución sustentable a problemas similares al del caso ejemplo para suministro de agua a familias rurales y de micro asentamientos humanos ubicados en condiciones geográficas especiales como las que se tratan en este trabajo.

Se están experimentando cambios en la naturaleza como consecuencia de los descuidos que la humanidad ha tenido en su actividad económica. El aprendizaje es que en aprecio de la vida de las futuras y actuales generaciones, debemos aprovechar racional y sustentablemente los recursos naturales.

8 Bibliografía.

1. **Cengel, Yunus A. y Boles, Michael A.** (2007). *Termodinámica*. Ed. McGraw Hill, México.
2. **Giles, Evett y Liu** (2001). *Mecánica de los Fluidos e Hidráulica*. Ed. McGraw Hill, México.
3. **Mott, Robert L.** (2006). *Mecánica de fluidos*. Ed. Pearson, México.
4. Secretaria de Medio Ambiente y Recursos Naturales, consultado en julio de 2014
5. **Vaca Urbina, Gabriel** (2003). *Fundamentos de Ingeniería Económica* (tercera edición). Mc Graw Hill Interamericana Editores S.A. México D.F.
6. **Velasco Belmont, Rosa María** (2009). *Introducción a la elasticidad*. Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Iztapalapa: División de ciencias Básicas e Ingeniería, México.

7. **Vidrio Sahagún, Cuauhtémoc Tonatiuh** (2013). “Diseño optimizado de acueductos sustentables y su impacto ambiental”. *Investigación presentada en MOCINN*, Recife Brasil.
8. http://www.google.com.mx/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&frm=1&source=web&cd=2&ved=0CCIQFjAB&url=http%3A%2F%2Farchivo.uc3m.es%2Fbitstream%2Fhandle%2F10016%2F14685%2FPFC_Fco.Javier_Acitores_Martinez.pdf%3Fsequence%3D1&ei=ITLtU_eBH8T5oAS6-AI&usg=AFQjCNG_-eVkJkovdeYTf8OSUqvvyiPliTrQ&bvm=bv.73231344,d.cGU
9. [http://www.appropedia.org/Hydraulic ram pumps](http://www.appropedia.org/Hydraulic_ram_pumps).
10. http://app1.semarnat.gob.mx/dgeia/informe_resumen/07_agua/cap7.html
11. http://app.cfe.gob.mx/Aplicaciones/CCFE/Tarifas/Tarifas/Tarifas_casa.asp?Tarifa=DACTAR1&anio=2014

ANÁLISIS COMPARATIVO DE CUERPOS DE AGUA PARA ABASTECIMIENTO PÚBLICO SUSTENTABLE

BRENDA PRISILA SAUCEDO RODRÍGUEZ

Universidad de Guadalajara, Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingenierías, Blvd. Marcelino García Barragan#1421, C.P. 44430, Guadalajara, Jalisco, México
prissy491@hotmail.com

RESUMEN:

Tomando como antecedente la iniciativa de aprovechar escurrimientos pluviales para dotar de agua a comunidades con insuficiencia de abasto, me nace la curiosidad de conocer la calidad hídrica (tanto química como biológica) y diseñar un tratamiento sustentable en base a los parámetros aceptados y deseados y así lograr que ésta sea una propuesta satisfactoria y cubra todos los aspectos indispensables para convertirse en una opción real y lista para materializarse. Realizando también una atractiva comparación de calidad en el cual se muestre la sustentabilidad que presentan distintas fuentes de abastecimiento de agua, incluyendo en el análisis: agua de lluvia, aguas subterráneas (bombeada de pozos), y aguas superficiales (escurrimientos pluviales), caracterizando cada uno de ellos. Para ello se seleccionaron puntos de muestreo en los que se determinaron parámetros físicos, químicos y biológicos de las aguas colectadas.

Se elabora un protocolo específico para el análisis de calidad de aguas, tomando en cuenta la Normatividad correspondiente como son: NOM-127-SSA1-1994, NOM-112-SSA1-1994 principalmente.

De manera particular el agua analizada del caso ejemplo de un micro escurrimiento pluvial se caracterizó por ser no carbonatada presentando niveles bajos de dureza, alcalinidad, incluso para sulfatos y cloruros entre otros.

Una vez obtenidos los resultados de éste cuerpo de agua se realizó una comparación con agua de la llave para conocer su similitud en propiedades y finalizar realizando una propuesta de tratamiento sustentable de acuerdo a los resultados del diagnóstico obtenidos en el agua para alcanzar una calidad adecuada y sea distribuida a la población correspondiente.

Palabras clave: *agua, insuficiencia, calidad, sustentabilidad.*

ABSTRACT:

Taking as a precedent the initiative to harness rainwater runoff to supply water to communities with insufficient supply, begins a curiosity about the water quality (both chemical and biological) and sustainable design a treatment based on accepted and desired parameters and achieve that it can be a satisfactory proposal and cover all the essential aspects to become a real option and ready to materialize. Also making an attractive compared in which the quality and sustainability that have different sources of water supply is displayed, including in the analysis: rainwater, groundwater (pumped from wells) and surface water (rainwater runoff), having the characterizing each one. For this, we selected the sampling points, where parameters of the collected waters were determined (physical and biological parameters). Given a specific protocol developed for the analysis of water quality, taking into account the relevant regulations.

Key words: *water, failure, quality, sustainability.*

INTRODUCCIÓN:

En la actualidad el mundo se enfrenta a una crisis severa en lo que se refiere a abastecimiento y disponibilidad de agua potable para consumo de la población mundial y la del futuro ante el inminente crecimiento pronosticado por distintas organizaciones gubernamentales, ONGs y la comunidad científica.

Sin embargo, esta problemática no es precisamente por insuficiencia de agua en existencia en el planeta, sino de la cantidad del vital líquido que es apta para el consumo humano.

Buscar el aprovechamiento de más cuerpos de agua para eliminar la insuficiencia y carencia de abastecimiento mediante tratamientos modernos o mixtos es una necesidad importante a resolver para asegurar uno de los derechos que se ven comprometidos para las siguientes generaciones: el acceso al agua

Conocer la calidad hídrica (física, química y biológica) permite diseñar un tratamiento sustentable basado en los resultados obtenidos y a los parámetros aceptados y deseados, logrando así que se cubran todos los aspectos indispensables para garantizar al consumidor que el tipo de agua captada, alcanzará la calidad indicada en la legislación para su aprovechamiento.

Para determinar si el agua es apta para consumo humano deberá ser sometido a un minucioso control de calidad. Dependiendo del uso que se le dará al agua, estará sujeta a normatividades legalmente reguladas que fijan los parámetros para que sea considerada apta.

Las fuentes de abastecimiento de agua comparadas en el presente serán: agua de lluvia, aguas subterráneas (bombeada de pozos), y aguas superficiales (escurrimientos pluviales), caracterizando cada uno de ellos.

A. Aguas de lluvia

La captación de agua de lluvia se emplea en aquellos casos en los que no es posible obtener aguas superficiales y subterráneas de buena calidad y cuando el régimen de lluvias sea importante dada la ausencia de cal y otros minerales.

B. Aguas superficiales

Las aguas superficiales están constituidas por los ríos, lagos, y arroyos (formados por escurrimientos pluviales) que discurren naturalmente en la superficie terrestre. Estas fuentes no son tan deseables, especialmente si existen zonas habitadas o de pastoreo animal, sin embargo a veces no existe otra fuente alternativa en la comunidad, siendo necesario su utilización.

C. Aguas subterráneas

Parte de la precipitación en la cuenca se infiltra en el suelo hasta la zona de saturación, formando así las aguas subterráneas. La explotación de estas dependerá de las características hidrológicas y de la formación geológica del acuífero. La captación de aguas subterráneas se puede realizar a través de manantiales, galerías filtrantes y pozos (excavados y tubulares).

METODOLOGÍA

1. Muestreo

El control de calidad de las aguas incluye la técnica del muestreo (número de muestras, frecuencia, lugares de muestreo), la conservación de las muestras, la selección de los

parámetros de control, la elección de los métodos analíticos y el control de calidad de los análisis. El muestreo es un paso clave, siendo la primera etapa para la realización de un análisis representativo, éste se rige por ciertas especificaciones y condiciones para que los resultados que se obtengan sean confiables y no haya riesgo de alteración y distorsión de resultados de la muestra.

Según sea el tipo de muestra a analizar, el procedimiento se lleva a cabo de forma específica. Cada muestra se identifica rotulando aspectos como: nombre del muestreador, fecha de la toma, número de muestra, lugar de procedencia y tipo de análisis requerido. Cuanto menor tiempo tarde la realización de las pruebas mayor será la exactitud de resultados.

2.- Análisis Básicos

El realizar una descripción aparente del cuerpo de agua que se estudia nos brinda una idea del porque el escurrimiento pluvial de esta zona puede ser aprovechado como fuente de abastecimiento de agua para la población cercana, siendo respaldado por análisis que corresponden a la determinación precisa de la calidad. El caudal es una función del volumen de agua y el tiempo en el que se desplaza, y que resulta importante por su impacto en la calidad del agua determinando los tipos de organismos que pueden vivir en el arroyo ya que algunos necesitan de corrientes rápidas y otros de pequeñas pozas de agua tranquila.

2.1 Color

El color del agua puede estar representado por la presencia de iones metálicos naturales (Fe y Mn.), de humus y restos vegetales entre otros. Para conocer el color debido a las sustancias disueltas y la materia en suspensión se realizó una examinación llamada "Examen de Color Aparente" el cual se realiza en la muestra de agua sin ser centrifugada ni filtrada, se examina bajo una luz difusa sobre fondo blanco y los resultados de esta prueba se expresaron como tono de coloración del agua siendo cuatro las posibles respuestas: incoloro, claro, pálido y oscuro. La transparencia de una masa natural de agua es un factor decisivo para la calidad.

2.2 Olor

El olor en el agua puede utilizarse de manera subjetiva para describir cualitativamente su calidad; se reconoce como factor que afecta la aceptabilidad del agua, sabiendo que el agua en su forma pura no produce sensaciones olfativas. El olor raramente es indicativo de la presencia de sustancias peligrosas en el agua, pero sí puede indicar la existencia de una elevada actividad biológica. Cuando se percibe un olor, lo caracterizamos con fuentes definidas que lo tipifican, y por esto en análisis de calidad organoléptica de olor lo utilizamos como clasificación. Este análisis se lleva a cabo con el dispositivo supremo para la realización de pruebas de olor que es la nariz humana mediante percepciones sensoriales en la ubicación de los cuerpos de agua.

Tabla 1.-Relación de los principales tipos de olores
(Disponible en anexos)

2.3 Conductividad

La conductividad es la expresión numérica de la capacidad de una solución para permitir el flujo de corriente eléctrica, esta capacidad depende de la presencia de iones y

de sus concentraciones totales, de sus movibilidades, valencia y concentraciones relativas, así como la temperatura.

En el presente estudio la conductividad fue medida con un conductímetro: "MODEL150 de la Marca ORION".

Una vez realizadas las mediciones de la muestra de agua proveniente del micro escurrimiento caso ejemplo se hicieron pruebas al agua de abastecimiento público suministrado al municipio de Jalisco para realizar una comparación.

Tabla 2.- Conductividad en muestras (*Disponible en anexos*)

3. Análisis Volumétricos

El siguiente paso es el análisis de orden volumétrico, que se engloban en los 3 siguientes incisos.

- a) Alcalinidad
- b) Durezas
- c) Cloruros

3.1 Alcalinidad

La alcalinidad de muchas aguas de superficie depende primordialmente de su contenido en Carbonatos (CO_3^{2-}) Bicarbonatos (HCO_3^-) e Hidróxidos (OH^-) que se pueden encontrar solos o asociados con los cationes Na^+ , K^+ , Ca^{+2} y Mg^{+2} por lo que suele tomarse como una indicación del contenido de estos componentes. Debido a la concentración contenida de estos iones, el agua puede tener baja alcalinidad y un pH relativamente alto o viceversa.

La medición de la alcalinidad, sirve para fijar los parámetros del tratamiento químico así como para ayudarnos en la interpretación y el control de los procesos de tratamiento de aguas limpias y residuales, en los que la alcalinidad del agua no se puede presentar los siguientes casos de alcalinidad:

1. Presencia de CO_3^{2-} y OH^- en el agua.

2. Presencia de HCO_3^- .

3. Presencia de CO_3^{2-} .

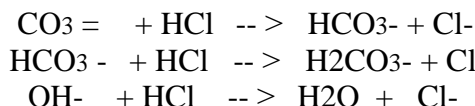
4. Presencia de OH^- .

5. Presencia de OH^- .

3.1.1 Método de titulación (Método de doble indicador)

El método utilizado para determinar el contenido de alcalinidad en la muestra de agua es llamado "Método del Doble Indicador" que consiste en valorar una muestra con una solución de ácido en presencia de dos indicadores, fenolftaleína y anaranjado de metilo. Para determinar cuál es el caso de alcalinidad presente en la muestra de agua la muestra se valora con una solución de ácido fuerte (HCl), los puntos finales determinados visualmente mediante indicadores adecuados, son los puntos de equivalencia seleccionados para la determinación de los tres componentes fundamentales.

Las reacciones base que suceden en esta doble titulación son:



Para determinar la alcalinidad del agua debido a cada una de las especies se realiza una relación entre la cantidad en ml de ácido (HCl) necesario para titular la muestra hasta el cambio de color en presencia de un indicador.

F = mililitros utilizados de indicador Fenolftaleína.

$$F = \frac{1}{2} \text{CO}_3 + \text{OH}$$

M = mililitros utilizados de indicador Anaranjado de Metilo.

$$M = \frac{1}{2} \text{CO}_3 + \text{HCO}_3$$

Tabla 3.- Sustitución de ecuaciones

(Disponible en anexos)

Tabla 4.- Tipos de alcalinidad posible

Resultado de la titulación	HCO ₃ ⁻	CO ₃ ⁼	OH ⁻
$F > M$	0	2M	F-M
$F < M$	M-F	2F	0
$F = M$	0	2M ó 2F	0
$F = 0$	M	0	0
$M = 0$	0	0	F

*CLAVE F = ml de HCl gastado al usar fenolftaleína

*CLAVE M = ml de HCl gastado al usar anaranjado de metilo.

3.2 Dureza

De acuerdo con los criterios actuales, la dureza total se define como la suma de las concentraciones de Calcio (Ca⁺⁺) y Magnesio (Mg⁺⁺) ambos expresados como Carbonato de Calcio en partes por millón (ppm de CaCO₃).

Se considera de importancia en nuestro estudio puesto que el agua pretende abastecer para consumo a una población cercana mediante diseños optimizados, y la dureza entra de forma directa en este uso diario, ya que la existencia de determinados cationes disueltos en agua interfieren en la producción de espuma en el uso de jabones debido a la formación de un precipitado insoluble, las aguas más duras requieren mayor uso de jabones para lavados, interfieren en la cocción de legumbres por la formación de pectatos insolubles y favorece la aparición de incrustaciones, daña luego de ser evaporada el funcionamiento de diversos equipos domésticos, entre otras.

La determinación de la dureza total se realizó con un Análisis volumétrico por formación de complejos con EDTA (ácido-etilen-diamino-tetracético) preparado previamente, y utilizando como indicador el negro de eriocromo-T que cambia de color rojo a azul en el punto final de la valoración. A medida que se adiciona EDTA al medio se produce la valoración del Ca²⁺, y una vez agotado aquél se valoraría el Mg²⁺.

La titulación se realizó en un margen de 4-5 min ya que reduce al mínimo la tendencia de precipitar del CaCO₃.

3.3 Cloruros

El ión cloruro se encuentra ampliamente distribuido en el medio ambiente, generalmente en forma de cloruro sódico, potásico o cálcico. Existen varios métodos para su determinación y de ellos, la argentometría es aconsejado para aguas relativamente claras como es el caso de nuestra muestra.

3.3.1 Determinación volumétrica por precipitación- Argentometría.- Método directo o de Mohr.

Consiste en determinar la directamente mediante titulación la presencia de halogenuros (iones Cl⁻) mediante soluciones valoradas de nitrato de plata (AgNO₃) en presencia de cromato de potasio (K₂CrO₄) al 5% como indicador.

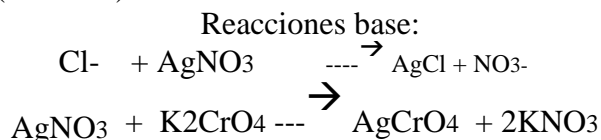


Tabla 5.- Volumen de titulante gastado

Repeticiones	Volumen AgNO ₃
1	.4ml
2	.3ml
3	.3ml

4.4.- Determinación de Sulfatos

Los sulfatos son un componente natural de las aguas superficiales, y por lo general no se encuentra en concentraciones que puedan afectar su calidad aunque un amplio rango de concentraciones se encuentra presente en aguas lluvias.

La remoción de sulfato resulta ser costosa y requiere métodos complicados, por lo cual es preferible elegir fuentes naturales con niveles de sulfato por debajo de los límites aconsejados. La OMS recomienda que en aguas destinadas al consumo humano, el límite permisible no exceda 250 mg/L.

4.4.1 Método Espectrofotométrico.

El ion sulfato precipita en medio ácido con cloruro de bario en medio ácido, formándose un precipitado blanco de sulfato de bario, se requiere de un solvente acondicionador, que contiene glicerina y alcohol, para modificar la viscosidad de la muestra y así permitir que el precipitado de BaSO₄ se mantenga en suspensión, produciendo valores de turbidez estables .

La cantidad de cristales es proporcional a la concentración de sulfatos en la muestra y la absorbancia luminosa de la suspensión, se puede medir espectrofotométricamente a 420 nm, siendo la concentración de SO₄(²⁻) determinada respecto a una curva de calibración. (*Preparación de reactivos disponible en anexos*).

Tabla 6.- Diluciones para preparación de curva de calibración

Patrón	ml de solución patrón	Concentración en ppm
A	4ml	10
B	20ml	50
C	40ml	100
D	60ml	150
E	80ml	200
F	100ml	250

Se transfirieron 10 ml de los patrones: A, B, C, D, E, F, a vasos de precipitado de 100 ml. Se adicionó a cada patrón 1ml de solución acondicionadora, y 2ml de SR cloruro de bario y se agitó nuevamente en forma vigorosa.

Leer antes de 5 minutos en espectrofotómetro a 420 nm con celdas de 1 cm de paso óptico.

Tabla 7.- Absorbancias de curva de calibración: Lectura espectrofotométrica a 420 nm (u-v).

Patrón	Concentración en ppm	Absorbancia
A	10	0.029
B	50	0.059
C	100	0.128
D	150	0.138
R	200	0.254
F	250	0.467

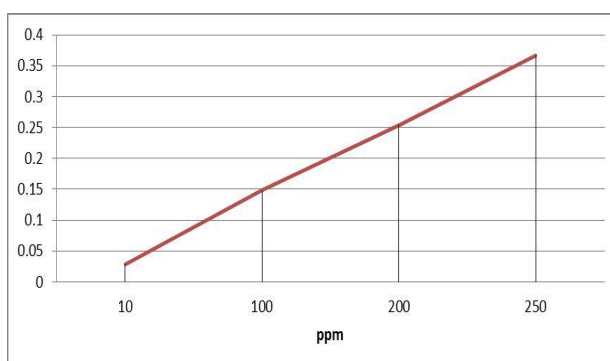


Figura 1.- Curva de Calibración para determinación de sulfatos

5. Análisis microbiológicos

La realización del análisis microbiano debe llevarse a cabo con el mayor cuidado posible. Las normas, generalmente establecen la calidad microbiológica en términos de microorganismos indicadores, éstos se detectan y cuantifican más fácilmente y la presencia en cierto número se considera como una indicación de que la muestra estuvo expuesta a condiciones que pudieron permitir la proliferación de especies patógenas.

El grupo de bacterias coliformes ha sido siempre el principal indicador de calidad de los distintos tipos de agua; el número de coliformes en una muestra se usa como criterio de contaminación y por lo tanto, de calidad sanitaria de la misma.

Los microorganismos coliformes por definición son bacilos Gram negativos, aerobios o anaerobios facultativos, y fermentan la lactosa a 35 °C con la producción de ácido y gas presente en las campanas de fermentación.

El agua para consumo humano debe estar ausente de coliformes tanto totales como fecales, de acuerdo a los parámetros establecidos.

Se utilizó el método establecido para la determinación de coliformes totales en la *NOM-112-SSA-1994, ésta Norma Oficial establece el método microbiológico para estimar el número de coliformes presentes por medio del cálculo del número más probable (NMP) después de la incubación a 35 °C de la muestra diluida en un medio líquido.

Las tablas de NMP se basan en la hipótesis de una distribución de Poisson, estadísticamente válido.

Es preciso estudiar un número suficiente de muestras que permitan alcanzar resultados representativos del lugar en que se ha efectuado la toma.

Las muestras para el análisis microbiológico se deben de conservar a 4°C, con objeto de inhibir la actividad bacteriana para no obtener resultados falsos o dudosos.

(Ver anexos: Material, Preparación y Tabla 8.- Regulación de medios)

Se procede a realizar las etapas del análisis. (Procedimiento puntual disponible en anexos)

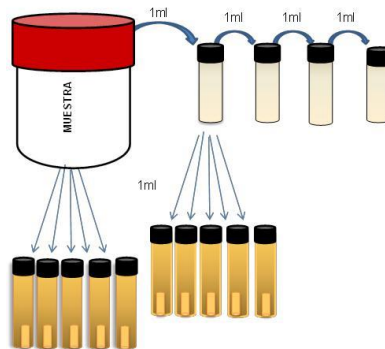


Figura 2.- Esquematización de prueba presuntiva

RESULTADOS

Los resultados obtenidos para la caracterización del color del cuerpo de agua se obtuvieron:

Tabla 9.- Resultados obtenidos de los tres cuerpos de agua

Agua	Incoloro	Pálido	Claro	Obscuro
Lluvia		X		
Superficial	X	-	-	-
Subterránea		X		

Los resultados anteriores muestran que el agua superficial muestreada del escurrimiento pluvial presenta la mayor aceptabilidad a comparación de los otros cuerpos de agua analizados.

Sabiendo que el agua en su forma pura no presenta olor se obtuvieron las siguientes tipificaciones.

Tabla 10.- Tipificación de olor para cada muestra de agua.

Agua	Código
Lluvia	E
Superficial	E
Subterránea	D1

Considerando que presentan olor los tres analizados se debe considera que se debe precisamente al área geográfica que rodea cada uno de los cuerpos de agua analizados, por lo tanto deberá ser un factor corregido a lo largo del proceso de potabilización seleccionado.

Referente a la conductividad eléctrica presente en cada uno de los cuerpos analizados ser obtuvieron los siguientes resultados:

Tabla 11. Resultados de conductividad eléctrica

Muestra	Conductividad eléctrica
Muestra X	210.0 $\mu\text{S/cm}$
Muestra Y	180.9 $\mu\text{S/cm}$
Muestra Z	875.0 $\mu\text{S/cm}$

Muestra X: Agua de lluvia

Muestra Y: Agua superficial (escurrimiento pluvial)

Muestra Z: Agua subterránea:

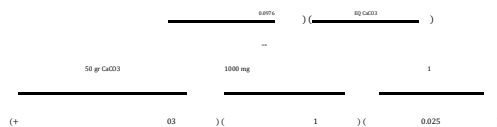
La conductividad es una medida importante de la calidad del agua, ya que indica la cantidad de materia disuelta en la misma por lo tanto el agua proveniente de pozo (aguas subterráneas) de acuerdo al análisis realizado y comparando con valores bibliográficos, es el que presentara de acuerdo a su conductividad mayor cantidad de materia disuelta.

Tabla. 12.- Resultado de Alcalinidad para muestra de agua superficial (escurrimiento pluvial)

Casos de ALCALINIDAD	Alcalinidad por:		
	HCO ₃ ⁻	CO ₃ ⁼	OH ⁻
$F > M$	0	2M	F-M
$F < M$	M-F	2F	0
$F = M$	0	2M ó 2F	0
$F = 0$	M	0	0
$M = 0$	0	0	F

Alcalinidad por HCO₃ expresada en

ppm de CaCO₃ = 0.467(



= **91.09 ppm CaCO₃**

Una vez obtenidos los datos se realizó una comparación entre nuestra muestra de interés, es decir, el agua del arroyo con el agua del sistema potable de abastecimiento de la ciudad de GdJ. utilizando el mismo método de análisis. En ésta atractiva comparación el caso seleccionado en la tabla 15 fue $F < M$

Tabla. 13.- Resultado de Alcalinidad para muestra de agua potable

Casos de ALCALINIDAD	Alcalinidad por:		
Resultado de la titulación	HCO ₃ ⁻	CO ₃ ⁼	OH ⁻
$F < M$	0	2M	F-M
$F = M$	M-F	2F	0
$F = M$	0	2M ó 2F	0
$F = 0$	M	0	0
$M = 0$	0	0	F

El cual representa que la alcalinidad presente en la muestra de agua del sistema de abastecimiento de Guadalajara, Jalisco está conformada tanto de Carbonatos (CO₃=) como por Bicarbonatos (HCO₃-)

Se utilizan los datos de la segunda y tercera titulación por ser iguales y se desprecia la primera titulación ya que representa un error significativo de .2ml en los resultados.

Alcalinidad por HCO₃- expresados como CaCO₃:

M-F (2.7ml – 0.4ml) = 2.3ml de ácido gastado.

$$= 2.3 \left(\frac{0.0976}{1000} \right) \left(\frac{\text{EQ CaCO}_3}{1} \right)$$

= 448.96 ppm de CaCO₃

Alcalinidad por CO₃ = expresada en CaCO₃

2F = 2(0.4ml) = 0.8ml de ácido gastado

$$\text{ppm de CaCO}_3 = 0.8 \left(\frac{0.0976}{1000} \right) \left(\frac{\text{EQ CaCO}_3}{1} \right)$$

= 156.16 ppm de CaCO₃

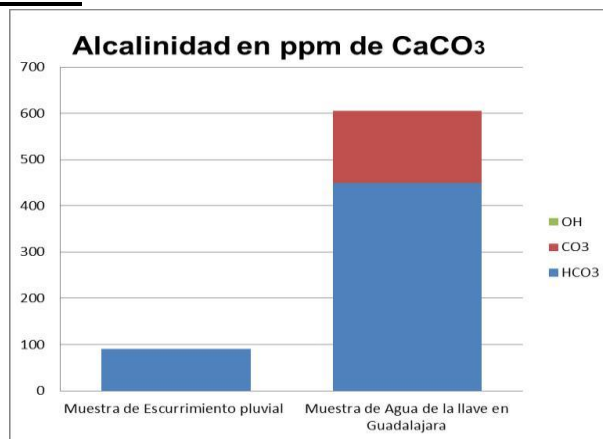


Figura 3.- Gráfico comparativo de alcalinidad en cuerpos de agua.

Aguas que resulten con una alcalinidad alta, presentaran una resistencia a los procesos de coagulación y floculación en el proceso de tratamiento ya que alta presencia de éstos iones tendrán una resistencia a los químicos agregados en los pasos mencionados anteriormente durante el proceso de potabilización. En éste caso el agua evaluada del caso ejemplo procedente a un escurrimiento pluvial presenta una alcalinidad mínima

comparada con agua normalmente presente el sistema de abastecimiento público, lo cual indica que no presentará una resistencia a los químicos agregados para éste paso. En el caso de determinación de sulfatos presentes en los cuerpos de agua los resultados fueron los siguientes.

Tabla 14.- Resultados de sulfatos en muestras de agua.

Muestra	Absorbancia a 420 nm
X	0.237
Y	0.034
Z	0.129

El sulfato (SO_4) se encuentra en casi todas las aguas naturales. La mayor parte de los compuestos sulfatados se originan a partir de la oxidación de las menas de sulfato, la presencia de esquistos, y la existencia de residuos industriales. El sulfato es uno de los principales constituyentes disueltos de la lluvia.

El nivel máximo de sulfato sugerido por la organización Mundial de la Salud (OMS) para la Calidad del Agua 250 mg/l de sulfato en el agua destinada al consumo humano. Algunos de los problemas ocasionados por aguas con concentraciones altas de sulfatos son: si el sulfato en el agua supera los 250 mg/l, un sabor amargo o medicinal puede hacer que sea desagradable beber esa agua.

Los altos niveles de sulfato pueden también corroer tuberías, particularmente las de cobre. En áreas con altos niveles de sulfato, normalmente se utilizan materiales más resistentes a la corrosión para las tuberías, tales como tubos de plástico. En nuestro estudio el agua de lluvia obtuvo un valor alto a comparación de las otras fuentes de agua analizadas, lo cual indica que puede el que con mayor facilidad pueda ocasionar los problemas anteriormente mencionados.

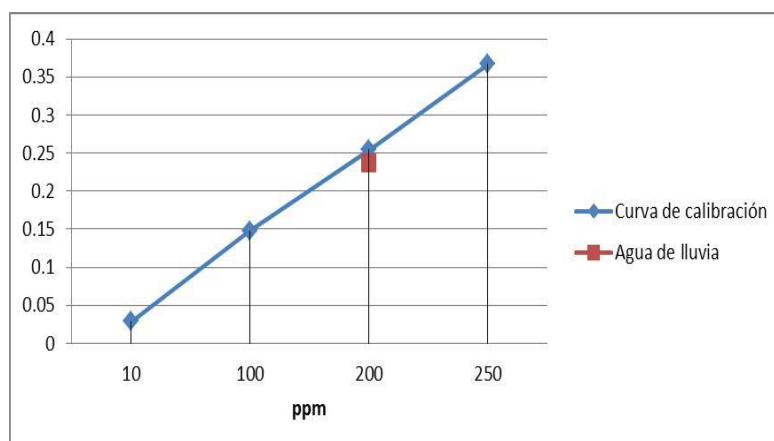


Figura 4.- Cantidad de sulfatos presente en muestra de agua de lluvia.

En comparación con los resultados obtenidos en otra agua analizada, de acuerdo a estos resultados la prueba nos brinda la suficiente información para confirmar que la presencia de sulfatos en las muestras de agua tomadas escurrimiento pluvial contiene cantidades por debajo del límite permitido, es decir, contienen menos de 250 ppm de $(\text{SO}_4)_2$. Cabe mencionar que la presencia de sulfatos en estas muestras es mínima ya que se encuentran entre las 10 a 50 ppm de $(\text{SO}_4)_2$.

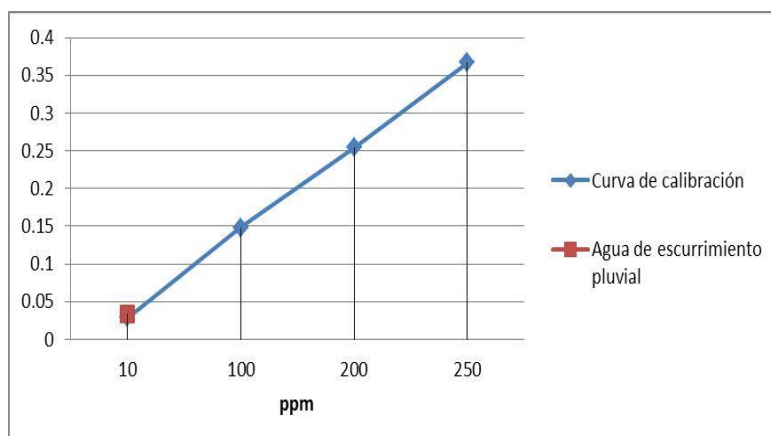


Figura 5.- Cantidad de sulfatos presente en muestra de agua de lluvia.

Considerándose agua favorable para el uso que se le quiere dar, ya que no se consideran cantidades que puedan afectar su calidad o cantidades que necesiten ser removidas.

El análisis microbiológico constituye un factor importante en los cuerpos de agua. Los resultados obtenidos para el análisis de calidad en escurrimiento pluvial (el cual es el único análisis microbiológico realizado hasta ahora, confirma la presencia de coliformes totales al resultar positivo en el análisis presuntivo con NMP de 9NMP/100ml ,6 NMP/100ml.

Se considera que los coliformes totales presentes son coliformes ambientales, los cuales al estar presente nos indican la posible contaminación de origen ambiental y fecal (ya que el análisis se realiza en agua), sin embargo para descartar la presencia de microorganismo de origen fecal se realizó un análisis microbiológico para coliformes fecales (CF).

CONCLUSIONES

Las variaciones en los resultados obtenidos están condicionadas por las precipitaciones, el caudal del cuerpo superficial, los usos del suelo y sus modificaciones en zonas cercanas y los focos de contaminación presentes. Cada agua de caracteriza con propiedades que la postulan como conveniente para su tratamiento con fines de abastecimiento público sustentable. Realizando un minucioso análisis de calidad y comparación atractiva entre tres distinto fuentes de agua para abastecimiento y considerando que es necesario conocer las características del agua pre-potable, para poder determinar si tal agua es susceptible de someterla al proceso de tratamiento para hacerla apta para el consumo humano se determina que el agua que presenta las mejores características para ser tratada por sus propiedades pres potables es el agua de superficie correspondiente a un escurrimiento pluvial caso ejemplo.

Se buscaron procesos los cuales puedan producir agua limpia así como su tratamiento con el menor costo posible para que éste pueda representar una fuente de abastecimiento de agua sostenible y una nueva alternativa a las convencionales.

BIBLIOGRAFÍA:

APHA-AWWA-WEF (2005) Standard Methods for the Examination of Water and Wastewater. 21th Edition. New York, 2-27 a 2-29, método 2320

Calvache, M.L., Martín-Rosales, W., López-Chicano, M., Rubio, J.C., González-Ramón, A., Duque, C. Y Cerón, J.C. (2006). En: El agua subterránea en los países mediterráneos. Guía de las excursiones. Aquainmed-06, 285 p.

Clesceri, L. S. Greenberg, A. E. Y A. D. Pato. 1998d. Standard Methods for Examination of Water and Wastewater.

SECRETARÍA DE SALUD, 2000. Modificación a la Norma Oficial Mexicana NOM-127-SSA1-1994. Diario Oficial de la Federación, 22-11-00. México. Primera Sección, pp. 73-79.

ANEXOS

Anexo 1

Tabla 1.- Relación de los principales tipos de olores

Código	Naturaleza.	Descripción
A	Aromático	Especias, alcanfor, clavo, limón.
B	Balsámico	Flores
C	Químico	Cloro
C2	Hidrocarburo	Petróleo
C3	Medicamentoso	Yodo o clorofenol
C4	Azufre	Ácido Sulfhídrico
D	Pescado	Pescado
D1	Desagradable	Gusto pronunciado
E	Terroso	Tierra o arcilla húmeda.

Anexo 2

Tabla 2. Conductividad en muestras

RESULTADOS DE CONDUCTIVIDAD ELÉCTRICA	
MUESTRA	Conductividad eléctrica
Muestra A*	180.0 $\mu\text{S/cm}$
Muestra B*	180.9 $\mu\text{S/cm}$
Muestra C**	975.0 $\mu\text{S/cm}$
Muestra D**	883.0 $\mu\text{S/cm}$

*Las muestras A y B corresponden a agua proveniente del micro escurrimiento.

**Las muestras C y D corresponden a agua proveniente del sistema de abastecimiento de agua potable de la local, Jalisco.

Anexos 3

Tabla 3.- Sustitución de ecuaciones

Fenolftaleína			Anaranjado de metilo			
$F = \frac{1}{2} \text{CO}_3 + \text{OH}$	$F = \frac{1}{2}(2M) + \text{OH}$	$\text{OH} = F - M$	$M = \frac{1}{2} \text{CO}_3 + \text{HCO}_3$	$M = \frac{1}{2} \text{CO}_3$		$\text{CO}_3 = 2M$
$F = \frac{1}{2} \text{CO}_3 + \text{OH}$	$F = \frac{1}{2} \text{CO}_3$	$\text{CO}_3 = 2F$	$M = \frac{1}{2} \text{CO}_3 + \text{HCO}_3$	$M = \frac{1}{2} (2F) + \text{HCO}_3$	$M = F + \text{HCO}_3$	$\text{HCO}_3 = M - F$
$F = \frac{1}{2} \text{CO}_3 + \text{OH}$	$F = \frac{1}{2} \text{CO}_3 + \text{OH}$	$F = 0$	$M = \frac{1}{2} \text{CO}_3 + \text{HCO}_3$	$M = \frac{1}{2} \text{CO}_3 + \text{HCO}_3$		$M = \text{HCO}_3$
$F = \frac{1}{2} \text{CO}_3 + \text{OH}$	$F = \frac{1}{2} \text{CO}_3$	$\text{CO}_3 = 2F$	$M = \frac{1}{2} \text{CO}_3 + \text{HCO}_3$	$M = \frac{1}{2} \text{CO}_3$	$\text{CO}_3 = 2M$	$2F = 2M$ $\text{CO}_3 = 2M$ $F = M$
$F = \frac{1}{2} \text{CO}_3 + \text{OH}$	$F = \frac{1}{2} \text{CO}_3 + \text{OH}$	$F = \text{OH}$	$M = \frac{1}{2} \text{CO}_3 + \text{HCO}_3$	$M = \frac{1}{2} \text{CO}_3 + \text{HCO}_3$		$M = 0$

Anexo 4

Cálculo de volúmenes

(250ppm = 250mg/L = 250 µg/ml)

Tomar 4ml de la solución patrón:

250 ppm solución patrón (4 ml)/(100 ml) = 10 ppm de SO_4^{2-}

Tomar 20ml de la solución patrón:

250 ppm solución patrón (20 ml)/(100 ml) = 50 ppm de SO_4^{2-}

Tomar 40ml de la solución patrón:

250 ppm solución patrón (40 ml)/(100 ml) = 100 ppm de SO_4^{2-}

Tomar 60ml de la solución patrón:

250 ppm solución patrón (60 ml)/(100 ml) = 150 ppm de SO_4^{2-}

Tomar 80ml de la solución patrón:

250 ppm solución patrón (80 ml)/(100 ml) = 50 ppm de SO₄²⁻

Tomar 100ml de la solución patrón:

250 ppm solución patrón (100 ml)/(100 ml) = 50 ppm de SO₄²⁻

Anexo 5

Preparación de reactivos: determinación de Sulfatos.

Solución Patrón: Se pesaron 0.3697 gramos de Na₂SO₄, se disolvieron con agua destilada en un matraz y se aforo a 1 litro, ésta solución es equivalente a una solución patrón de 250 ppm de (SO₄)²⁻

Solución ácida acondicionadora: Se colocaron en un matraz de 1L en el siguiente orden: 30 ml de HCl concentrado, 300 ml de agua destilada, 100ml de alcohol etílico, 75 gramos de NaCl, 50 ml de glicerina.

Solución reactivo de Cloruro de Bario al 5%

Preparación de curva de calibración.

Tomar volúmenes crecientes de la solución patrón de sulfato y completar a volumen en matraz aforado de 100ml con agua destilada para obtener al menos seis concentraciones comprendidas en el intervalo de 0 a 250mg/L.

Anexo 6

Materiales y Preparación de Medios para Análisis microbiológicos.

Se utilizó el siguiente material:

25 tubos para colocar 9ml agua peptonada.

100 tubos de 16x150 para colocar 9 ml de Caldo Lactosado en c/u. 100

tubos de 13x100 para colocar 5 ml de Caldo Verde Brillante Billis.

200 campanas de fermentación (Durham) para colocar en tubos de C.L y en CVBB.

Referente a la preparación de medios, se pesó debidamente cada uno calculando el volumen deseado tomando en cuenta los gramos necesarios para la preparación de 1L.

Agua Peptonada (A.P)

Se necesitan 230 ml

Para preparar 1L es necesario 0.087 gr

Por lo tanto

$$\frac{230 \cdot 0.087}{1000} = 0.020230$$

Caldo Lactosado (C.L)

Se necesitan 920 ml

Para preparar 1L son necesarios 13 gr.

Por lo tanto

$$\frac{13 \cdot 920}{1000} = 11.96 = 12 \text{ gr de C.L. en 920 ml de agua.}$$

Caldo Verde Brillante Billis. (CVBB)

Se necesitan 520 ml

Para Preparar un litro son necesarios 40 gr.

Por lo tanto 40

$$\frac{520}{1000} = 20.80 \quad 520 \quad .$$

Anexo 7**Tabla 7.- Regulación de Medios**

Nombre del medio	pH óptimo	pH medido	Se reguló / No	SI	Gotas	pH final
Caldo Lactosado	6.9 ± 0.2	5-6	X		4	7
Caldo Verde Brillante Bilis	7.2 ± 0.2	7.1		X	-----	7

DINO ECOTEC

ELEONOR GÓMEZ REBOLLEDO ⁽¹⁾

⁽¹⁾ Centro de Física Aplicada y Tecnología Avanzada. Universidad Nacional Autónoma de México, Querétaro, México, eleonor.gomez.rebolledo@gmail.com

RESUMEN:

Dino EcoTec es una propuesta para resolver la necesidad mundial de "Recuperar y conservar el medio ambiente para lograr una mejor calidad de vida", plantea un problema actual de la vida diaria tanto de empresas, instituciones, organizaciones, como de las personas; que es la gestión de residuos orgánicos y su eficiente aprovechamiento para la producción de gas metano. El proyecto se fundamenta teóricamente en la digestión anaerobia de residuos orgánicos y fueron identificadas las variables físicas, químicas y biológicas que afectan de manera significativa a la digestión anaerobia. Con el objetivo de determinar la factibilidad técnica del empleo de biodigestores con sustratos de composición variable provenientes de residuos orgánicos del hogar; se evaluó, mediante la técnica de Diseño de experimentos (DOE), la influencia del ambiente externo y de la proporción de sustrato (residuos-agua), para determinar el proceso más eficiente en la producción de gas metano a partir de desechos orgánicos de cocina. Se encontraron 2 ambientes propicios para la digestión y fueron: en el exterior con sol a 90% de sustrato e interior de una casa a 10% de sustrato. Dino EcoTec fue instrumentado con los sensores necesarios para conocer el valor de las principales variables que afectan el proceso de digestión anaerobia y con ello hacer de la digestión anaerobia, un proceso seguro y confiable. Como trabajo futuro se plantea la necesidad de estudios que aporten información que permita calcular el rendimiento y de ese modo determinar la viabilidad económica de Dino EcoTec.

Palabras clave: digestión anaerobia, biodigestor, residuos orgánicos.

ABSTRACT:

Dino EcoTec is a proposition to solve the global necessity of "Restore and preserve the environment in order to achieve a better quality of life", it presents a contemporary problem in the daily lives of enterprises, institutions and organizations as well as in the lives of people which is the organic waste management and its efficient exploitation for methane gas production. The project is theoretically based in the anaerobic digestion of organic waste and the variables physical, chemical and biological that significantly affect the process, were identified. With the objective of determine the technical feasibility of the implementation of biodigesters of variable substrate composition from organic house waste; using the Design of experiments technique (DOE) there were evaluated the influence of external environment and the substrate's (water-waste) proportion, in order to determine the most efficient process in the production of methane gas. Two favorable environments were founded: in the exterior with sunlight and a substrate of 90% and in the interior of a house at a 10% of substrate. Dino EcoTec was instrumented with the necessary sensors to measure the value of the principal variables that affect the anaerobic digestion process and use that knowledge to make the anaerobic digestion a secure and reliable process. As future work it is acknowledge the necessity of further studies that provide information useful to calculate the performance in order to determine the economic viability of Dino EcoTec

Keywords: Anaerobic digestion, biodigester, organic waste.

1. INTRODUCCIÓN

La situación actual de los residuos sólidos en México es preocupante, ya que el manejo inadecuado de ellos puede tener consecuencias negativas no sólo a nivel local, sino también a nivel regional y global. Por ejemplo, la descomposición de los residuos, particularmente de los orgánicos, genera metano (CH₄), el cual es un gas de efecto invernadero. De igual forma, la quema de residuos al aire libre provoca la emisión de una variedad de sustancias tóxicas, entre las que se encuentran contaminantes orgánicos como las dioxinas, que pueden dispersarse a grandes distancias (Gispert, 2013).

El manejo de los residuos sólidos en México es uno de los principales retos de las zonas urbanas independientemente de su tamaño ya que la gestión para su disposición final es inadecuada e insuficiente. Los residuos que tienen potencial para ser reciclados, se aprovechan en un porcentaje muy bajo y se carece de una infraestructura capaz de satisfacer la óptima disposición final ante la creciente demanda y producción de estos.

Hoy en día, aún se dista mucho de poder hacer realidad el aprovechamiento de los residuos que se generan y aunque hay avances en cuestiones regulatorias y de incentivos, se carece todavía de un marco regulatorio y de política pública que propicie el desarrollo en gran escala de la bioenergía. Por lo cual la Red Mexicana de Bioenergía ha establecido cinco ejes fundamentales (REMBIO, 2011), entre los cuales se encuentran:

- Integrar la producción y el uso sustentable de la bioenergía mediante un enfoque social, económico y ambiental.
- Impulsar el desarrollo de mercados de productos y tecnologías asociados a la bioenergía.
- Fomentar la investigación y el desarrollo tecnológico al apoyar el desarrollo de grupos de investigación en temas clave, el desarrollo de proyectos piloto y demostrativos, entre otras acciones.

De forma paralela y con el objetivo de lograr un medio ambiente más saludable y sustentable, la Agenda Ciudadana de Ciencia Tecnología e Innovación nos plantea la necesidad de desarrollar sistemas más eficientes para el procesamiento de la basura y la disposición final de los desperdicios (Gispert, 2013).

1.1 Planteamiento del problema

En 2009 en el país existían 109 rellenos sanitarios y sitios controlados para disposición de residuos sólidos urbanos, lo cual implica que gran parte de los municipios del país no cuenta con los servicios de limpia adecuados y, por tanto, los residuos no se depositan en espacios apropiados para este fin. Esto ocurre por diversas y complejas razones, entre las que destaca la falta de recursos financieros, humanos y tecnológicos.

Se estima que en el país se generan 94,800 toneladas diarias de residuos sólidos urbanos de los cuales un 53% son orgánicos, 28% potencialmente reciclables y 19% de los residuos no son aprovechables (Gispert, 2013). Se recicla el 3.92% de la parte inorgánica (Ramirez, 2013), por lo que el tratamiento de la orgánica queda fuera.

En los últimos diez años, la generación de residuos sólidos urbanos se ha incrementado un 26%. En el Distrito Federal y en la frontera norte se registran entre 1.4 y 1.1 kilogramos y en la región sur del país menos de un kilogramo de residuos generados por habitante por día (SEMARNAT, 2012).

También se calcula que se recolectan 91% de los residuos generados, de los cuales 68% se envían a rellenos sanitarios y sitios controlados y el resto se deposita en tiraderos a cielo abierto o sitios sin control (Gispert, 2013).

1.2 Marco teórico

1.2.1 Biomasa

La biomasa es la materia que constituye a los seres vivos, sus excretas y sus restos no vivos. La energía obtenida a partir de ella se denomina bioenergía y presenta múltiples ventajas socioeconómicas y ambientales si es utilizada de forma sustentable.

La biomasa es una fuente de energía renovable y actualmente existe una cantidad significativa de tecnologías maduras para su aprovechamiento. A nivel internacional, la bioenergía representa el 10% del consumo total de energía y 77% de las energías renovables y se estima que para el año 2035 podría contribuir con cerca del 25% de la energía requerida en el mundo, de modo que sería una de las principales alternativas para la transición de energías no renovables a renovables (REMBIO, 2011).

La bioenergía en México abastece el 5% del consumo de energía primaria (432 PJ en 2008). Se utiliza principalmente la leña, el bagazo de caña y el carbón vegetal. (REMBIO, 2011) Se cuenta también con una gran cantidad de granjas que generan desechos orgánicos y representan un grave problema de contaminación y salud pública. Dichas granjas han visto una gran oportunidad como fuente de energía, empleando las excretas de los animales para la producción de biogás, el cual puede ser utilizado para generar energía eléctrica y/o térmica mediante sistemas de biodigestión. La gran mayoría de estas granjas han sido impulsadas a adoptar esta tecnología mediante los Bonos de Carbono, que tienen el objetivo de reducir emisiones de Gases de Efecto Invernadero (GEI) (FAO, 2015).

1.2.2 Digestión anaerobia

La biomasa puede ser convertida en energía útil mediante distintas tecnologías, termoquímicas, bioquímicas y físicoquímicas. Entre las bioquímicas se encuentra la digestión anaerobia, la cual consta de una serie de reacciones en las cuales se degrada la materia orgánica con ayuda de microorganismos anaerobios. Las 3 etapas son: Hidrolítica, Acetogénica y Metanogénica (CIDTA, 2005).

El producto de la etapa metanogénica se denomina biogás y está compuesto principalmente por metano (CH_4) en un 50% a 70% y dióxido de carbono (CO_2) en un 25% a 40%. Los efluentes sólidos y líquidos que se generan, pueden ser utilizados como fertilizante orgánico (REMBIO, 2011).

1.3 Objetivo general

Generar y desarrollar tecnología aplicada a la gestión de residuos sólidos orgánicos de la población, que promueva el desarrollo sustentable y permita reducir la contaminación que causan los residuos orgánicos en las calles y el medio ambiente.

1.3.1 Objetivos específicos

- Determinar los parámetros óptimos para producir gas metano a partir de desechos orgánicos en un biodigestor.
- Diseñar y construir un biodigestor para uso doméstico que sea seguro y confiable.

- Evaluar la factibilidad económica y social e identificar los requerimientos para su implementación.

2. DESARROLLO DEL PROYECTO

2.1 Materiales y metodología

Tras el reconocimiento de la necesidad de trabajar en la gestión de la disposición final de los residuos sólidos urbanos, se recopiló información para conceptualizar el diseño de un biodigestor para uso doméstico con los parámetros y características óptimas.

La mayoría de los biodigestores comerciales que hay en el mercado están diseñados para satisfacer a las zonas rurales ya que emplean como sustrato excretas de ganado así como restos agrícolas.

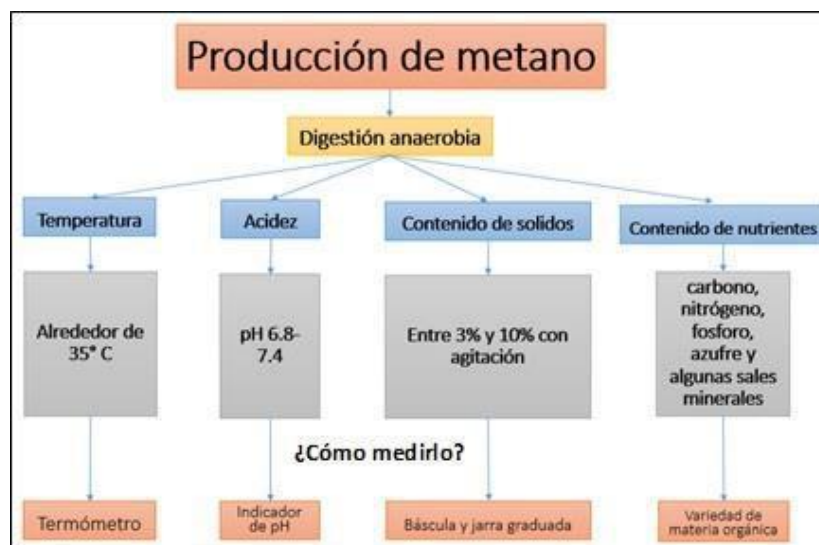
Algunas empresas como Emison, han realizado la experimentación pertinente y han demostrado la factibilidad de producir biogás a partir de desperdicios de verduras, ya que la producción en litros por kilogramo de biomasa seca es equiparable con la producción a partir de excretas de ganado (EMISON, 2015).

El biogás es útil en aplicaciones para los principales usos finales de la energía: calor, electricidad y combustibles (REMBIO, 2011). Una alta proporción de metano en el biogás mejora su rendimiento y ésta depende de la digestión anaerobia. Los parámetros a controlar en este proceso son la temperatura, la acidez, el contenido de sólidos y de nutrientes, los cuáles se medirán mediante los instrumentos que se indican en la Figura 1.

La temperatura es de especial importancia ya que mejora o inhibe a grupos microbianos específicos y determina la rapidez y el grado de avance de la digestión anaerobia (REMBIO, 2011).

Figura 1.- Variables que influyen en la producción de metano en la digestión anaerobia.

Figura 1.- Variables que influyen en la producción de metano en la digestión anaerobia.



La digestión de residuos sólidos municipales o biosólidos requiere de sistemas previos a la digestión anaerobia como la trituración. La tecnología de fermentación en fase seca, se denomina de esta manera porque el contenido de humedad es considerablemente menor que en otros tipos de digestión (REMBIO, 2011).

Existen tablas basadas en experimentaciones y ecuaciones teóricas como la Relación de Symons y Buswell (Symons y Buswell, 1933) con las que es posible estimar la producción aproximada de biogás bajo condiciones determinadas y a partir de un determinado sustrato.

En el presente proyecto se espera un sustrato de composición variable, por lo que se requiere conocer con qué cantidad de sustrato se debe alimentar al biodigestor para obtener una buena producción de biogás ya que se podría optar por hacerlo casi en seco (como la fermentación en fase seca) o lo que se tiene reportado normalmente para la creación de biodigestores en México (10% sustrato aproximadamente). Por lo anterior, se optó por diseñar un experimento que nos permitiera tomar una mejor decisión.

2.1.1 Diseño de experimentos (DOE)

Se partió de la hipótesis de que para obtener una mayor concentración de gas metano en un biodigestor, es mejor tener el biodigestor en el exterior donde pueda darle el sol y la materia orgánica debe ser incluida en una proporción pequeña (proporción en peso de materia orgánica con respecto al agua).

Con el objetivo de estimar los efectos del ambiente y la proporción de materia orgánica en la producción de metano de la digestión anaerobia de residuos orgánicos de cocina; se realizó un experimento cuya variable de respuesta fue la concentración de metano y los factores: el ambiente (exterior con sol, exterior con sombra, interior de una casa) y la concentración de materia orgánica con respecto al agua (10%, 50%, 90%).

Se empleó el software Minitab® 17, útil para apoyarse en el diseño de experimentos y encontrar la configuración que optimice algún proceso utilizando diseños factoriales, de superficie de respuesta, de mezcla y de Taguchi (Minitab, 2015).

Inicialmente, se fermentó aeróbicamente materia orgánica proveniente de residuos de cocina por 15 días para propiciar mejores nutrientes a la digestión anaerobia. El día 16 se licuó el sustrato fermentado con agua y se realizaron 13 minibiodigestores (Figura 2) con las características mostradas en la tabla 1.



Figura 2.- Biodigestores para el DOE.

Para analizar los datos en Minitab® 17, las variables del ambiente se discretizaron de la siguiente forma -1 casa, 0 Afuera con sombra y 1 Afuera con sol.

Tabla 1.- Condiciones de los minibiodigestores para el DOE.

Minibiodigestor	Ambiente	Concentración
1	Casa	50%
2	Afuera con sombra	50%
3	Afuera con sol	10%
4	Afuera con sombra	90%
5	Afuera con sol	50%
6	Afuera con sombra	10%
7	Casa	10%
8	Afuera con sombra	50%
9	Afuera con sol	90%
10	Afuera con sombra	50%
11	Afuera con sombra	50%
12	Afuera con sombra	50%
13	Casa	90%

2.1.2 Dino EcoTec

El biodigestor con el que se está trabajando fue nombrado: Dino EcoTec. Se encuentra en proceso de diseño y se está instrumentando de modo que sea seguro, económico y eficiente.

De acuerdo a los requerimientos estudiados en esta etapa del proyecto, el prototipo de Dino EcoTec (Figura 3) cuenta con:

- Un termómetro digital
- Sistema de agitación magnética
- Medidor de presión (manómetro de agua casero)
- Sensor de pH, humedad e iluminación (comúnmente empleado en jardinería)



Figura 3.- Prototipo de Dino EcoTec.

2.2 Resultados

Se liberó el gas de los minibiodigestores diariamente. Al día 15 se realizó la medición de la concentración de metano. Para la medición, se abrieron los digestores y se midió la cantidad de metano con un sensor MQ4 (Figura 4).

El sensor de gas MQ-4, es un dispositivo semiconductor que cambia su conductividad en función de la cantidad de gas que recibe, para ello posee un circuito interno que funge como divisor de tensión (Hanwei Electronics, 2015).

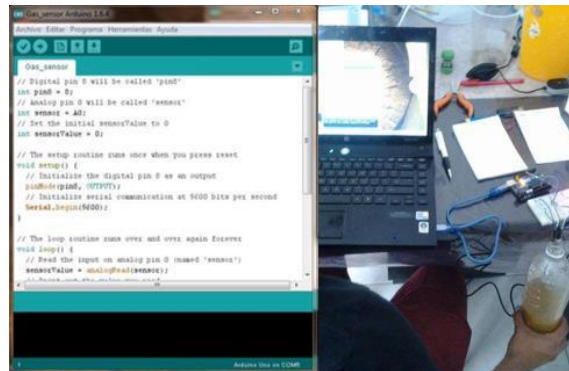


Figura 4.- Medición de concentración de metano con un sensor MQ4 y Arduino.

Se programó una tarjeta “Arduino Uno” y se instrumentó lo necesario para leer los datos del sensor.

El análisis de datos en Minitab® 17 indicó 63% de confiabilidad para este estudio, estimó la significancia de la concentración de sustrato y del ambiente, su relación entre ellos y en la concentración de metano (Figura 5).

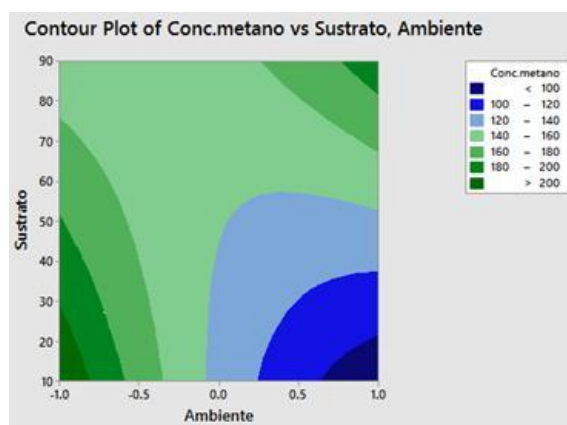


Figura 5.- Gráfica de contorno Concentración de Sustrato vs Ambiente

En la gráfica de contorno (Figura 5) se observa la existencia de dos zonas donde se produce mayor concentración de metano.

La zona inferior izquierda y la superior derecha corresponden a sustrato al 10% adentro de la casa y sustrato al 90% afuera con sol. También se puede observar que la peor combinación es un sustrato al 10% en el sol, ya que produce la menor concentración de metano en el biogás

3. CONCLUSIONES

Dino EcoTec es un biodigestor que se encuentra en etapa de diseño y busca solucionar los problemas generados por la mala gestión de residuos urbanos.

Los resultados del DOE sugieren la posibilidad de adoptar la tecnología de un biodigestor sin importar que la producción de residuos orgánicos en el hogar sea alta o baja, ya que es posible obtener la máxima concentración de metano en el biogás del digestor a altas concentraciones de sustrato en un ambiente exterior con sol y a bajas concentraciones de sustrato en el ambiente que hay dentro de una casa.

3.1 Discusión

En el estudio realizado se detectó la necesidad de trabajar en la etapa de pretratamiento del sistema, es decir, la trituración, ya que sin esto se complica la manipulación de la materia orgánica y puede ser un aspecto limitante para su aceptación social. Es requerido también, un sistema para la extracción de la fase sólida de la digestión, la cual cómo se mencionó puede ser empleada como fertilizante.

Es importante mejorar el sistema de adquisición de datos, aumentar el número de sensores y monitorear de forma continua para poder observar el comportamiento de variables como la temperatura y el pH en la producción de metano y la duración de cada etapa de la digestión anaerobia en cada ambiente.

Dino EcoTec se encuentra en su fase inicial la cual incluye estudios para evaluar la factibilidad técnica, los cuales no requieren solamente comprobar que es posible, por ejemplo, emplearse para una estufa, requieren además proporcionar suficiente información sobre rendimiento para determinar si es económicamente viable.

4. REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

-Centro de Investigación y Desarrollo Tecnológico del agua (2005), Universidad Nacional Abierta y a Distancia, Recuperado el 25 Septiembre 2015 de:

http://datateca.unad.edu.co/contenidos/358039/ContenidoLinea/leccion_18_teor%C3%ADa_de_la_depuracion_biologica.html

-EMISON, Producciones de biogas, Recuperado el 28 Agosto 2015 de: <http://www.emison.com/produccion%20biogas.htm>

-Gispert Ímaz, M. (2013) Agenda Ciudadana de Ciencia, Tecnología e Innovación: Medio ambiente, México, D.F. Recuperado el 10 Agosto 2015 de: http://www.agendaciudadana.mx/pdf/librosblancos/006_Medio_Ambiente.pdf

-Henan Hanwei Electronics Co. Hoja de datos sensor MQ-4. Recuperado el 18 de Septiembre de 2015 de: <https://www.sparkfun.com/datasheets/Sensors/Biometric/MQ-4.pdf>

-Minitab, Página web oficial del software Minitab, Recuperado el 5 de Octubre de 2015 de: <http://www.minitab.com/es-mx/>

-Organización de las Naciones Unidas para la Alimentación y la Agricultura, FAO, Recuperado el 12 Octubre 2015 de: <http://www.fao.org/docrep/019/as417s/as417s.pdf>

-Ramírez Castillo, Ma. Leticia. Residuos sólidos orgánicos ¿estrategia sustentable? (2013) Revista Ciencia y Desarrollo Recuperado el 25 Septiembre 2015 de: <http://www.cyd.conacyt.gob.mx/264/articulos/tratamiento-residuos-solidos-organicos.html>

-Red Mexicana de Bioenergía (2011), La Bioenergía en México, México: Imagia Comunicación.

-Red Mexicana de Bioenergía (2011), Producción de biogas en México, México: Imagia Comunicación.

-SEMARNAT (2012), Residuos, Informe de la situación del Medio ambiente en México, 2012, p. 318.

-Symons, G. E. y Buswell, A. M. (1933) The methane fermentation of carbohydrates, Journal of the American Chemical Society, vol. 55, n° 5, p. 2028–2036.

CAPÍTULO 4

-Ingeniería Civil-

PROPUESTA DE ALGORITMO PARA ANALISIS ESTRUCTURAL (ALGETAB)

JOSÉ JESÚS BAEZA BASTIANI ⁽¹⁾, CARLOS RODRÍGUEZ JIMÉNEZ ⁽²⁾ & LUIS
EDGAR LOPEZ DE LA CRUZ ⁽³⁾

⁽¹⁾ Instituto Tecnológico de Villahermosa, Villahermosa,
México, e-mail pepiux_815@hotmail.com

⁽²⁾ Instituto Tecnológico de Villahermosa, Villahermosa,
México, e-mail cnla6566@hotmail.com

⁽³⁾ Instituto Tecnológico de Villahermosa, Villahermosa,
México, e-mail luisedgar_nike94@hotmail.com

RESUMEN: Una estructura es el armazón que le da forma a un edificio (Esqueleto), lo sostiene, lo fija al suelo y hace que las cargas se transmitan a éste, el análisis de las estructuras idealizadas es útil para obtener un parámetro acerca del comportamiento ante diferentes acciones (cargas), que intervienen a escala real y la respuesta de las estructuras ante ellas, se han creado métodos y modelos matemáticos que se han plasmado en software que agilizan la obtención de estos resultados, pero para muchos, estas herramientas puede convertirse en algo complejo durante la interpretación de datos relevantes. Se propone un algoritmo basado en la teoría de las rigideces y el sistema de ecuaciones lineales, este sistema resultante se resuelve utilizando la teoría matricial con la ayuda de hoja de cálculo comercial. Esta solución es de bajo costo comparada con el software comercial.

Palabras clave: Análisis Estructural, Rigideces, Matrices.

ABSTRACT: A structure is the framework that gives shape to a building (Skeleton) , holds it , sets it down and makes loads are transmitted to it, the analysis of idealized structures is useful for obtaining a parameter about the behavior to different actions (loads) , involved full scale and response of structures to them , have created methods and mathematical models that have resulted in software that expedite obtaining these results , but for many, these tools can become complex during the interpretation of relevant data. based on the theory of rigidities and the system of linear equations it is proposed algorithm , this resulting system is solved using the matrix theory with the help of commercial spreadsheet . This solution is inexpensive compared with commercial software.

Keywords: Structural Analysis Rigidities, Matrices.

1. Introducción

El análisis estructural es el estudio de las estructuras como sistemas discretos. La teoría de las estructuras se basa esencialmente en los fundamentos de la mecánica con los cuales se formulan los distintos elementos estructurales.

Las leyes o reglas que definen el equilibrio y continuidad de una estructura se pueden expresar de distintas maneras, por ejemplo ecuaciones diferenciales parciales de un medio continuo tridimensional, ecuaciones diferenciales ordinarias que definen a una barra o las distintas teorías de vigas, o llanamente ecuaciones algebraicas para una estructura discretizada (Tena, 2007).

2. Justificación

Existe el conocimiento adquirido en las materias del bloque básico para poder resolver por métodos exactos los sistemas de ecuaciones planteadas en la teoría del análisis estructural.

En Villahermosa existe gran actividad en la industria de la construcción por ser la ciudad de mayor crecimiento poblacional en el sureste mexicano y se requiere gran cantidad de cálculos estructurales.

Existen hojas de cálculo para la resolución de sistemas de ecuaciones lineales.

3. Planteamiento del problema

¿Cómo aplicar el conocimiento matemático en el análisis estructural para establecer el comportamiento de elementos estructurales hiperestáticos para “n” niveles?

4. Objetivos

4.1. Objetivo general

Crear una plantilla con la ayuda de una hoja de cálculo para resolver el análisis estructural de marcos.

4.2. Objetivos específicos

- 4.2.1. Evaluación de acciones para un hospital, respecto a los artículos No. 199, 202 y 204 del reglamento de construcción del estado de Tabasco.
- 4.2.2. Utilizar el método de las rigideces para plantear los sistemas de ecuaciones.
- 4.2.3. Aplicar las teorías matemáticas de matrices y cálculo integral.
- 4.2.4. Utilizar como herramienta una hoja de cálculo para la solución de matrices y elaboración de la plantilla.
- 4.2.5. Comparar los resultados con métodos numéricos para análisis estructural como, Kani y software comercial para evaluarlos.

5. Hipótesis

Proponer el uso de las hojas de cálculo, para que los estudiantes apliquen las matrices y el cálculo integral para dar respuesta al comportamiento que pueda sufrir una estructura bajo la acción de cargas externas.

6. Antecedentes

Existen métodos para análisis de estructuras los cuales constituyen la base de la teoría estructural. Método simplificado para el análisis estructural de sistemas muro-marco.

Se propone un procedimiento aproximado de solución para la distribución de cargas horizontales en sistemas estructurales compuestos de muros de cortante y marcos, utilizando una matriz de rigidez simplificada, que puede implantarse de manera sencilla en una hoja de cálculo de la

computadora personal. Se comprueba la exactitud de la propuesta comparando sus resultados con los de otros métodos (Gutierrez, 2009).

Análisis matricial de estructuras por el método de la rigidez

Los métodos clásicos de análisis estructural desarrollado a fines del siglo XIX, tienen las cualidades de la generalidad, simplicidad lógica y elegancia matemática.

Las virtudes del cálculo con computadora radican en la eliminación de la preocupación.

Se pretende representar la realidad y el análisis crítico de los resultados (Tena, 2009).

Método de las deformaciones

Este método se basa en el aumento del grado de hiperestaticidad mediante el agregado de vínculos sobre los nodos de un determinado sistema. Se busca rigidizar la estructura e impedir el eventual giro de los nodos, lográndose un equilibrio distinto del original. De esta manera se cuantifica el momento resultante para cada nodo. Seguidamente se da un giro unitario sobre cada nodo, provocando un par de reacción propio de la estructura. Una vez hallados los momentos resultantes mencionados anteriormente, se resuelve la ecuación de equilibrio (Laera, 2012).

Análisis estático de estructuras por el método matricial

Los métodos de cálculo matricial (CM) de estructuras son un conjunto de métodos que tienen en común organizar toda la información en forma de matrices. En estos métodos, todas las relaciones entre las distintas partes de una estructura dan lugar a un sistema de ecuaciones con un alto número de variables pero donde no se han realizado suposiciones o simplificaciones en las que se pierda información relevante (Blanco, 2012).

7. Marco teórico

La presente información es el conocimiento matemático y teoría estructural necesaria para aplicar la metodología propuesta.

7.1. Introducción a las estructuras

Una estructura consiste en una serie de elementos o partes conectados entre sí, con el fin de soportar una determinada carga, la cual constituye el objeto de su creación y posterior construcción; es decir, una estructura debe cumplir una función específica (Jesús, 2015). Para que la estructura satisfaga cualquier función, se procede a hacer un análisis estructural, dando el comportamiento de la misma, como: esfuerzos, deformaciones, propiedades de vibración y condiciones de estabilidad.

Este método estructural requiere conceptos

matemáticos. **7.2. Matrices**

Una matriz es un arreglo de números reales por filas y columnas tal como:

$$\begin{bmatrix}
 \dots & \dots & \dots & 1 \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
 1 & \vdots & \vdots & \vdots
 \end{bmatrix}$$

En general, la notación de una matriz es:

$$\begin{bmatrix}
 \dots & \dots & \dots & \dots \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \vdots
 \end{bmatrix}$$

Donde la letra “i” denomina la fila y “j” la columna a su vez “m” y “n”.

7.2.1. Multiplicación de una matriz por un número

Si α es un número y $\mathbf{A} = (a_{ij})$, definiremos la nueva matriz:

$$\begin{matrix}
 & \begin{matrix} 1 & 2 & \dots & n \end{matrix} \\
 \begin{matrix} 1 \\ 2 \\ \vdots \\ n \end{matrix} & \begin{bmatrix}
 a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\
 a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\
 \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
 a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn}
 \end{bmatrix}
 \end{matrix}$$

7.2.2. Multiplicación de matrices

Se denomina matriz producto de la matriz $\mathbf{A} = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{m \times n}$ por la matriz $\mathbf{B} = (b_{jk}) \in \mathbb{R}^{n \times p}$ a una matriz $\mathbf{C} = (c_{ik}) \in \mathbb{R}^{m \times p}$ cuyos elementos son de la forma:

$$c_{ik} = \sum_{j=1}^n a_{ij} b_{jk} \quad [2]$$

Dos matrices se pueden multiplicar sólo cuando el número de columna de la primera matriz sea igual al número de filas de la segunda. En ese caso se dice que las matrices son enlazadas.

Matriz inversa

Para proceder a calcular la matriz inversa de cualquier sistema de ecuaciones lineales, se tienen que tomar en cuenta si dicha matriz es singular o invertible como se describe a continuación.

Una matriz identidad cuadrada de $n \times n$ con un "1" en cada posición de la diagonal principal y cero en las otras posiciones se denomina matriz identidad de n y se denota " I_n ".

Si se conoce el tamaño de la matriz identidad, simplemente se escribe " I ".

En el problema $AX=K$. Lo que necesitamos es una matriz A^{-1} , donde $A^{-1}A = I$. Donde encontraremos que $A^{-1} = A^{-1}$. Cuando A es una matriz de $n \times n$, entonces será una matriz

invertible o no singular si existe otra matriz de $n \times n$ tal que $A^{-1}A = I$.

Si A^{-1} existe, se denomina inversa de la matriz A . $A^{-1}A = I = AA^{-1}$. Una matriz singular no tiene inversa.

7.3. Método de las rigideces

La rigidez es aquella fuerza o par, que aparece ante un alargamiento o giro unitario.

En el método de las "rigideces" se requiere subdividir la estructura en una serie de elementos finitos discretos e identificar sus puntos extremos como nodos. Para el análisis de marcos, los elementos finitos se representan mediante cada uno de los elementos que lo componen y los nodos representan las juntas. Se determinan las propiedades de la fuerza- desplazamiento en cada elemento y después se relacionan entre sí usando las ecuaciones de equilibrio de fuerzas escritas en los nodos. Luego estas relaciones, para toda la estructura, se agrupan en lo que se denomina matriz de rigidez de la estructura " K ". Una vez establecido esto, se pueden determinar los desplazamientos desconocidos de los nodos para cualquier carga dada sobre la estructura. Al conocer estos desplazamientos pueden calcularse las fuerzas externas e internas en la estructura utilizando las relaciones de fuerza- desplazamiento para cada elemento.

Antes de desarrollar un algoritmo formal para aplicar el método, es necesario establecer algunas definiciones y conceptos preliminares.

7.3.1. Identificación del elemento y el nodo

Cada elemento estructural se especificará por un número encerrado en un cuadro y para identificar los nodos se usará un número dentro de un círculo. También se identificarán los

extremos “cercano” y “lejano” de cada elemento mediante una flecha indicada a lo largo del elemento.

7.3.2. Coordenadas global y del elemento

Dado que las cargas y los desplazamientos son cantidades vectoriales, es necesario establecer un sistema de coordenadas a fin de precisar el sentido correcto de la dirección. Usaremos dos tipos diferentes de sistemas coordinados. Un sistema de coordenadas de la estructura o global “x”, “y”, el cual es único y sirve para especificar el sentido de las fuerzas externas y desplazamientos actuantes en la estructura. Se empleará un sistema de coordenadas locales o del elemento para especificar el sentido de sus desplazamientos y las cargas internas en el elemento.

7.3.3. Indeterminación cinemática

La estructura en estudio se determina si es isostática o hiperestática mediante la expresión:

$$G.H.E. = G.L. - N.D.N. + N.D.R. \quad [3]$$

$$= 3 \cdot n - 3 \cdot n \quad - \quad + \dots \quad [4]$$

$$= 3 \cdot n - 3 \cdot n \quad + \dots \quad [5]$$

Donde

G.H.E.= Grado de hiperestaticidad total $G.H_e$ = Grado de hiperestaticidad externo $G.H_i$ = Grado de hiperestaticidad interno Si $G.H.E. < 0$
 Es una estructura inestable Si $G.H.E. = 0$
 Es una estructura isostática y estable Si $G.H.E. > 0$

Es una estructura hiperestática.

Se evalúa el grado de indeterminación cinemática de la estructura, que se refiere al número de desplazamientos de un nodo que son necesarias para describir la configuración deformada de una estructura:

$$G.H.E. = G.L. - N.D.N. + N.D.R. \quad [6]$$

En donde

G.L.= Grados de libertad
 N.D.N.= Número de desplazamientos en los nodos
 N.D.R.= Número de desplazamientos restringidos.

8. Diseño metodológico

La presente investigación pretende demostrar que es posible analizar una estructura con el método de las rigideces y el sistema de ecuaciones lineales generado sea resuelto con métodos matemáticos exactos usando la teoría matricial, comparar sus resultados con otros métodos y software comercial.

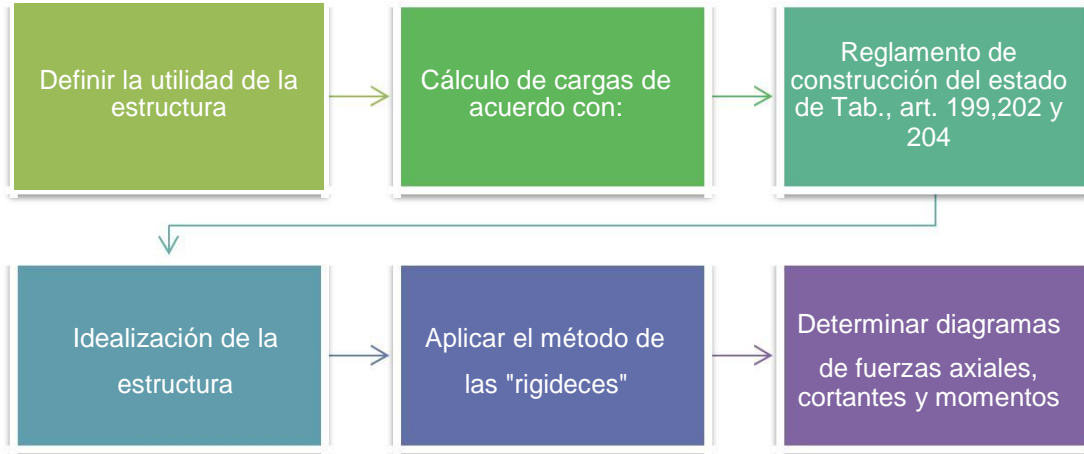


Figura 1.- Pasos para determinar el comportamiento de una estructura. Elaborado por autores.

8.1. Principio de análisis

Para comenzar el análisis, se plantea una estructura idealizada, esto es, dibujar líneas unidimensionales, normalmente coincidentes con los ejes geométricos de los elementos con su determinada carga.

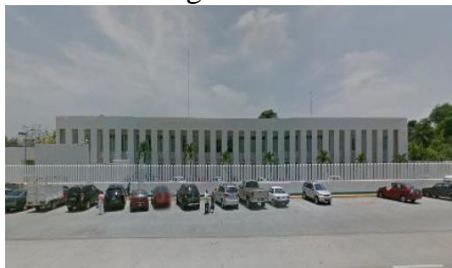


Figura 2.- Estructura real. Fuente: Google Maps.

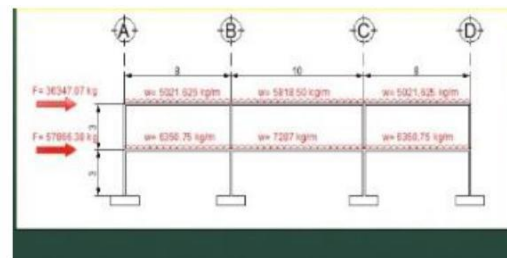


Figura 3.- Estructura idealizada. Elaborado por autores.

8.2. Evaluación de cargas

Una vez determinada la utilidad o el uso de suelo de la obra (Hospital) se procede a evaluar las acciones verticales y horizontales a las que estará sometida la estructura conforme al reglamento de construcción del estado de Tabasco, en donde el artículo 199 estipula los factores de carga. El artículo 202, consideración de carga muerta adicional para pisos de concreto y por último el artículo 204 menciona las cargas vivas unitarias dependiendo el uso de la estructura.

Tabla 1.- Propiedades de los materiales. NTC 2004.

Datos:	
Concreto $f'c=$	250 kg/cm ²
Acero $f_y=$	4,200 kg/cm ²
$f^*c=(f'c \times 0.8)$	200 kg/cm ²
$f''c=(f^*c \times 0.85)$	170 kg/cm ²

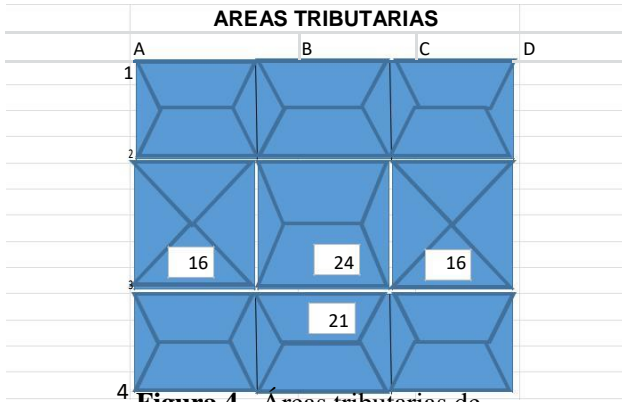


Figura 4.- Áreas tributarias de losa. Elaborado por autores.

Tabla 2.- Peso del área tributaria de losa azotea. Por autores.

PESO DEL AREA TRIBUTARIA		
AZOTEA		
31	45	31
35805	51975	35805
4475.625	5197.5	4475.625

Tabla 3.- Dimensionamiento de trabe. Elaborado por autores.

CALCULO DE LA TRABE		L/16		
altura de trabe (m)	ancho de trabe (m)	PV(kg/m3)	Peso Total	
0.625	0.65	0.325	0.35	2400
				546

Tabla 4.- Cargas gravitacionales. Elaborado por autores.

PESO TOTAL DE LA TRABE	
	AZOTEA
T1:	5021.625 kg/m
T2:	5818.5 kg/m
T3:	5021.625 kg/m

Tabla 5.- Peso del área tributaria de losa de entrepiso. Elaborado por autores.

PESO DEL AREA TRIBUTARIA		
ENTREPISO		
31	45	31
46438	67410	46438
5804.75	6741	5804.75

Tabla 6.- Cargas gravitacionales. Elaborado por autores.

PESO TOTAL DE LA TRABE	
	ENTREPISO
T1:	6350.75 kg/m
T2:	7287 kg/m
T3:	6350.75 kg/m

Tabla 7.- Elementos incluidos en el análisis por sismo. Elaborado por autores.

ANALISIS SISMICO ESTATICO		
ENTREPISO		
SIS. DE LOSA	20*26*990	514800 kg
VOLADO		kg
BALCONES		kg
TRABES	(4*26+4*20)M*0.35*0.65*2400	100464 kg
COLUMNAS	16*0.13*2.35*2400	11339.8928 kg
MUROS	(2*26+2*20)*2.35*48	20755.2 kg
	PESO TOTAL	647359.093 kg

Tabla 8.- Elementos incluidos en el análisis por sismo. Elaborado por autores.

ANALISIS SISMICO ESTATICO		
AZOTEA		
LOSA	20*26*795	413400 kg
VOLADO		kg
LAMINA		kg
POLINES		kg
TRABES	(4*26+4*20)M*0.35*0.65*2400	100464 kg
COLMNAS	16*0.13*2.35*2400	11339.8928 kg
MUROS	(2*26+2*20)*2.35*48	20755.2 kg
TINACO	750	750 kg
	PESO TOTAL	546709.093 kg

Tabla 9.- Cargas preliminares por sismo.
Elaborado por autores.

Nivel	Wi (ton)	Hi (m)	Wi*Hi	Fi (ton)	Vi (ton)
N2	546.709093	6	3280.25456	135.003403	135.003403
N1	647.359093	3	1942.07728	79.9288704	214.932273
Total	1194.06819		5222.33184		

Tabla 10.- Fuerzas actuantes en caso de sismo. Elaborado por autores.

Fuerzas Marco estructural 2 y 3		
F1=	36.34707004	Ton
F2=	57.86638131	Ton

9. Resultados

9.1. Aplicación del método de las rigideces

Para nuestra estructura de (3):

Del cual decimos que:

$6 > 0 \Rightarrow$ Es una estructura hiperestática Para nuestra estructura de (6):

Como se observa, la estructura es hiperestática y tiene veinticuatro grados de libertad, por lo que proponemos el método de las rigideces como solución del comportamiento de la estructura.

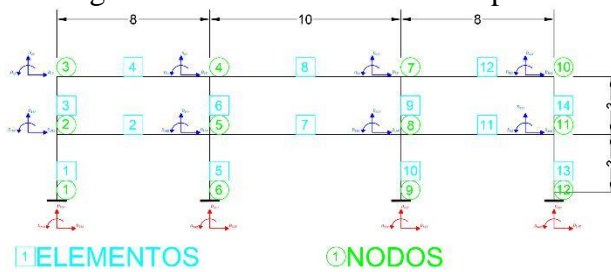


Figura 5.- Grados de libertad de la estructura. Elaborado por autores.

9.2. Cálculo de momentos de empotramiento en los nodos

Calculo de fuerzas y momentos de desequilibrio

Cálculo de momentos de empotramiento en los miembros					
-26.782	26.782	-48.4875	48.4875	-26.782	26.782
	-21.7055		21.7055		
-33.870667	33.870667	-60.725	60.725	-33.870667	33.870667
	-26.85433333		26.85433333		

Figura 6.- Momentos de empotramiento y desequilibrantes. Elaborado por autores.

Tabla 11.- Propiedades geométricas.
Elaborado por autores.



Dimension de los elementos		
COLUMNA		
	$\phi =$	0.4 m
A=	0.12566371 m ²	
I=	0.00125664 m ⁴	
TRABE		
	H=	0.65 m
	B=	0.35 m
A=	0.2275 m ²	
I=	0.0080099 m ⁴	

Tabla 12.- Propiedades geométricas.
Elaborado por autores.

Datos		
Elasticidad	E=	1
Área	A=	0.2275
Longitud	L=	10
	E/L=	0.1
Inercia	I=	0.008

Tabla 13.- Matriz de rigidez para elemento 1 y 3. Elaborado por autores.

Rigidez del elemento 1						
Nx25	Ny26	Nz27	Fx13	Fy14	Fz15	
0.0006	0.0000	-0.0008	-0.0006	0.0000	-0.0008	Nx25
0.0000	0.0419	0.0000	0.0000	-0.0419	0.0000	Ny26
-0.0008	0.0000	0.0017	0.0008	0.0000	0.0008	Nz27
-0.0006	0.0000	0.0008	0.0006	0.0000	0.0008	Fx13
0.0000	-0.0419	0.0000	0.0000	0.0419	0.0000	Fy14
-0.0008	0.0000	0.0008	0.0008	0.0000	0.0017	Fz15
Rigidez del elemento 3						
Nx13	Ny14	Nz15	Fx1	Fy2	Fz3	
0.0006	0.0000	-0.0008	-0.0006	0.0000	-0.0008	Nx13
0.0000	0.0419	0.0000	0.0000	-0.0419	0.0000	Ny14
-0.0008	0.0000	0.0017	0.0008	0.0000	0.0008	Nz15
-0.0006	0.0000	0.0008	0.0006	0.0000	0.0008	Fx1
0.0000	-0.0419	0.0000	0.0000	0.0419	0.0000	Fy2
-0.0008	0.0000	0.0008	0.0008	0.0000	0.0017	Fz3

9.2.1. Determinar los vectores mediante la ecuación matricial

$$P = K \Delta \quad [7]$$

Donde

P= Vector de fuerzas

K= Vector de rigidez

Δ = Vector de desplazamientos y giros

Para determinar las acciones en la estructura, donde el vector de fuerzas:

Tabla 14.- Vector de fuerzas y desplazamientos actuantes en la estructura. Elaborado por autores.

	36347.07 -	Nx1
	20086.52 -	Ny2
	26782.02667	Nz3
	0 -49179.02	Fx4
	-	Fy5
	21705.47333	Fz6
	0 -49179.02	Nx7
	21705.47333	Ny8
	0	Nz9
	-20086.36347.5207 26782-	Fx10
	20086.02667.52 -	Nx1Fy11
	2678257866.02667.38 -	Ny2Fz12
	25403 -33870-	Nz3x13
	49179.66667.02 -	Fx4Ny14
	21705.473330 -618380 -	Fy5Nz15
	26854-49179.33333.02	Fz6x16
		Nx7Fy17
		Ny8Fz18
		Nz9x19
=	21705.473330 -618380	Fx10Ny20
26854-20086.33333.52 26782.02667	R25-33870.66667	Fy11Nz21
57866-25403.38 33870-.6666725403	R26 0	Fz12x2
	RM27 -	Nx13Fy23
	61838	Ny14Fz24
	R28-26854.33333	Nz15x2
	R29 0	Fx16Ny26
	RM30 -	Fy17Nz27
	61838	Fz18Nx28
	R3126854.33333	Nx19y2
	R32 0	Ny20z3
	RM33 -	Nz21x3
	25403	Fx22Ny32
	R3433870.66667	Fy23Nz33
	R253	Fz24Nx34
	R26M36	Nx25y3
	RM27	Ny26z3
	R28	Nz27
	R29	Nx28
	RM30	Ny29
	R31	Nz30
	R32	Nx31
	RM33	Ny32
	R34	Nz33
	R35	Nx34
	RM36	Ny35
		Nz36

Δ=

Tabla 15.- Parte de matriz rigidez (K) de 36x36. Elaborado por autores.

Large matrix table with columns N1 to N24 and rows corresponding to nodes 1 to 24. Contains numerical values for stiffness matrix components.

Tabla 16.- Producto Δ= P*K-1. Elaborado por autores.

Matrix table showing the product of P and K inverse minus one. Columns are N1 to N24, and rows are labeled with node numbers (N1 to N24). Includes some zero values and numerical results.

Tabla 17.- Cálculo de reacciones mediante (7). Elaborado por autores.

Matrix table for calculating reactions. Rows are labeled R25 to R36. Contains numerical values for reaction calculations, with several zero entries.

Tabla 18.- Reacciones en los apoyos de la estructura. Elaborado por autores.

REACCIONES
-19538.528
25806.1027
34107.1416
-22967.868
126014.182
37155.0434
-27446.406
140662.405
41349.7525
-24260.648
48337.0831
38055.881

10. Conclusiones

Para conocer las cargas (acciones) actuantes en la estructura, se recurrió al Reglamento de construcción vigente haciendo uso de los artículos 199, 202 y 204.

Se concluye que la plantilla elaborada en hoja de cálculo satisface el análisis estructural propuesto hasta un indeterminado número de niveles y elementos estructurales, ya que son comportamientos lineales. Para demostrar esto, a continuación se efectúa un comparativo entre el método matricial (rigideces), el software SAP2000 y el método de Kani, para evidenciar que los resultados obtenidos por la propuesta, son confiables.

10.1. Comparación de resultados

Tomando como valor real el obtenido por el software SAP 2000.

Tabla 19.- Resultados obtenidos mediante el método de Kani, Rigideces y el Software SAP2000. Elaborado por autores.

RIGIDEZ	SAP2000	KANI
-19538.528	-19690.87	0
25806.1027	25764.27	0
34107.1416	34494.8	23833.4839
-22967.868	-23401.4	0
126014.182	125341.57	0
37155.0434	37757.24	32440.3639
-27446.406	-26396.71	0
140662.405	112849.52	0
41349.7525	40414.35	39195.6793
-24260.648	-24724.47	0
48337.0831	49057.64	0
38055.881	38661.59	36068.9401

Con las reacciones obtenidas, se procedió a calcular el error porcentual entre el método propuesto (rigideces) y el software SAP2000.

Tabla 20.- Comparativo de resultados obtenidos y sus Errores porcentuales en SAP2000/rigidez y SAP2000/Kani. Elaborado por autores.

ERROR % RIGIDEZ-SAP	ERROR % KANI-SAP
0.7736691	
0.16236714	
1.12381695	30.907024
1.85259024	
0.53662334	
1.59491689	14.0817393
3.97661689	
24.6459932	
2.3145307	3.01544062
1.87596256	
1.46879648	
1.56669436	6.7060096
PROMEDIO= 3.49104816	PROMEDIO= 13.6775534

El error promedio entre la comparación SAP 2000-Kani, fue de un 14%, cabe mencionar que este método solo proporciona momentos, teniendo que utilizar otros arreglos matemáticos para obtener fuerzas axiales y cortantes que son de suma importancia para el diseño de los elementos estructurales.

Por otra parte, la comparación SAP2000-Rigideces obtuvo un error promedio del 3.5%, tomando en cuenta que el método matricial (Rigideces) además de momentos, se pueden obtener fuerzas axiales y cortantes, mejorando la capacidad de respuesta de la estructura ante diversas acciones, a su vez aumenta la exactitud de las mismas para un óptimo diseño de los elementos estructurales.

No requiere una inversión adicional, con solo tener una computadora personal que cualquier estudiante universitario debe poseer e incluida la hoja de cálculo, todo esto comparado con el costo del software SAP 2000 cuyo valor oscila entre \$33,000 y \$70,000 MXN, podemos concluir que esta propuesta genera un ahorro monetario ya que lo más valioso es el capital intelectual de los alumnos.

11. Discusión

De acuerdo con los antecedentes consultados, aceptamos que es de suma importancia conocer el sustento teórico (Blanco, 2012), para conocer el comportamiento de la estructura y que a su vez no se descarta ninguna ecuación para la resolución del problema, pero estamos en desacuerdo que el utilizar un software para determinar el comportamiento de una estructura, (Carabela 2013) sea la única opción para realizar el análisis estructural, como se demostró en este documento tenemos otros aliados como son las hojas de cálculo, nuestro capital intelectual adquirido en el bloque de ciencias básicas y la teoría estructural.

12. Bibliografía

Arturo Tena Colunga, (2009). “Análisis matricial de estructuras por el método de la rigidez”. México. Limusa.

Colunga, A. T. (2007). “Análisis de Estructuras con Métodos Matriciales”

Gutierrez de Velasco, (2009). “Método simplificado para el análisis estructural de sistemas muro-marco”.

Grossman, S.L. (2011). Matemáticas 4 (Algebra Lineal). México: Mc Graw Hill.

Jesús de la C. H. (2015). “Apuntes de análisis estructural avanzado”.

Peterson, J. C. (2005). Matemáticas Básicas. México: GRUPO EDITORIAL

PATRIA. R. C. Hibbeler (2012). ANALISIS ESTRUCTURAL. México: PEARSON

Reglamento de construcción del municipio del Centro, Tabasco.

MODELO SUSTENTABLE PARA EL DESARROLLO VIAL, MOVILIDAD VERDE, URBANISMO Y SOCIEDAD.

CUAUHTÉMOC TONATIUH VIDRIO SAHAGÚN ⁽¹⁾, VALERIA JOCELYN ARANDA SALGADO ⁽²⁾ & MAYRA ELIZABETH VARGAS ESPINOZA ⁽³⁾

⁽¹⁾Universidad de Guadalajara, CUCEI; Autlán de Navarro, México; cuau_visa@yahoo.com.mx

⁽²⁾Universidad de Guadalajara, CUCEI; Chapala, México; valeriaaransal@gmail.com

⁽³⁾Universidad de Guadalajara, CUSUR; Autlán de Navarro, México; may.vargase@gmail.com

RESUMEN:

Debido a las problemáticas que aquejan constantemente a la población de la Zona Metropolitana de Guadalajara, en lo que se refiere a vías de comunicación terrestres, hemos decidido realizar el presente proyecto, con miras a proponer una solución sustentable, eficiente, eficaz y de aceptación social.

Presentaremos las características propias de cada tipo de pavimento, pues es conveniente saber los beneficios de usar determinado material, para así elegir el más conveniente, observando características propias de durabilidad, estructura y otras características.

Dentro de la misma se obtienen los siguientes beneficios: mayor seguridad vial, ahorro de combustible en la ZMG, índices de disminución de emisiones de CO₂ a la atmósfera, factibilidad económica de la propuesta, ahorro gubernamental en vialidades y mejoría de iluminación en la vía pública.

ABSTRACT:

Inspired by the search for solutions to problems that constantly affect society as times to crossing roads in the cities, road safety, government economic spending to keep the streets in good conditions, and the severe pollution caused by motor vehicles, we decided to make this project to propose a feasible solution, environmentally friendly, and socially acceptable; We formulate a proposal based in a sustainable solution for the problems of mobility we suffer in this days.

There remains the deteriorating condition of the streets of the metropolitan area of Guadalajara. A clear example is the statement in the media in which due to the rainy season that occurred at the end of 2013, 30% of the roads were in bad conditions. This generates problems such as traffic congestion, damage to cars, trucks and other transportation. Also, the continuous repairs generate constant expense accounts to the concerned government; at the same time and in parallel, this implies deviations to traffic flow that as a result brings delays in daily tours.

1. INTRODUCCIÓN

La situación actual de nuestra sociedad en cuanto a vías de comunicación, sabemos que es una de las necesidades fundamentales que impulsan el desarrollo del ser humano en su vida cotidiana. Dentro de nuestro presente estas vías de acceso y tránsito diario por peatones, automovilistas y choferes del transporte público se han vuelto un medio fundamental para llevar acabo la realización de nuestras actividades diarias.

Precisamente enfocándonos a esta situación se busca la innovación y el énfasis hacia los problemas que han surgido y siguen surgiendo en cuanto al estado de las avenidas, calles, autopistas y carreteras de una ciudad en pleno desarrollo urbano.

Sabemos que son las conexiones entorno a las cuales se desarrolla el estilo de vida a ritmos diversos, pero con un tipo de movilización al fin. Ha surgido la preocupación por el deterioro constante de diversas zonas y que va en aumento, esta problemática aqueja a un gran sector de la población, que busca una situación mejor en beneficio de la mayoría.

Existen materiales muy interesantes que apostarían por la situación del mejoramiento de estas vías de acceso a la comunicación, comercio y movilización, refiriéndonos al asfalto y el concreto hidráulico son los dos elementos que han sido protagonistas en el vaivén de estudios sobre el material más apropiado y cuál conviene utilizar en la innovación de dichas vías de comunicación.

En los estudios para la elaboración de los pavimentos asfálticos o de concreto hidráulico deben tomarse en cuenta aspectos determinantes para la elección del mejor material, más allá de los costos de construcción y mantenimiento, tales como el ahorro en combustibles, el ahorro de energía eléctrica, la seguridad vial y que sean amigables con el medio ambiente.

En este proyecto mostraremos cada una de las características que componen a mencionados elementos, realizando un análisis entre diversos factores desde su composición, durabilidad, aplicación y costos, hasta la opinión popular, quienes tenemos un contacto directo de manera cotidiana.

2. OBJETIVOS

2.1. Objetivo general:

Realizar una propuesta de solución sostenible a la problemática de movilidad para reducir tiempos de recorridos en vías de comunicación terrestres en ciudades, mejorar la seguridad vial, reducir el gasto gubernamental y familiar en el sector del transporte y que al mismo tiempo sea amigable con el medio ambiente.

2.2. Objetivos específicos:

1. Identificar cualitativamente las características de los materiales más empleados en la construcción de vialidades y su impacto generado en la movilidad urbana.
2. Analizar cuantitativamente el rendimiento económico y comportamiento financiero en cada alternativa para la configuración óptima de un sistema vial sustentable de una ciudad.
3. Cuantificar los ahorros energéticos en el sector transporte y evaluar su respectivo impacto ambiental.

3. METODOLOGÍA

El presente proyecto se desarrolla sobre tres ejes fundamentales para la creación de un modelo sustentable para el desarrollo vial que son: el social, el económico y el ambiental; los cuales retoman el entendido o definición del concepto “sostenible” adoptado en el reporte de Bruntland en el que define como tal a aquella manera de satisfacer las necesidades actuales sin comprometer la satisfacción de las necesidades de futuras generaciones.

Por tal motivo el presente estudio en su fase metodológica es desglosado en tres divisiones para analizar cada eje mencionado independientemente para no influenciar los resultados; en la etapa final se hace una vinculación e interrelación para ligar los tres ámbitos.

En este proyecto empleamos investigaciones particulares realizadas por instituciones de prestigio y que datan de la última década para asegurar que los resultados se encuentran en la mayor actualización posible en cuanto a método científico e ingenieril se refiere.

Varios estudios han buscado el impacto de cada tipo de material en el consumo de combustible del vehículo, principalmente enfocándose en pavimentos rígidos y flexibles, estas variaciones en el consumo de combustible son en esencia atribuidas a los tipos de pavimentos examinados basándose en la composición estructural, material y propiedades de cada diseño de pavimento.

El principal defecto en la aproximación empírica de la relación vehículo-pavimento en el consumo de combustible es la precisión de medición requerida para tener un margen de error aceptable.

Mientras que la acumulación de las diferencias de consumo de combustible entre diferentes tipos de pavimentos puede ser grande si se evalúan por su vida de servicio completa, el impacto de un vehículo individual es muy pequeño.

Un estudio elaborado por Taylor y Patten sugiere que la diferencia máxima de consumo de combustible entre pavimentos rígido y flexible asciende a 0.007 litros por kilómetro recorrido

por camioneta; mediciones a esta escala pueden ser altamente influenciadas por factores externos incluyendo temperaturas locales, presión de llanta, sistema de suspensión del vehículo, velocidad del vehículo y otras variables.

Para efectos de este proyecto, se tomará al Concreto hidráulico como el pavimento rígido y al Asfalto como el pavimento flexible por la cotidianidad con la que se emplean en la construcción de vías terrestres en México.

4. RESULTADOS

1.1 ESTUDIOS EMPIRICOS

El impacto de los pavimentos en el consumo de combustible del vehículo es debido a dos efectos principales: deflexión del pavimento y la regularidad del mismo.

Los principales contribuyentes a la relación vehículo-pavimento son las fuerzas resistivas que dependen del material y propiedades estructurales a lo largo del sistema que actúan el vehículo. Sin embargo esto se puede resumir mediante el estudio de deflexión del pavimento tipo flexible contra rígido. La siguiente tabla resume el rendimiento y variaciones de consumo de combustible debido al tipo de pavimento.

Tabla 1.- Rendimiento y variaciones de consumo de combustible

<i>Estudio</i>	<i>Año</i>	<i>Tipo de vehículo</i>	<i>Velocidad (km/hr)</i>	<i>Valor IRI (m/km)</i>	<i>Incremento en el consumo de combustible (l/100km)</i>
<i>Zaniewski</i>	<i>1982</i>	<i>Camioneta</i>	<i>16 – 110</i>	<i>1 – 6.7</i>	<i>0</i>
<i>Zaniewski</i>	<i>1982</i>	<i>Automóvil</i>	<i>16 – 110</i>	<i>1 – 6.7</i>	<i>0</i>
<i>De Graaff</i>	<i>1999</i>	<i>Camioneta</i>	<i>90</i>	<i>-</i>	<i>0.2</i>
<i>NRC I</i>	<i>2000</i>	<i>Camioneta</i>	<i>100</i>	<i>1 – 3.5</i>	<i>4.0 – 4.3</i>
<i>NRC I</i>	<i>2000</i>	<i>Camioneta</i>	<i>60</i>	<i>1 – 3.5</i>	<i>1.6 – 1.7</i>
<i>NPC</i>	<i>2002</i>	<i>Camioneta</i>	<i>80</i>	<i>-</i>	<i>0.04 – 0.24</i>
<i>NRC II</i>	<i>2002</i>	<i>Camioneta</i>	<i>100</i>	<i>1 – 3.5</i>	<i>1.4 – 2.3</i>
<i>NRC II</i>	<i>2002</i>	<i>Camioneta</i>	<i>60</i>	<i>1 – 3.5</i>	<i>1.4 – 2.2</i>
<i>NRC III</i>	<i>2006</i>	<i>Camioneta</i>	<i>100</i>	<i>1</i>	<i>0 – 0.7</i>
<i>NRC III</i>	<i>2006</i>	<i>Camioneta vacía</i>	<i>100</i>	<i>1</i>	<i>0 – 0.4</i>
<i>NRC III</i>	<i>2006</i>	<i>Camioneta cargada</i>	<i>60</i>	<i>1</i>	<i>0 – 0.5</i>
<i>NRC III</i>	<i>2006</i>	<i>Carro</i>	<i>100</i>	<i>1</i>	<i>0.1 – 0.3</i>

<i>U Texas</i>	<i>2009</i>	<i>Carro</i>	<i>60</i>	<i>2.7 – 5.1</i>	<i>0.4 – 0.9</i>
<i>Michigan SU</i>	<i>2010</i>	<i>Carro</i>	<i>60</i>	<i>-</i>	<i>0</i>
<i>Michigan SU</i>	<i>2010</i>	<i>Camioneta</i>	<i>60</i>	<i>-</i>	<i>1</i>

A continuación se presenta de manera gráfica los valores reportados por los estudios anteriores en el efecto del consumo de combustible por vehículos en litros por cada 100 kilómetros recorridos dependiendo del tipo de pavimento.

Gráfica 1.- Ahorro en consumo de combustible en asfalto (flexible) comparado con concreto (rígido).

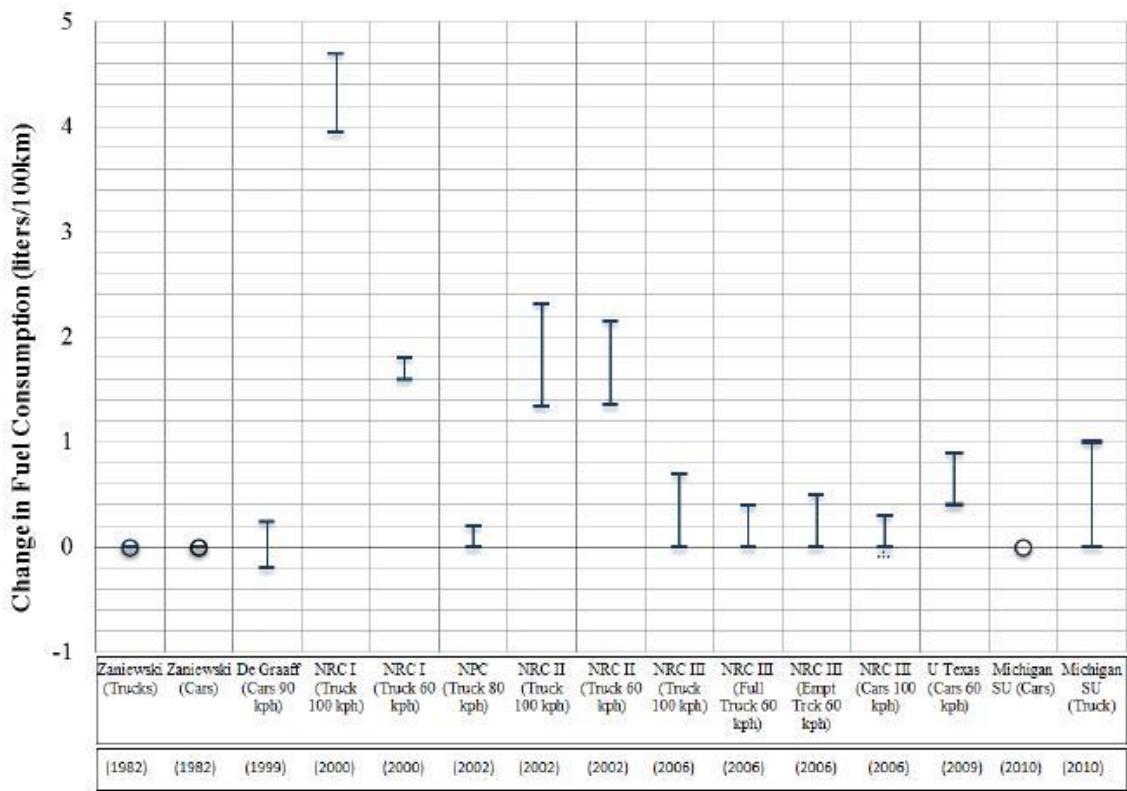


Figure 2-1: Values reported by previous studies on the effect of pavement type on fuel consumption of vehicles in liters/100km (gal/100mi). Change in fuel consumption on an asphalt (flexible) pavement compared to a concrete (rigid) pavement.

Como datos se tiene que existe un parque vehicular en la Zona Metropolitana de Guadalajara que asciende a 1'782,000 automotores, de los cuales, el 24% son camionetas y el 67% son automóviles o carros.

El precio de la gasolina con su último aumento de precio (registrado el 01 de Marzo de 2016) es de \$13.97 en tipo Premium y \$13.16 tipo Magna. Como estadística reportada, aproximadamente el 80% de consumidores opta por la Magna y solo el 20% emplea la Premium o roja como coloquialmente se le llama.

Se seleccionaron 3 de las rutas más populares que a diario son recorridas por los ciudadanos que habitan en la ZMG para evaluar el problema con el caso-ejemplo de la ciudad sede. A continuación se presentan:

Recorrido estimado: 8.4 km

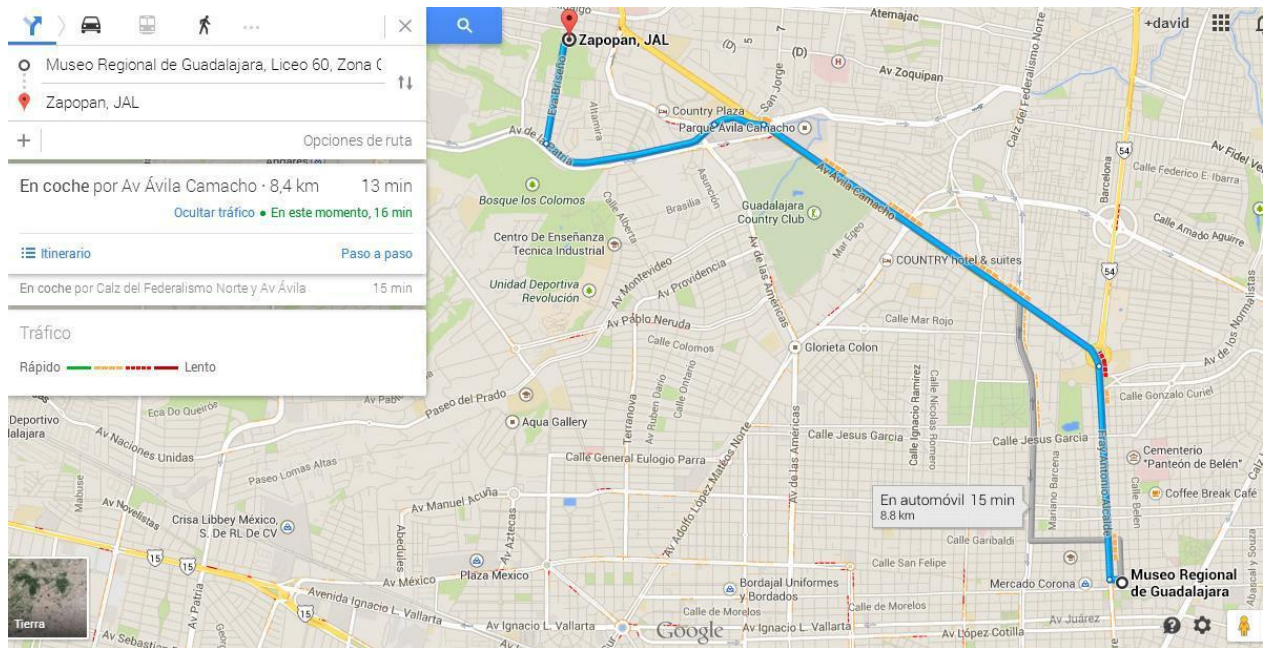


Figura 1.- Ruta 1 Guadalajara centro – Zapopan centro.

Recorrido estimado: 6.8 km

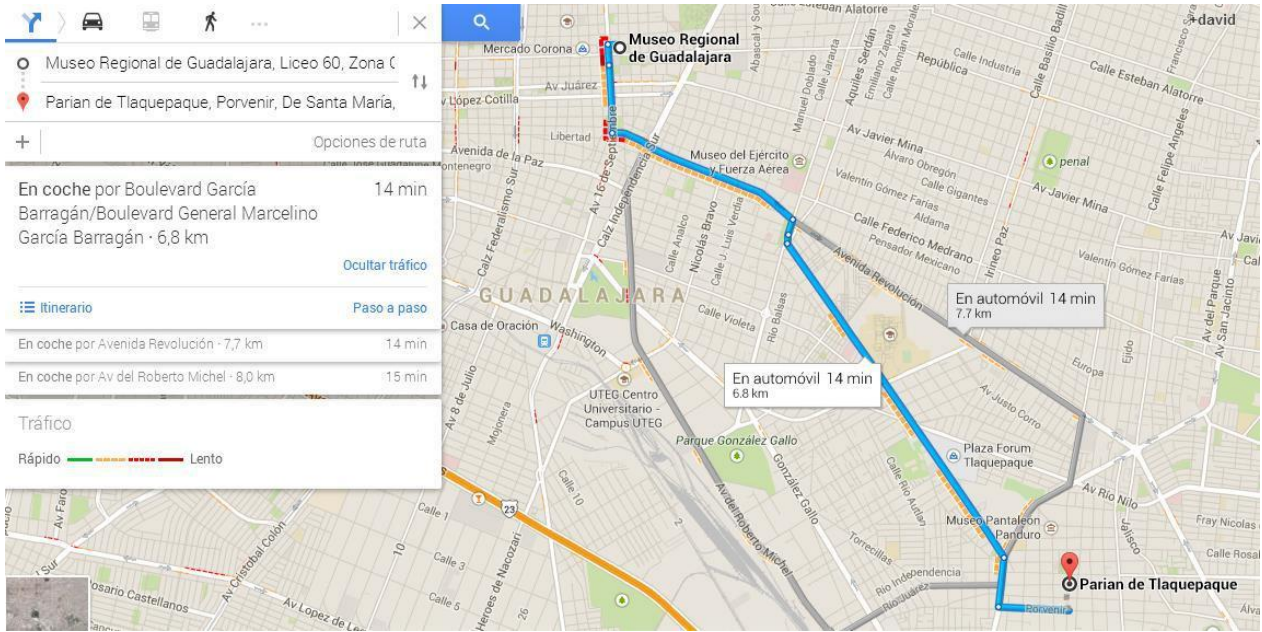


Figura 1.- Ruta 2 Guadalajara centro – Parían Tlaquepaque.

Recorrido estimado: 8 km

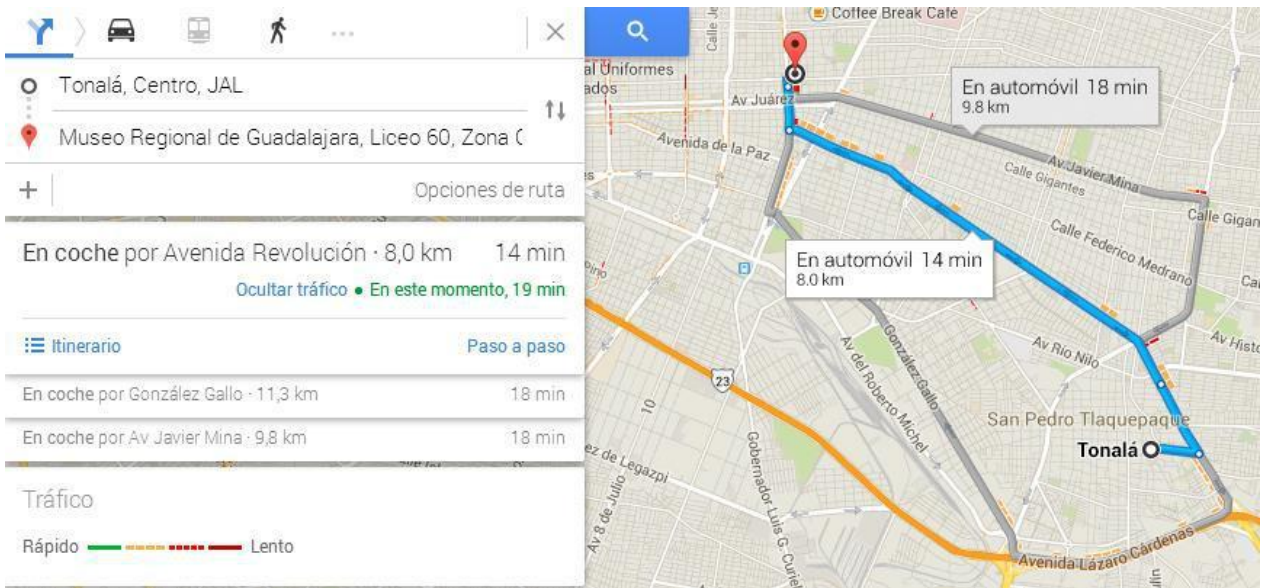


Figura 1.- Ruta 3 Guadalajara centro – Tonalá centro.

1.2 AHORRO DE COMBUSTIBLE E IMPACTO AMBIENTAL POSITIVO EN LA ZONA METROPOLITANA DE GUADALAJARA

Se realizaron cálculos empleando el método NRC III y el de U Texas para evaluar el ahorro y comparación de uso de Concreto Hidráulico o Asfalto en las vialidades; se consideran que circulan en un día tres quintas partes del lote vehicular de la zona, distribuyéndose en 3 partes iguales para las rutas propuestas. En base a lo anterior, se obtuvo como resultado lo siguiente:

Tabla 2.- Comparación en uso de Concreto Hidráulico o Asfalto, por métodos NRC III y U Texas

Ruta	Método Empleado	Litros de ahorro diarios
Guadalajara Centro – Zapopan Centro	NRC III	8,023.2768
Guadalajara Centro – Zapopan Centro	U Texas	26,075.6496
Guadalajara Centro – Parián Tlaquepaque	NRC III	6,495.0336
Guadalajara Centro – Parián Tlaquepaque	U Texas	21,108.8592
Guadalajara Centro – Tonalá Centro	NRC III	7,641.216
Guadalajara Centro – Tonalá Centro	U Texas	24,833.952

Si se promedian ambos métodos para tener un cálculo intermedio y que se equilibre entre ambos se obtiene:

Tabla 3.- Promedio de comparación en uso de Concreto Hidráulico o Asfalto, por métodos NRC III y U Texas

Ruta	Método Empleado	Litros de ahorro diarios
Guadalajara Centro – Zapopan Centro	NRC III - U Texas	17,049.4632
Guadalajara Centro – Parián Tlaquepaque	NRC III - U Texas	13,801.9464
Guadalajara Centro – Tonalá Centro	NRC III - U Texas	16,237.584
Ahorro Total	NRC III - U Texas	47,088.9936

4.3 AHORRO ECONÓMICO EN LA ZONA METROPOLITANA DE GUADALAJARA

De los datos anteriores se calcula el ahorro económico en el gasto familiar y empresarial para quienes se responsabilizan del pago de combustible del vehículo que circularía por Concreto hidráulico en vez de Asfalto.

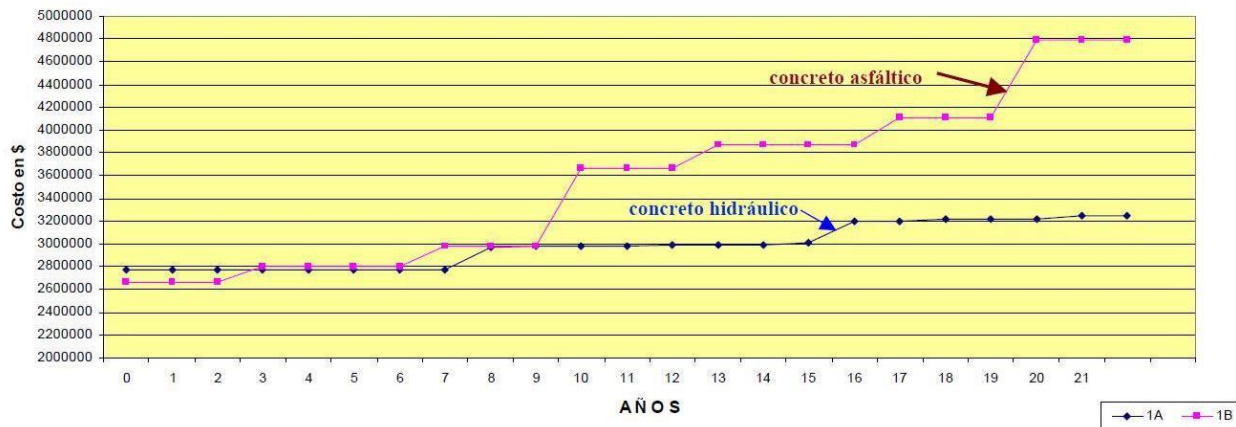
Tabla 4.- Ahorro económico causado por uso de concreto hidráulico en vez de Asfalto

Ruta	Litros de ahorro diarios (Premium)	Ahorro Económico diario	Litros de ahorro diarios (Magna)	Ahorro Económico diario
Guadalajara Centro – Zapopan Centro	3,409.89	\$47,636.16	13,639.57	\$179,496.74
Guadalajara Centro –Parián Tlaquepaque	2,760.39	\$38,562.65	11,041.56	\$145,306.93
Guadalajara Centro – Tonalá Centro	3,247.5168	\$45,367.81	12,990.0672	\$170,949.28
Ahorro Total/día	\$627,319.57			

4.4 COSTO DE CONSTRUCCIÓN Y MANTENIMIENTO:

“Costos por kilómetro de construcción y mantenimiento, con un tránsito bajo en el año 2008”. En la siguiente grafica se muestran los resultados sobre costo por año de las situaciones mencionadas.

Gráfica 2.- Costos por km, construcción y mantenimiento, tránsito bajo, año 2008.



4.4.1 Análisis:

En los primeros dos años, el costo se mantuvo entre \$ 2, 600,000 y \$ 2, 800,000 para ambos materiales.

Del tercero al sexto año para ambos materiales el costo fue de \$ 2, 800,000.

Para el concreto hidráulico en siete años también estuvo cerca de \$ 2, 800,000, mientras que para el asfalto en siete años ascendió su costo a \$ 3, 000,000.

En el año ocho y nueve para ambos materiales el costo fue de \$3, 000, 000.

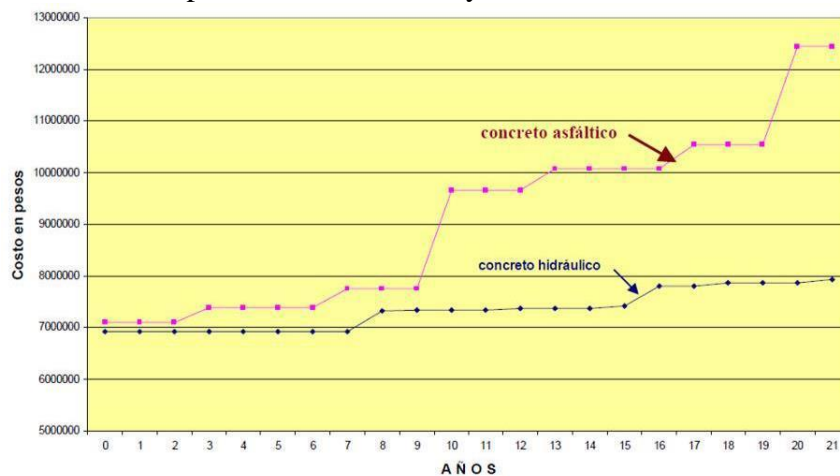
Mientras en los años diez, once y doce el costo del asfalto fue poco más de \$ 3, 600, 000. Del año diez al quince el concreto hidráulico tuvo un costo de \$ 3, 000, 000.

El trece, catorce, quince y dieciséis el asfalto ascendió a más de \$ 3, 800, 000, sin embargo el concreto hidráulico ascendió y en el año dieciséis y diecisiete subió a \$ 3, 200, 000 y fue aumentando en el año dieciocho al veintiuno hasta poco más de lo último mencionado.

El diecisiete, dieciocho y diecinueve años en los que el concreto de asfalto sube poco más de \$ 4, 000, 000, pero el aumento mayor fue en los últimos tres, del diecinueve al veintiuno, con un costo total de \$ 4, 800, 000.

En esta siguiente tabla se nos muestran los costos por kilómetro de construcción y mantenimiento con un tránsito medio en el año 2008

Gráfica 3.- Costos por km, construcción y mantenimiento, transito medio 2008



Desde el inicio hasta los primeros dos años tanto el concreto asfáltico como el hidráulico tienen un costo de \$ 7, 000, 000, manteniendo este mismo costo para el concreto hidráulico hasta el año siete, mientras que el asfalto sube del año tres hasta el seis llegando casi a \$ 7, 500, 000 .

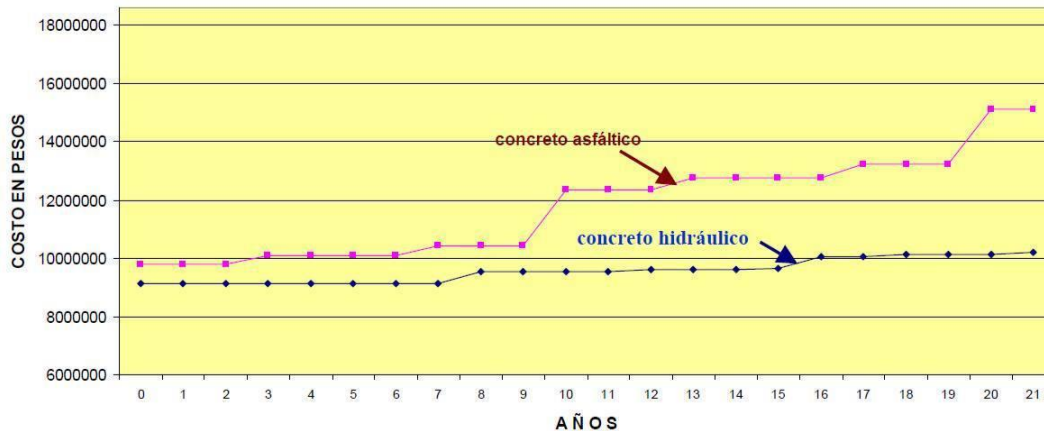
Del año ocho al quince el concreto hidráulico aumenta a poco más de \$ 7, 000, 000 que era en un inicio, ascendiendo así poco a poco durante el resto de los años, el veintiuno, logrando su máximo costo a \$ 8, 000, 000.

Para el concreto asfáltico el siete, ocho y nueve se eleva su costo hasta casi llegar a \$ 8, 000, 000, pero en los años diez, once y doce se eleva hasta casi \$ 10, 000, 000. Ascendiendo en el año 17 al

19 hasta \$ 11, 000, 000 y en sus últimos dos el veinte y el veintiuno a su costo final de \$ 12, 500, 000.

Ahora el costo por kilómetro de construcción y mantenimiento con un tránsito pesado en el año 2008:

Gráfica 3.- Costos por km, construcción y mantenimiento, transito pesado 2008



Para ambos materiales se genera un costo dependiendo cada año, sin embargo varía, llegando al aumento.

Para el concreto asfáltico en los primeros dos años se genera un costo de \$ 10, 000, 000, que va ascendiendo, llegando del año tres al seis aumentando un poco más a la mencionada cantidad. En el año siete, ocho y nueve se eleva a más de \$ 10, 000, 000, casi llegando a poco, más de la mitad.

El gran salto que da en costos el asfalto se da en los años diez, once y doce, superando los \$ 12, 000, 000, incrementando en los años trece, catorce, quince y dieciséis hasta \$ 12, 500, 000. Finalmente para este tipo de concreto del año diecisiete al veintiuno se incrementan los costos hasta casi \$ 16, 000, 000.

En cuanto al concreto hidráulico su costo se mantiene fijo en los años del uno al siete, con poco menos de \$10, 000, 000. No es hasta el año ocho y hasta el quince que su costo se acerca más a la cantidad antes mencionada.

Su incremento final se da en los últimos años, del dieciséis al veintiuno, rebasando poco más la cantidad de \$10, 000, 000.

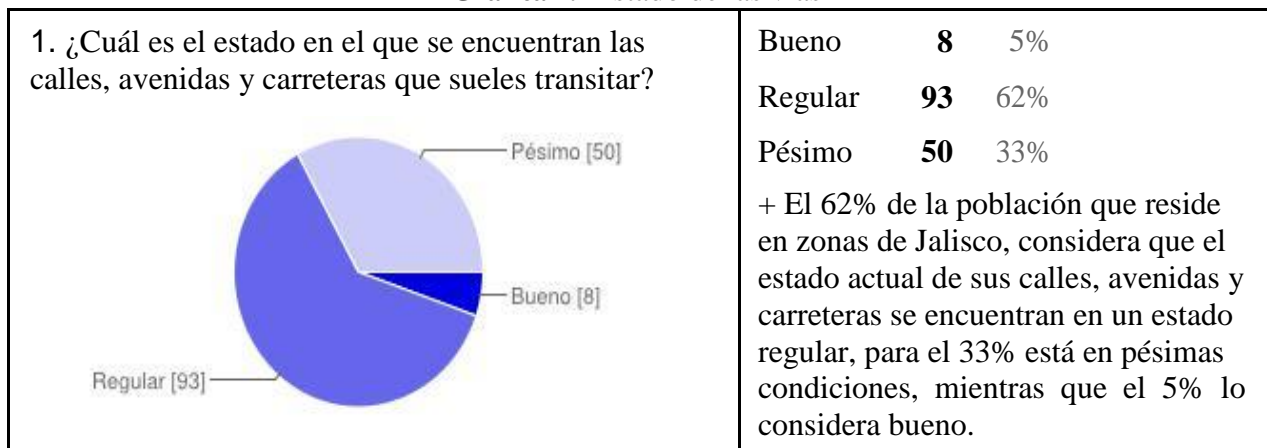
5. CENSO DE OPINIÓN PÚBLICA

Para un proceso de urbanización sano es necesario tomar en consideración la voluntad de la ciudadanía para tomar decisiones que vallan de acuerdo a sus intereses y sea aceptado como contribución a su bienestar.

Por tal motivo se realizó una encuesta a un universo de 152 jóvenes encuestados cuya edades oscilan entre los 16 y los 27 años.

A continuación se presentan cada una de las preguntas y los resultados de las respuestas de cada una de ellas:

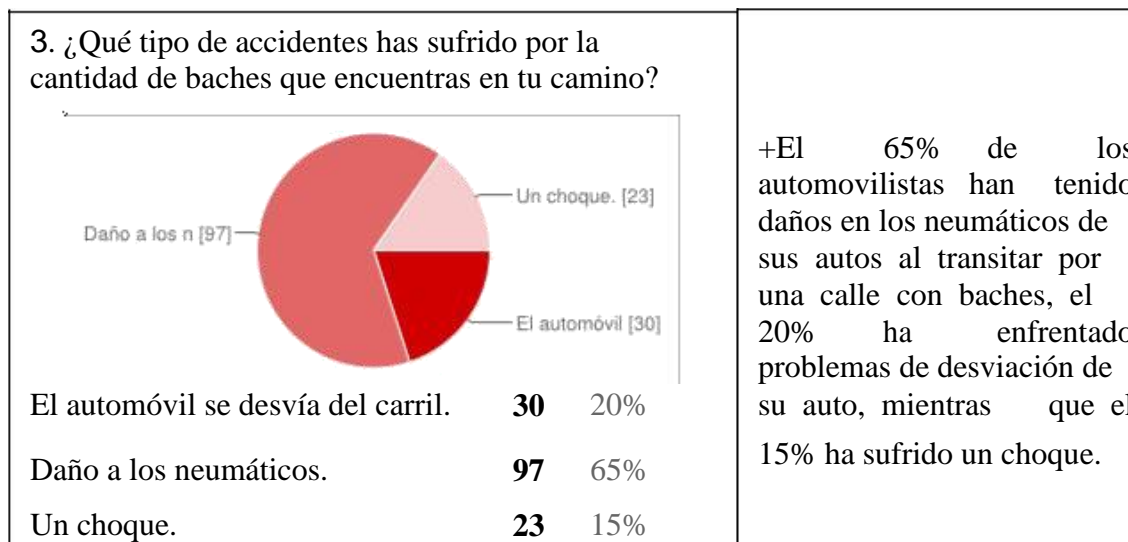
Gráfica 4.- Estado de las vías



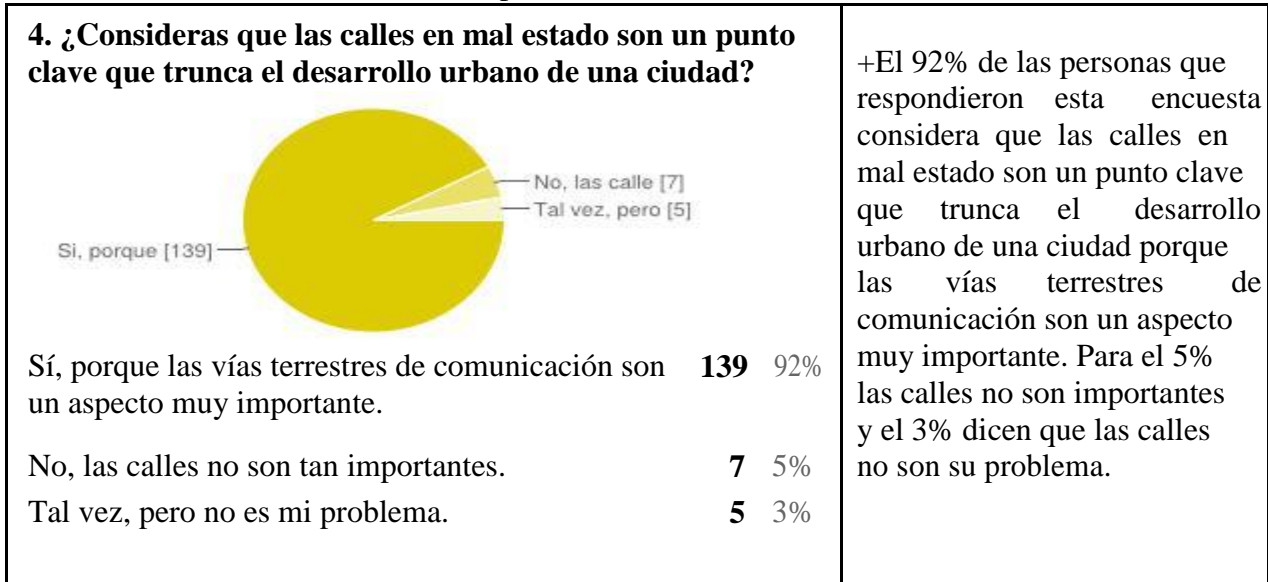
Gráfica 5.- Inconvenientes de las calles



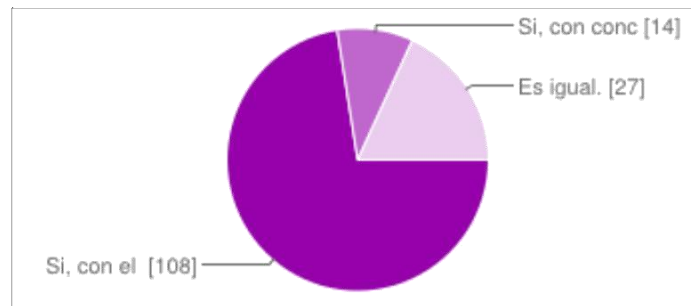
Gráfica 6.- Accidentes



Gráfica 7.- Percepción en cuanto a desarrollo se refiere



6. ¿Al transitar por las calles de tu ciudad has percibido con que material hay un incremento de temperatura?



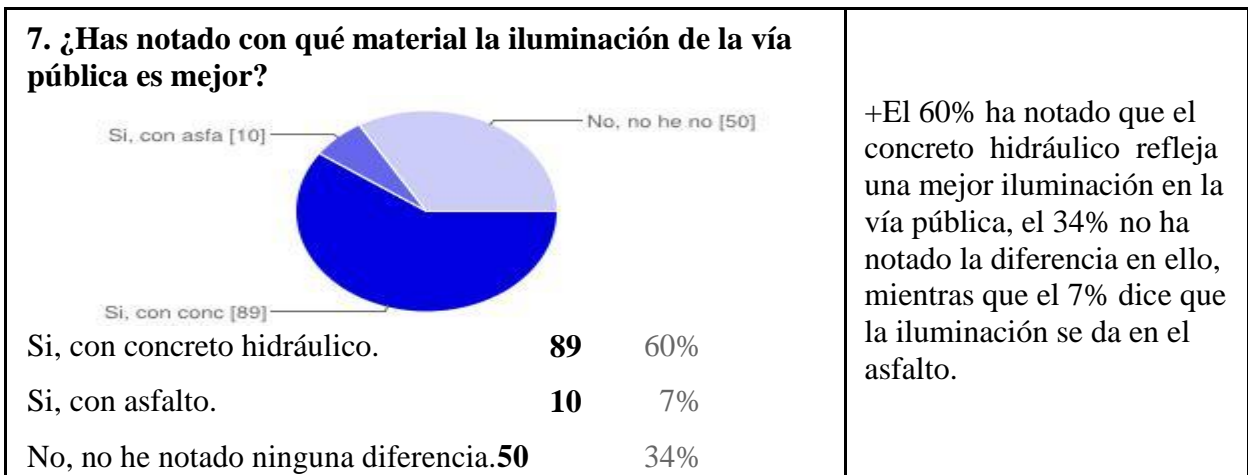
Si, con el asfalto.	108	72%
Si, con concreto hidráulico.	14	9%
Es igual.	27	18%

+El 72% comentan que con el asfalto se percibe un incremento de temperatura, el 18% dice que es igual, mientras que el 9% dice que el aumento de temperatura se da con el concreto hidráulico.

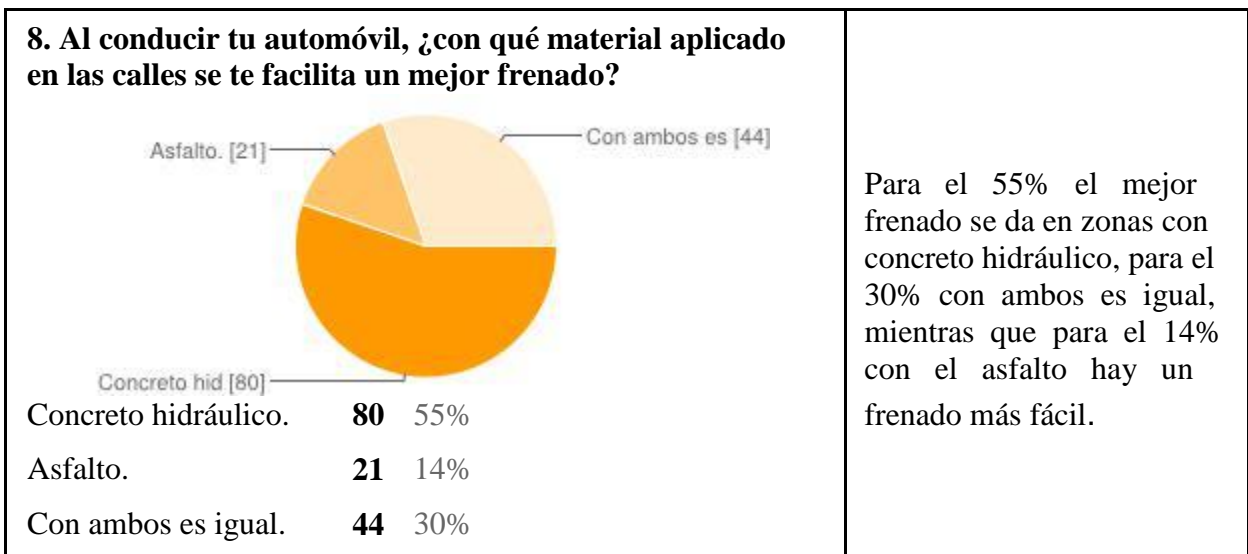
Gráfica 8.- Tipos de soluciones propuestas



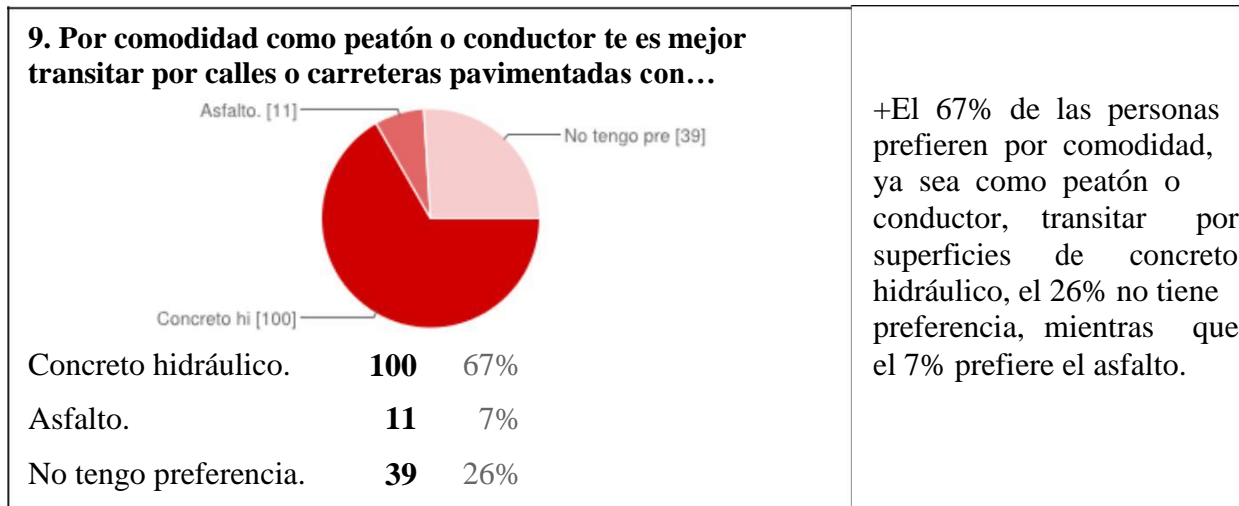
Gráfica 9.- Tipos de soluciones propuestas



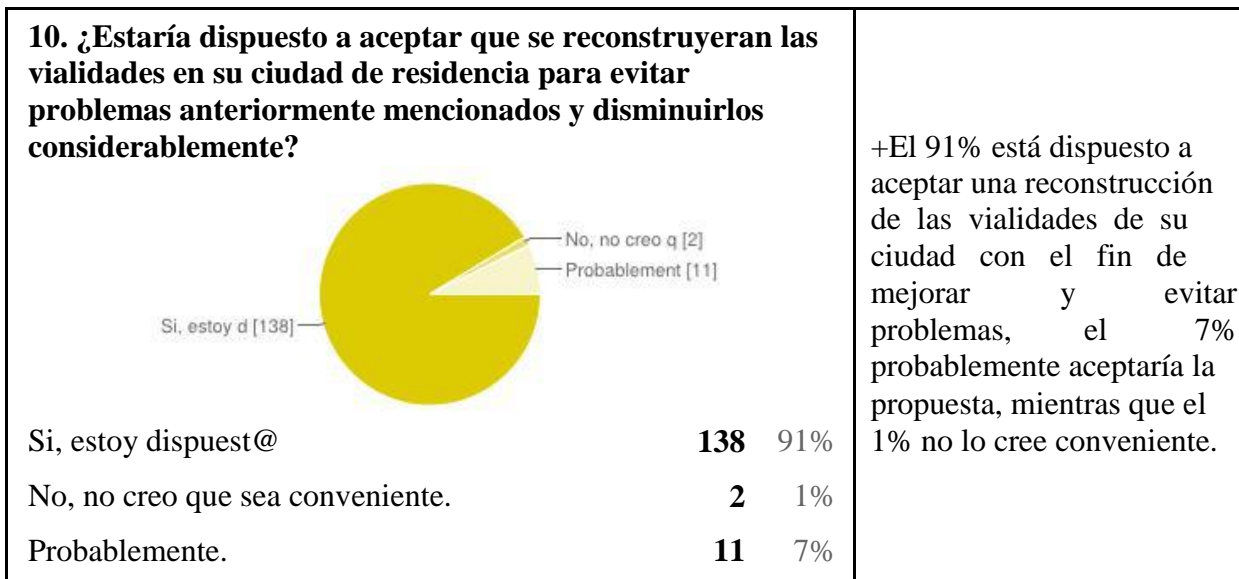
Gráfica 10.- Beneficio del material



Gráfica 11.- Comodidad del peatón y/o conductor



Gráfica 11.- Tipos de soluciones propuestas



6. CONCLUSIONES

Con cada uno de los puntos mencionados, analizados y desarrollados anteriormente, nos damos cuenta de la importancia de la evaluación de dos materiales que se encuentran presentes en nuestra actualidad. Sabemos por los resultados presentados, que el concreto hidráulico se presenta con gran ventaja sobre el asfalto, para formar parte de un proyecto de urbanización en el que implica un beneficio para la sociedad.

Las gráficas muestran que existe una preferencia notable por contar con calles, avenidas, y carreteras pavimentadas con concreto hidráulico, por la cuestión del ahorro en materia de combustible en los automóviles, el ahorro en energía eléctrica, lo que implica una iluminación

mejor en las vías públicas y uno de los aspectos más importantes en los que se beneficia la aplicación del concreto hidráulico es en la situación del impacto ambiental, precisamente por los componentes del mismo y su procedencia natural, no impacta de manera negativa la situación de la atmósfera ni el suelo.

Con la realización de este proyecto pudimos comprobar que el pavimento de concreto hidráulico presenta más ventajas para el usuario, que van desde la económica, ya que al transitar por este tipo de vialidades tenemos un considerable ahorro en combustible, lo que se traduce en un ahorro en la economía familiar y gubernamental, además de un impacto positivo ambiental ya que se reducen las emisiones de gases contaminantes a la atmósfera. Por otro lado nos dimos cuenta que la sociedad en general desea una mejora en la construcción de las vías de comunicación terrestre y consideran al pavimento de concreto hidráulico como el mejor material para la construcción de dichas obras

BIBLIOGRAFÍA

- +Schjetnam, Mario. Calvillo, Jorge y Peniche, Manuel. *“Principios de diseño urbano ambiental”*. (2010). Editorial Limusa. México. 188 págs.
- +Montejo, F. Alfonso. *“Ingeniería de pavimentos”*. (2006). Universidad Católica de Colombia Ediciones y Publicaciones. Bogotá.
- +Wright, Paul H. *“Ingenierías de carreteras”*. (2011). Editorial Limusa. México. 972 págs.
- +Reyes, L. Fredy Alberto. *“Diseño racional de pavimentos”*. (2003). Editorial CEJA. Bogotá. 586 págs.
- +Mehdi Akbarian, et al. *”Model Based Pavement-Vehicle Interaction Simulation for Life Cycle Assessment of Pavements”* (2012). Massachusetts Institute of Technology

REFERENCIAS

1. Awasthi, G. Singh, T. (Mayo 2003). On Pavement Roughness Indices. IE (I) Journal-CV. Recuperado el 19 de diciembre del 2007 de: <http://www.ieindia.org/publish/cv/0503/may03cv6.pdf>.
2. Budras, J. (Agosto 2001). A Synopsis on the Current Equipment Used for Measuring Pavement Smoothness. Recuperado el 11 de diciembre del 2007 de: <http://www.fhwa.dot.gov/pavements/smoothness/rough.cfm>.
3. Canadian Strategic Highway Research Program (C-SHRP) (Julio 1999). Summary of Pavement Smoothness Specifications in Canada and Around the World. Technical Brief #16. Canada. Recuperado el 18 de diciembre del 2007 de: <http://www.cshrp.org/products/br-6-e.pdf>.

ESTABLECIMIENTO EN EL CENTRO UNIVERSITARIO DE CIENCIAS EXACTAS E INGENIERÍAS DE LA UNIVERSIDAD DE GUADALAJARA DE UNA RED GEODÉSICA DE ALTA PRECISIÓN LIGADA A LA RED GEODÉSICA NACIONAL.

DÍAZ VERA, ADALBERTO ⁽¹⁾, MERINO CASAS, JAVIER ALBERTO ⁽²⁾, ÁLVAREZ ROSALES, JUAN ADRIÁN ⁽³⁾ & ÁLVAREZ NORIEGA, MIGUEL EDUARDO ⁽⁴⁾.

(1) Universidad de Guadalajara, Guadalajara, México, correo: teld12000@gmail.com.

(2) Universidad de Guadalajara, Guadalajara, México, correo: javiermerino9058@gmail.com.

(3) Universidad de Guadalajara, Guadalajara, México, correo: adrian.alvarez.rosales@gmail.com.

(4) Universidad de Guadalajara, Guadalajara, México, correo: migueliito_alvarez@hotmail.com.

RESUMEN

La ejecución de proyectos de ingeniería requiere de control horizontal y vertical de donde se propaguen coordenadas para medición, replanteo y operación de los mismos. Actualmente en México el procedimiento más adecuado para establecer este control es por medio de líneas o redes medidas con GPS y ligadas a la Red Geodésica Nacional Activa (RGNA) para obtener una alta precisión. Dado que no se contaba en el Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingenierías (CUCEI) de la Universidad de Guadalajara con una red actualizada, se propuso emplear equipamiento GPS para generarla y apoyar para el desarrollo de proyectos topográficos y geodésicos en este campus y en la Zona Metropolitana de Guadalajara. Los objetivos buscados fueron establecer una red primaria de control horizontal y vertical, su uso como apoyo terrestre para la restitución fotogramétrica del campus CUCEI, promover el desarrollo de personal humano habilitado en el empleo de estas herramientas y metodologías entre los estudiantes egresados de Ingeniería y establecer un campo de pruebas para el aprendizaje y metrología de mediciones topográficas y geodésicas.

Palabras clave: GPS, red geodésica, SIG.

ABSTRACT

The execution of engineering projects requires horizontal and vertical control of where monitoring for measurement, stakeout and operation can spread. Currently the most appropriate procedure to establish this control is by means of GPS lines or networks linked to the National Geodesic Active Network (RGNA) for high accuracy. Since it was not counted in University Center of Exact Sciences and Engineerings (CUCEI), belonging to University of Guadalajara, with an updated network, it was proposed to use GPS equipment to generate and support for the development of topographic and geodetic projects on this campus and in the metropolitan area of Guadalajara. The desired objectives were to establish a network of primary horizontal and vertical control; use as ground support for photogrammetric restitution of CUCEI campus; promote the development of human personnel enabled on the use of these tools and

methodologies among graduate engineering students; and establish a testing ground for learning and metrology topographic and geodetic measurements.

Keywords: GPS, geodetic network, GIS.

1. INTRODUCCIÓN.

Actualmente en México el procedimiento más adecuado para establecer el control de coordenadas en ingeniería es por medio de líneas o poligonales de apoyo medidas con GPS y ligadas a la Red Geodésica Nacional Activa (RGNA) para control horizontal (Instituto Nacional de Estadística y Geografía, INEGI, 2010) y a la Red Geodésica Vertical (RGV) y al Geoide Gravimétrico Mexicano 2006 (GGM06) para control vertical (Instituto Nacional de Estadística y Geografía, INEGI, 2006). En CUCEI no se contaba con una red actualizada, se tenía sólo una marca establecida en 1992 y actualizada en 1998, por lo que se propuso emplear equipamiento GPS para establecer una nueva red geodésica de alta precisión ligada a estos controles, para el desarrollo de proyectos topográficos y geodésicos en dicho campus y en la Zona Metropolitana de Guadalajara, que cae dentro de la zona de influencia de este control (Heywood, Cornelius, & Carver, 1998).

El área de trabajo para el desarrollo de este proyecto se estableció en la zona del campus CUCEI de la Universidad de Guadalajara, según se muestra en la figura no. 1.

2. OBJETIVOS

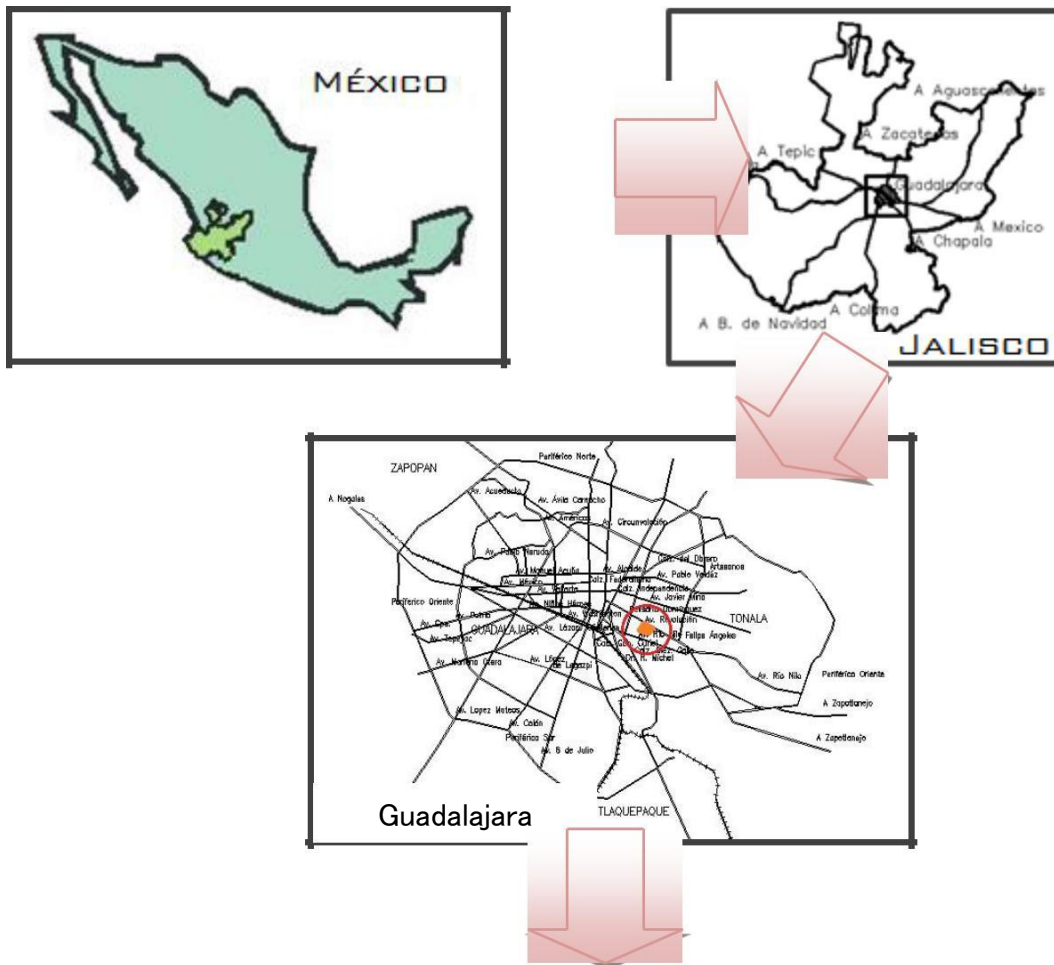
2.1. Objetivo general de la investigación.

Establecer en el campus de CUCEI una red geodésica de alta precisión por medio de medición GPS ligada a la Red Geodésica Nacional, que servirá como base para el desarrollo de posteriores proyectos de ingeniería en el área del campus y su zona de influencia, y en los diversos campus e instalaciones de la Universidad de Guadalajara.

2.2. Objetivos específicos.

- Establecer una red geodésica compuesta por líneas de control horizontal para arranque de poligonales de apoyo geodésicas y topográficas.
- Verificar el empleo de la red para su uso como apoyo terrestre para una posterior restitución fotogramétrica del campus CUCEI.
- Establecer un control vertical de precisión para desarrollo de líneas de nivelación.
- Proponer esta red como la base de control de una posterior medición y actualización del plano del campus CUCEI y de otros sitios de la Universidad de Guadalajara.
- Emplear el equipamiento topográfico y geodésico con el que cuenta actualmente el CUCEI para la medición.
- Promover un sistema de desarrollo de personal humano habilitado en el empleo de estas herramientas y metodologías entre los estudiantes egresados de Ingeniería participantes en este proyecto.
- Generar temas adecuados de titulación para estudiantes egresados de Ingeniería.

- Establecer un campo de pruebas de medición geodésica y topográfica que servirá como patrón metrológico para pruebas con equipo nuevo y para prácticas de campo con estudiantes.
- Se verificará la viabilidad de establecer, con financiamiento privado y parte de recursos de la Universidad de Guadalajara, de una Estación Permanente de Corrección GPS, la cual brindará el servicio de señal correctora para GPS-RTK (GPS en tiempo real) por medio de información transmitida vía GSM (por medio de señal de telefonía celular) (Mena Berrios, 2008), lo que redundará en beneficio de la Universidad por tratarse de un servicio de alta modernidad.



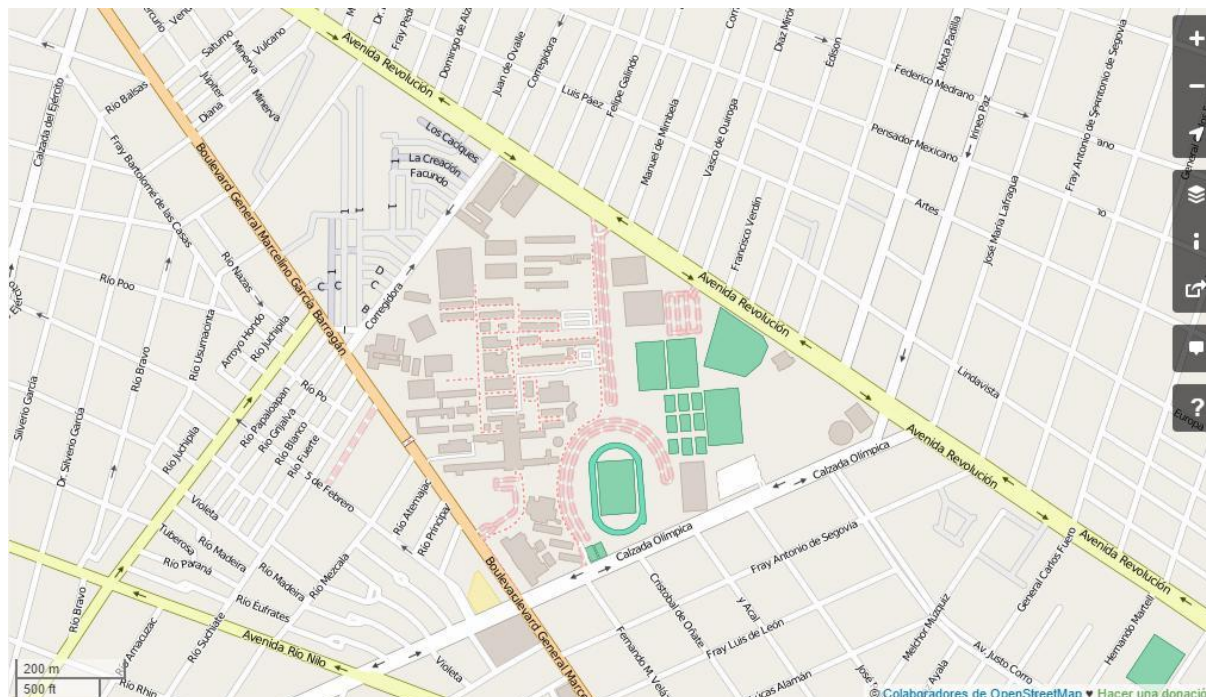


Figura 1.- Localización del Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingenierías (CUCEI) de la Universidad de Guadalajara.

3. MATERIALES Y METODOLOGÍA.

3.1. Técnicas de recolección de información.

La medición de la red geodésica se ajustó a la Norma Técnica del Sistema Geodésico Nacional y a la de Estándares de Exactitud Posicional (Instituto Nacional de Estadística y Geografía, INEGI, 2010, 2010a).

En primer término se efectuó el registro de marcas o vértices GPS, su captura y proceso, así como el posterior análisis y definición de resultados. Por lo general esto se facilitó pues establecimos una clasificación en tres rubros, donde se pueden acomodar todos los elementos que se pretendía recolectar. Estos rubros son los siguientes (Córdoba Narbona, 1985):

- Elementos espaciales: posiciones horizontales X, Y y posiciones verticales Z.
- Elementos temporales: lapsos de medición de señal GPS, simultaneidad de mediciones para líneas de control, reposicionamiento de puntos de baja calidad.
- Elementos humanos: se refiere a los participantes en el operativo, los cuales son en su mayoría estudiantes egresados o en el último semestre de Ingeniería.

Cada elemento pudo ser controlado por medio de una técnica de recolección de información GPS que correspondía a sus características, ampliada por la aplicación de dobles, triples o múltiples posicionamientos, proponiendo para esta medición el método de medición estática con una base conocida, y desarrollando enseguida la medición por redes de triangulación (Hofmann-Wellenhof, 2001). La base conocida fue el punto GPS denominado GUA002 de la Red Geodésica Estatal colocado en la azotea de Ciencias Químicas, y diversas estaciones de control de la RGNA, considerando a priori las estaciones de Guadalajara (clave IITJ), Aguascalientes (INEG), Colima

(COL2), Universidad de Guanajuato (UGTO) y Universidad de Querétaro (UQRO), dependiendo de las condiciones de recepción en cada uno de estos sitios (Instituto Nacional de Estadística y Geografía, INEGI, 2010).

Se buscó así mismo que varias marcas fueran fotoidentificables, con el fin de establecer una base de aerotriangulación para un posterior proyecto de fotointerpretación del campus de CUCEI por medios fotogramétricos digitales (Neumann, 2004). Dichas marcas se denominaron AT para distinguirlas de los puntos GPS.

Los resultados se registraron por medio de fichas o cédulas de posicionamiento GPS por punto y línea, como las empleadas por el Instituto de Geografía y Estadística (INEGI) o el Instituto de Información Territorial del Estado de Jalisco (IITEJ) para la publicación de este tipo de información, pues según la Norma de Estándares de Exactitud Posicional, dependiendo de la exactitud obtenida se pueden integrar los puntos GPS a la Red Geodésica Nacional (Instituto Nacional de Estadística y Geografía, INEGI, 2010a).

3.2. Ejecución de la medición GPS.

Se establecieron catorce puntos GPS conformando 4 líneas de control azimutal, una poligonal de tres lados y cuatro puntos de control horizontal para apoyo terrestre fotogramétrico; todas estas marcas distribuidas de manera ponderada en el campus de CUCEI, dependiendo de las condiciones GPS del sitio, intervisibilidad y permanencia, ver distribución en figura no. 2.

En principio se consideró establecer estas marcas en azoteas de edificios, partes elevadas y suelo descubierto, por medio de marcas con clavo de concreto o tornillo y rondana, varillas y en su caso por medio de placas metálicas grabadas (Mena Berrios, 2008). Se midió la totalidad de las marcas GPS establecidas de esta manera por el método GPS Estático (Hofmann-Wellenhof, 2001), con tiempos mínimos de dos horas para puntos de liga con la RGNA y de una hora para la estructura interna de la red (líneas base principales y secundarias), cuidando que se formaran ligas dobles y triples; se procuró incluir las marcas existentes en el campus, como el banco de nivel ubicado fuera de Rectoría y otro similar ubicado a un costado de la entrada de Ciencias Químicas. Al final del operativo se establecieron siete puntos a nivel de piso o en mojoneras preestablecidas, y siete sobre mojoneras de cemento o pegazulejo (por sus cualidades de fraguado sin fisuras e impermeabilidad) construidas en azoteas de varios de los edificios de CUCEI, según se detalla en la tabla no.1.

Se efectuó la medición en el lapso de los días julianos 328 y 329 de 2015 (Hofmann-Wellenhof, 2001) midiendo el primero las marcas GPS y BN y el segundo día se midieron los puntos de AT; se utilizó el banco de nivel ubicado en la entrada de Proulex – Rectoría como la referencia de nivel para darle posteriormente un nivel ortométrico a la red.

Los equipos GPS empleados fueron dos de la marca TOPCON modelo GR3 de dos bandas con precisión post-proceso en horizontal: 3mm + 0.5ppm y vertical: 5mm + 0.5ppm; dos equipos THALES modelo ZMAX de dos bandas con precisión post-proceso en horizontal: 10mm + 1.0ppm y vertical: 20mm + 1.0ppm; y dos equipos ASTECH modelo PROMARK 3 de una banda con precisión post-proceso en horizontal: 10mm + 1.0ppm y vertical: 20mm + 1.0ppm, según se detalla en las especificaciones técnicas de cada equipo.

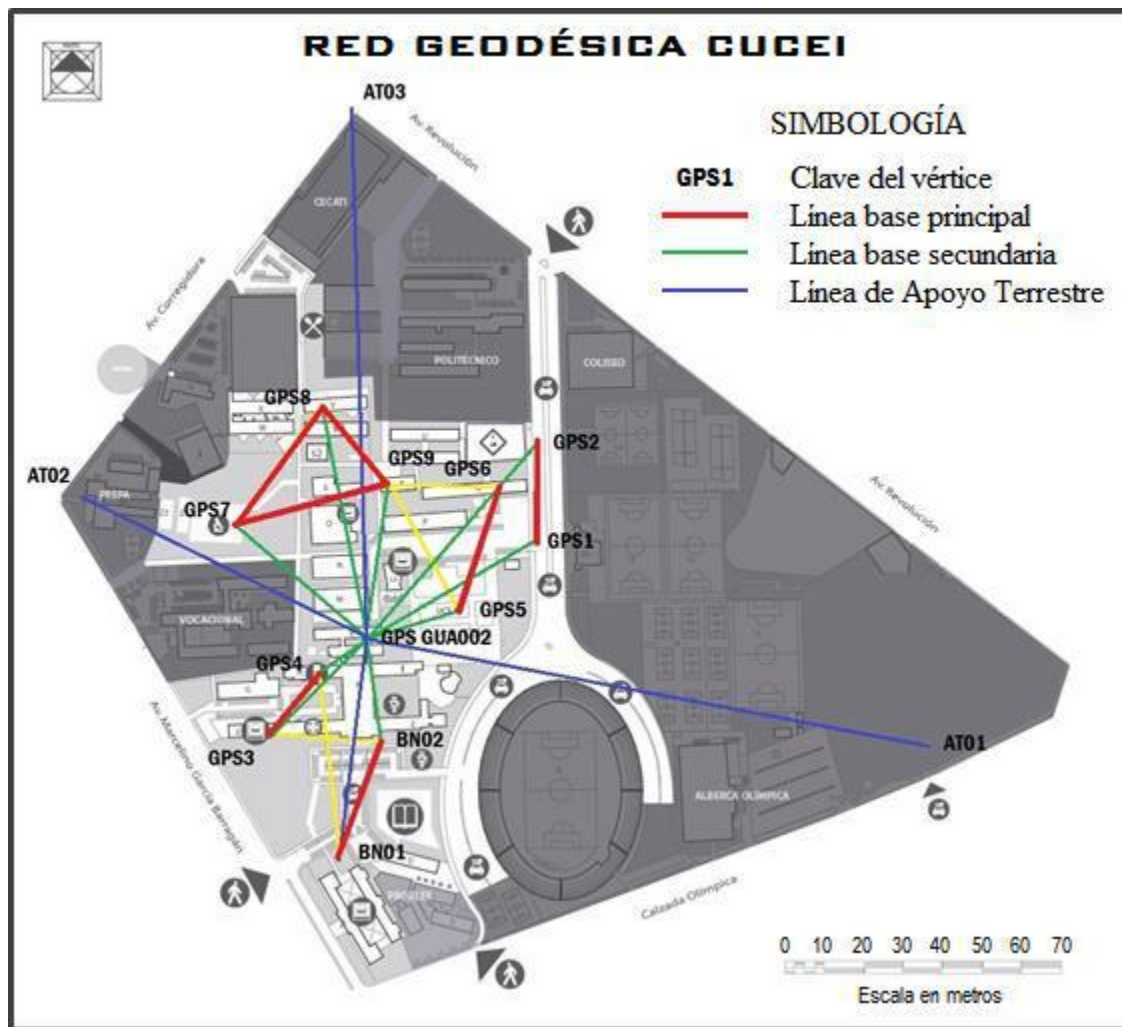


Figura 2.- Red Geodésica del campus CUCEI.

Tabla 1.- Lista de marcas o vértices GPS de la red geodésica CUCEI

CLAVE DE LA MARCA GPS	UBICACIÓN	DESCRIPCIÓN
GPS GUA002	Azotea entre edif. J y F	Placa metálica en mojonera
GPS1	Costado de la entrada de Ingeniería	Placa metálica a nivel de piso
GPS2	Calle de ingreso a Ingeniería	Placa metálica a nivel de piso
GPS3	Azotea edif. E	Tornillo con rondana en mojonera
GPS4	Azotea edif. H	Clavo con rondana en mojonera
GPS5	Azotea edif. Alfa	Tornillo con rondana en mojonera
GPS6	Azotea edif. Q	Tornillo con rondana en mojonera
GPS7	Azotea edif. Lab.	Tornillo con rondana en mojonera
GPS8	Azotea edif. V	Tornillo con rondana en mojonera
GPS9	Azotea edif. R	Tornillo con rondana en mojonera
BN01 (AT04)	Entrada de Proulex - Rectoría	Tornillo en mojonera
BN02	Entrada de Ciencias Químicas	Tornillo en mojonera

AT01	Caseta en estacionamiento	Marca en tapa de concreto
AT02	Entrada a Esc. Preparatoria no. 12	Marca en esquina de piso
AT03	Calle Corregidora y Av. Revolución	Marca en esquina de piso



Figura 3.- Diversas escenas del operativo de medición: (1) BN01 frente a Rectoría; (2) BN02 empotrado en mojonera rectangular de concreto; (3) vértice GUA002 perteneciente a la Red Geodésica Estatal, base de la medición con la RGNA; (4) Mojonera tipo de la red geodésica CUCEI.

3.3. Proceso de los datos.

Se efectuó el procesamiento y control de calidad de los datos mediante el programa de proceso de archivos de medición estática GPS denominado GNSS Solutions, ver. 3.60.1., donde se integraron los archivos resultantes de la medición. Se revisaron y validaron los archivos y se procesaron en conjunto con los archivos correspondientes en horario y día juliano de las estaciones fijas de la RGNA, en particular las estaciones COL2, INEG, UGTO y UQRO, obteniéndose vectores de liga que fueron calificados según se fueron procesando. No se contó con los archivos de la estación fija IITJ, pues el sistema de distribución de sus datos se encuentra en proceso de actualización, lo que implicó que los resultados del proceso tuvieran un Error Medio Cuadrático (RMS) mayor al esperado, aunque dentro de la tolerancia determinada para este tipo de proyectos según la NOM aplicable (Instituto Nacional de Estadística y Geografía, INEGI, 2010a), que es dentro del rango de 5 decímetros. Los puntos no aceptables en el proceso

se ponderaron y fueron reprocesados o reposicionados según su importancia dentro de la estructura de la red.

Los resultados de proceso de la red se muestran en la tabla 2. Cabe señalar que se verificó con las autoridades del Gobierno del Estado de Jalisco la disponibilidad de la información correspondiente al horario y día juliano de la medición de la estación IITJ, con lo cual se podrá efectuar una actualización de las coordenadas para obtener una precisión mayor, dentro de un rango esperado de 2 decímetros, que es la calidad, por ejemplo, del punto GUA002 y de muchos de los vértices de la Red Geodésica Estatal.

Tabla 2.- Lista de marcas o vértices GPS de la red geodésica CUCEI

CLAVE DE LA MARCA GPS	Latitud	Longitud
GPS1	20°39'26.281"N	103°19'27.722"W
GPS2	20°39'28.055"N	103°19'27.878"W
GPS3	20°39'19.703"N	103°19'37.526"W
GPS4	20°39'21.694"N	103°19'35.417"W
GPS5	20°39'23.247"N	103°19'30.166"W
GPS6	20°39'27.432"N	103°19'28.670"W
GPS7	20°39'26.301"N	103°19'38.439"W
GPS8	20°39'29.760"N	103°19'35.106"W
GPS9	20°39'27.551"N	103°19'32.854"W
BN01 (AT04)	20°39'16.464"N	103°19'33.352"W
BN02	20°39'19.612"N	103°19'32.803"W
AT01	20°39'20.362"N	103°19'14.752"W
AT02	20°39'26.928"N	103°19'43.116"W
AT03	20°39'39.272"N	103°19'34.766"W

4. RESULTADOS OBTENIDOS.

El resultado del proyecto fue la obtención de archivos de observación de señal de satélite simultáneamente en varios sitios, con lo que se pudo calcular la posición X,Y de los puntos y la Z referida al elipsoide del sistema GPS (Hofmann-Wellenhof, 2001) (Chou, 1990); este último valor se ajustó a la Z ortométrica por medio de la inclusión de un banco de nivel de segundo orden en la medición, verificando posteriormente esta altura por medio del GGM06. Los datos de la nivelación se publicarán en un nuevo proyecto de investigación pues se hará un operativo de nivelación de primer orden para darle más precisión a la red medida.

5. CONCLUSIONES.

5.1. Conclusiones

- La red geodésica obtenida cubre con los órdenes de alta precisión indicados en la Norma Técnica de Estándares de Exactitud Posicional para este tipo de proyectos, ajustando la mayoría de los resultados a 5 decímetros (Instituto Nacional de Estadística y Geografía, INEGI, 2010).

- Se podrá incluir la red generada en la base de datos geospaciales del Gobierno del Estado y en la Red Geodésica Nacional Pasiva pues los órdenes de precisión así lo permiten.
- La nivelación de la red geodésica se elevará a Primer Orden pues se efectuará la liga a un banco de nivel de esta calidad, pues aunque sea de alta precisión, la altura elipsoidal del GPS no es igual a la ortométrica, y es más adecuado entregar una nivelación ortométrica como dato final de la red.
- Se estableció como producto adicional un campo de pruebas metrológico, pues al establecer coordenadas precisas de los puntos GPS se tiene un modo de comparación para cualquier otro método topográfico, es decir, la red se puede medir para prácticas de estudiantes por medio de nuevas mediciones GPS o de Estación Total y los datos pueden ser validados al compararlos con las coordenadas originales (Mena Berrios, 2008).
- Se generó conocimiento para un grupo de estudiantes egresados en planeación, medición y proceso GPS, varios de los cuales presentarán este proyecto como tema de titulación.
- Se hizo la gestión para que una empresa privada estableciera en comodato una Estación Permanente de Corrección GPS con equipamiento de alta tecnología la cual brindará el servicio de señal correctora para GPS-RTK (GPS en tiempo real) por medio de información transmitida vía GSM (por medio de señal de telefonía celular) (Mena Berrios, 2008), lo que redundará en beneficio de la Universidad por tratarse de un servicio de alta modernidad. Queda pendiente el correspondiente trámite administrativo y legal para que esto se concluya.
- Se obtuvo una base de datos geoespacial del área de estudio, que podrá emplearse en posteriores proyectos en el campus de CUCEI, como medición y actualización del plano base del campus, proyectos de restitución fotogramétrica e incluso algún proyecto de monitoreo permanente por medio de Sistemas de Información Geográfica, además de medición por medio de drones o escáner láser.
- Los datos obtenidos se pondrán a disposición de la Autoridad Universitaria para su publicación y empleo por las diversas dependencias universitarias, y se puede ofrecer el servicio de instalar nuevas redes geodésicas en cada campus de la Universidad de Guadalajara.

5.2. Discusión

- La ejecución de este proyecto fue efectuada por personal calificado y por estudiantes o pasantes voluntarios, los cuales fueron capacitados en el empleo, cálculo e interpretación de resultados, lo cual enriquece el resultado pues funge como fuente de diversas ideas de mejora o de cooperación. Se ofreció que se tomen contenidos de esta investigación para formar recursos humanos y proyectos de titulación, los cuales se encuentran en ejecución en este momento.
- Debido a que el proyecto se ejecutó con equipo propio de la Universidad de Guadalajara y por personal de la misma, y que el elemento humano fue por medio de trabajo voluntario de estudiantes egresados o en el último semestre, los costos fueron mínimos, relativos sólo a la parte material del mismo, como materiales de oficina y de campo, como clavos, pintura y varillas, cemento, etc. En algunos casos se requirieron gastos para viáticos y gasolina.
- La nivelación de Primer Orden propuesta para dar al proyecto una altura ortométrica surgió debido a que no fue posible obtener el orden de precisión ni el registro válido de

cómo fue obtenida la altura del banco de nivel BN01 incluido en la medición de la red, lo que no permite tener certeza en el cálculo de la altura obtenida. Debido a que dentro del radio de 2 km de la red se encuentra un banco de nivel de Primer Orden perteneciente a la RGV, se propuso como proyecto agregado al presente la nivelación directa con nivel automático de la red, el cual se está ejecutando actualmente.

- Se deberá contemplar, si se recibe el equipamiento GPS entregado en comodato por una compañía privada para su función como Estación Permanente de Corrección GPS, de proporcionar por parte de la Universidad un sitio de establecimiento de la antena y del equipo, dotado de electricidad y línea de internet, entre otras condicionantes de funcionamiento propios de este tipo de estación, para lo cual se deberá contemplar la necesidad de establecer un contrato, convenio o la figura jurídica correspondiente, para el funcionamiento y permanencia de dicha estación, que redundará en beneficio de la Universidad de Guadalajara por tratarse de un sistema de vanguardia en el ámbito de la Ingeniería y de la Geomática.

6. BIBLIOGRAFÍA.

Chou, Y. L. (1990). *Análisis Estadístico*. México, D.F.: Mc Graw Hill.

Córdoba Narbona, G. (1985). *Geodesia, tomo 1*. La Habana, Cuba: Ed. Científico-Técnica.

Heywood, I., Cornelius, S., & Carver, S. (1998). *An Introduction to Geographical Information System*. New Jersey, USA: Prentice Hall.

Hofmann-Wellenhof, B. L. (2001). *Global Positioning System, Theory and Practice*. New York: Springer-Verlag Wien.

Instituto Nacional de Estadística y Geografía, INEGI. (2006). *Geoide Gravimétrico Mexicano 2006*. Obtenido de <http://www.inegi.org.mx>

Instituto Nacional de Estadística y Geografía, INEGI. (2010). *Norma Técnica del Sistema Geodésico Nacional* (23 de diciembre de 2010). México, D.F.: Diario Oficial de la Federación.

Instituto Nacional de Estadística y Geografía, INEGI. (2010a). *Norma Técnica de Estándares de Exactitud Posicional* (23 de diciembre de 2010). México, D.F.: Diario Oficial de la Federación.

Mena Berrios, J. B. (2008). *Geodesia Superior: Proyecciones Cartográficas y Geodesia Espacial* (Vol. 2). Madrid, España: Centro Nacional de Información Geográfica, Gobierno de España.

Neumann, K. (2004). Operational Aspects of Digital Aerial Mapping Cameras. *The International Archives of the Photogrammetry, Remote Sensing and Spatial Information Sciences, Vol. 34*(part. XXX), 222-225.

DISEÑO INNOVADOR DE COLECTOR PLUVIAL PARA MEJORAR EL SISTEMA DE ALCANTARILLADO PLUVIAL

GUTIÉRREZ CALVA, JAIME ARTURO⁽¹⁾, TREJO ACOSTA, MARIO ALCIDEZ⁽²⁾ & MÉNDEZ DE LOS SANTOS, NOEMI (MIPA)⁽³⁾

⁽¹⁾ Instituto Tecnológico de Villahermosa, Villahermosa, Tabasco, México, e-mail calva_champion@hotmail.com

⁽²⁾ Instituto Tecnológico de Villahermosa, Villahermosa, Tabasco, México, e-mail mtrejoa93@gmail.com

⁽³⁾ Instituto Tecnológico de Villahermosa, Villahermosa, Tabasco, México, e-mail mimilla6566@hotmail.com

RESUMEN:

“El calentamiento global ha causado alteraciones en el ciclo hidrológico; provocando en diversas regiones precipitaciones extraordinarias, Villahermosa registró en noviembre de 2013 lluvias que rebasaron en 117.16% y 213.2% en diciembre del mismo año la media histórica” (Korenfeld, 2014), resultando insuficiente el funcionamiento de colectores para el desalojo de aguas pluviales, parte de la problemática se debe a taponamientos causados por materiales finos que son arrastrados por la escorrentía y desechos sólidos que la ciudadanía deposita en las vialidades provocando encharcamientos que afectan a la población.

En esta investigación realizamos una inspección en la zona de estudio y rediseñamos la rejilla de dos colectores boca de tormenta obteniendo buenos resultados. Se diseñó una propuesta de colector agregando elementos en la infraestructura para evitar que los materiales finos y los desechos sólidos se introduzcan y entorpezcan el proceso de desalojo de aguas pluviales.

Palabras clave: Agua pluvial, colector, residuos

ABSTRACT:

“In recent years, global warming has caused alterations in the hydrological cycle, resulting in extraordinary rainfall presented in various regions of the world; Villahermosa City is not the exception, recording in November and in December 2013 exceeding rainfall of 117.16% and 213.2%, respectively” (Korenfeld, 2014). Storm-drain operating systems have resulted insufficient for the evacuation of rainwater, part of this problem is due to having blockages caused by fine materials found on the roads and solid waste that citizens irresponsibly dispose on the roads, causing flooding and affecting the population.

In this research, inspections of the study area were performed and also the grille of two storm drain systems were redesigned obtaining good results. A proposal was done to add collector elements in the infrastructure to prevent fine materials and solid waste entering these elements and obstructing the eviccion of rainwater.

Keywords: storm drain system, waste

7. INTRODUCCIÓN

“El crecimiento descontrolado de grandes ciudades alrededor del mundo representa una gran variedad de retos para la ingeniería, para satisfacer las necesidades de los habitantes y generar condiciones de seguridad” (González, 2014). Es por ello, que “un sistema de alcantarillado pluvial es un trabajo de ingeniería que busca la eficiencia y la economía, su función es el manejo, control y conducción de la escorrentía de las aguas de lluvia y llevarla a sitios donde no provoquen daños e inconvenientes a los habitantes de las ciudades” (SIAPA, 2014).

“Estas obras de ingeniería deben garantizar el rápido desalojo de las aguas de lluvia para evitar molestias, daños materiales y humanos debido a su acumulación o escurrimiento superficial. Su importancia se manifiesta especialmente en zonas con altas precipitaciones y superficies poco permeables” (CNA, 2007).

“Las aguas pluviales deben ser desalojadas eficaz y rápidamente. Es necesario promover y realizar la temporal retención superficial o subterránea para no incrementar el volumen y la velocidad de circulación del agua hacia las partes más bajas de una cuenca” (SIAPA, 2014).

Para finalizar, en esta investigación se presenta una propuesta de ingeniería, que permite mejorar el funcionamiento de los colectores pluviales rediseñando los actuales en la ciudad de Villahermosa, Tabasco, México, presentando además una nueva propuesta innovadora de este tipo de obra civil.

8. JUSTIFICACIÓN

La ciudad de Villahermosa Tabasco “cuenta actualmente con 600 hectáreas de la superficie urbana cubiertas por cuerpos de agua. Las cuales son receptoras de aguas pluviales, aunado a esto se han estado presentando inundaciones debido principalmente a que no se cuenta con un sistema de drenaje pluvial eficiente en su funcionamiento hidráulico y estructural capaz de coleccionar las aportaciones requeridas, afectando periódicamente a la población” (CNA, 2013). A esto se le debe sumar un mal común: los desechos, “en la ciudad de Villahermosa diariamente se recolectan 700 toneladas de basura, de esta cifra, 25 toneladas se trata de residuos sólidos que la ciudadanía arroja a las calles, entre estos figuran: envases de plástico, bolsas de frituras, empaques, latas, entre otros, representando el 3.5 por ciento del total es decir que por cada mil habitantes, se están generando al día un total de 40 kilos de desechos sólidos” (Fierro, 2015), “provocando se tapen los colectores pluviales durante las lluvias, generando encharcamientos en las principales vías y colonias” (Izquierdo, 2014).

Realizar una propuesta de rediseño para los colectores y construir a nivel experimental un prototipo innovador evaluando su eficiencia pluvial y estructural, es el logro más ambicioso de ésta investigación, ya que por sus características, el uso de los construidos actualmente no han demostrado un buen funcionamiento.

9. ANTECEDENTES

3.1. Nuevas tendencias en la gestión de drenaje pluvial en una cuenca urbana.

Recomiendan medidas estructurales para captar materiales finos suspendidos que favorecen la sedimentación (Rodríguez y Vergara, 2013).

3.2. Diseño de los sistemas de alcantarillado sanitario y pluvial, estación depuradora de aguas residuales (EDAR) para el centro de albergue, formación y capacitación juvenil Don Bosco-Loja.

Desarrollaron un sistema de alcantarillado mixto implementando un desarenador al fondo del colector, que no permita sedimentar los desechos sólidos y evitando el azolve de material fino (Banda y Bermeo, 2012).

3.3. La actividad humana y su impacto sobre los sistemas de drenaje urbanos. Estudio de caso: los desagües pluviales de la ciudad de Corrientes.

Afirman que la construcción de canchales y arborización logran captar parte de los desechos (Arce y Alberto, 2011).

3.4. Propuesta de diseño del drenaje pluvial, alcantarillado sanitario y planta de tratamiento para las aguas residuales del casco urbano y colonia “La Entrevista” del municipio San Cayetano Istepeque, departamento de San Vicente.

Usaron disipadores de energía para reducir la velocidad del agua ayudando a retener material sólido transportado (Antonio, García y Tobías, 2011).

3.5. Diseño de la red de alcantarillado sanitario y pluvial del corregimiento de la Mesa – César.

Destaca la necesidad de construir desarenadores ubicados de manera estratégica antes del ingreso de las aguas de lluvias a la red de colectores, para facilitar la captación de material granular y coloidal que la escorrentía superficial transporta (Padilla y Ayala, 2009).

10. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

¿Se podrá minimizar el impacto de las precipitaciones pluviales, rediseñando los colectores tipo boca de tormenta, utilizados en las redes de alcantarillado?

11. HIPÓTESIS

Al integrar desarenadores para captar materiales finos, adicionar una malla electrosoldada a la rejilla de acero y una canastilla para retener materiales sólidos, rediseñar y construir de forma prefabricada el cajón del colector a partir de métodos ingenieriles, garantiza su resistencia y desaloja de manera más eficiente el agua de precipitaciones pluviales.

12. OBJETIVOS

6.1. Objetivo general

Diseñar, analizar y evaluar un colector tipo boca de tormenta, empleando innovaciones capaces de minimizar los efectos de las precipitaciones pluviales.

6.2. Objetivos específicos:

6.2.1. *Diseño del colector: propuesta*

6.2.2. *Análisis aplicados al diseño del colector: (estructural, hidráulico e hidrológico)*

6.2.3. *Análisis de precios unitarios a los colectores propuestos*

6.2.4. *Construcción y evaluación del colector innovador*

13. MATERIALES Y METODOLOGÍA

Planteamiento de desarrollo, (Figura 1).



Fuente: Gutiérrez, Trejo y Méndez, 2015

Figura 1.- Diagrama de proceso del método utilizado en esta investigación

7.1. Fase 1: Diseño del colector

7.1.1. *Inspección de la zona de estudio: Avenida Mártires de Cananea, Col. Indeco, Villahermosa, Tabasco*

Se eligió una zona de estudio y se realizó una inspección, evaluando el estado actual de una muestra de colectores pluviales, identificando las causas que provocan su ineficiencia (Figura 2).



Fuente: Gutiérrez, Trejo y Méndez, 2015

Figura 2.- Inspección de los colectores ubicados en la Avenida Mártires de Cananea, colonia Indeco

Se evaluaron 16 colectores ya que la muestra estadística pide evaluar a 14, por esa razón se evaluaron el total de los existentes, tomando de referencia características geométricas ancho, largo y profundidad. Del total de los colectores monitoreados, el 100% presentó azolvamiento y taponamiento debido a materiales finos y residuos sólidos, el 50% tienen fallas en su infraestructura y un 15% socavamiento y destrucción parcial debido a la poca resistencia ante cargas de tránsito pesado, finalmente el 50% tuvo maleza dentro del colector.

7.1.2. Rediseño de dos colectores pluviales de la Avenida Mártires de Cananea

El 27 de mayo se realizó un mantenimiento preventivo a dos colectores, ubicados en el andador #4 y #5 de la avenida Mártires de Cananea, se retiraron todos los desechos sólidos (envases de PET, bolsas de nylon, bolsas de frituras, cartón, papel y hojas) y materiales finos; que se trasladaron al (ITVH) para su estudio y reinsertarlos en un humedal experimental, que actualmente tenemos en construcción, comprobando ampliamente las fallas estructurales (Figura 3).



Fuente: Gutiérrez, Trejo y Méndez, 2015

Figura 3.- Mantenimiento del colector y recolección de desechos.

La rejilla del colector se trasladó a un taller de soldadura para limpiarla y pintarla, con el propósito de evitar futuros taponamientos tomando como medida preventiva soldar una malla electrosoldada a la rejilla, para captar la mayor cantidad de desechos evitando su ingreso al colector (Figura 4).



Fuente: Gutiérrez, Trejo y Méndez, 2015

Figura 4.- Retiro, transporte e instalación de la rejilla rediseñada del colector.

7.1.3. Evaluación

El 2 de junio del año 2015, después de una precipitación media de 50mm, se realizó una inspección al colector rediseñándolo, ubicado en el andador #4 y se comprobó el funcionamiento de la malla electro soldada a la rejilla, observando que logró captar gran parte de los desechos sólidos. El 3 de julio, 37 días después de la instalación de la malla a la rejilla, se le realizó mantenimiento preventivo al colector del andador #4 comprobando el funcionamiento del rediseño ante las precipitaciones pluviales (Figura 5) ya que logró captar 3 kilogramos de residuos finos y 1 kilogramo de residuos sólidos (Figura 6).



Fuente: Gutiérrez, Trejo y Méndez, 2015

Figura 5.- Imagen superior tomada el 2 de junio; imagen inferior tomada el 3 de julio.



Fuente: Gutiérrez, Trejo y Méndez, 2015

Figura 6.- Muestra de los residuos captados por la rejilla rediseñada.

7.1.4. Diseño arquitectónico del colector

Se realizaron bosquejos para diseñar el colector utilizando el programa AutoCAD, se realizó de acuerdo a las medidas de colectores ya existentes. Proponiendo la reubicación de los desarenadores, colocándolos en la periferia del colector, para reducir el ingreso de sedimentos DT-NMX-Drenaje Pluvial (PROY-NMX-AA-168-SCFI-2012).

7.2. Fase 2: Análisis aplicados al diseño del colector

7.2.1. *Análisis estructural*

Se realizó un análisis estructural al cajón del colector pluvial mediante métodos ingenieriles para diseñarlo más resistente al tránsito vehicular. Con base en la norma vigente mexicana: Norma Técnica Complementaria para el Diseño y Construcción de Estructuras de Concreto Reforzado (NTC-2004).

7.2.2. *Análisis hidráulicos e hidrológicos*

Se determinó la precipitación pluvial, basada en datos estadísticos para el diseño del desarenador y cajón, indagamos estudios hidrológicos e hidráulicos determinando si podrá satisfacer la demanda pluvial y si las dimensiones son suficientes para captar los sólidos suspendidos arrastrados sobre las vialidades.

7.3. Fase 3: Análisis de Precios Unitarios

Para el análisis del precio unitario se consideró el precio de mercado de los materiales en la región sureste, los salarios reales tomados de la Secretaría de Trabajo y Previsión Social para la región B y finalmente el rendimiento de equipos y su costo horario.

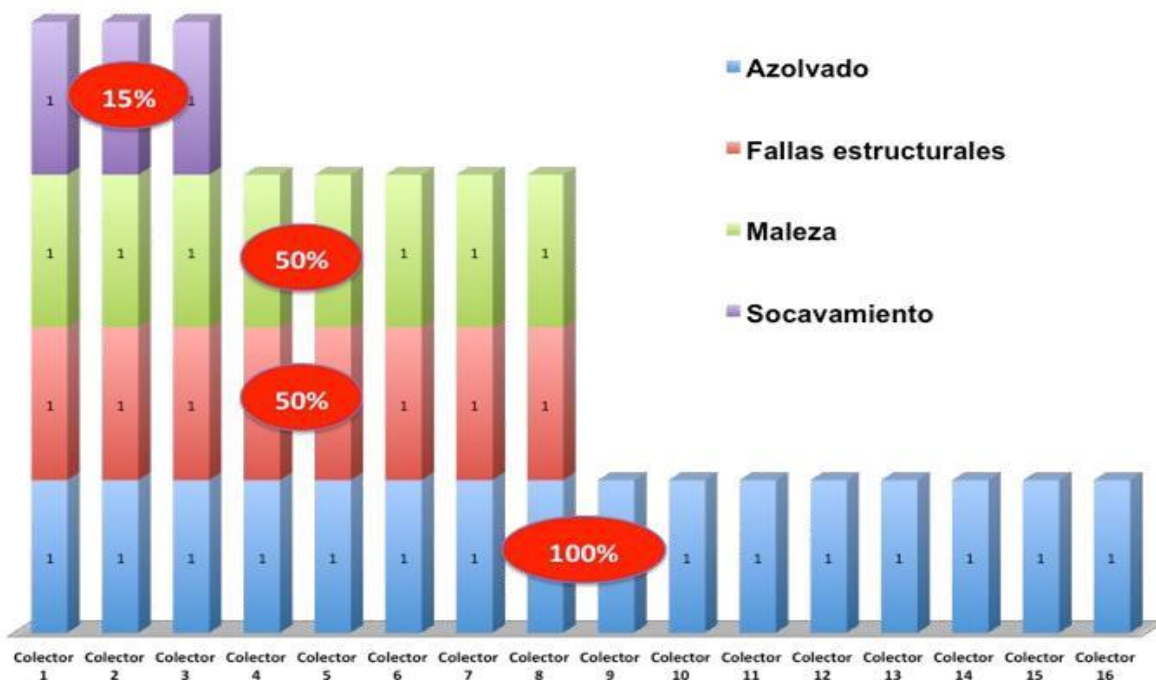
7.4. Fase 4: Construcción y evaluación del colector experimental

7.4.1. *Construcción y evaluación*

La construcción del colector propuesto se realizará de forma prefabricada, con el fin de una rápida instalación mejorando los procesos constructivos y así evitar retrasos en los tiempos de entrega de la obra (se medirá este parámetro). Actualmente estamos en espera de obtener financiamiento para la construcción del colector innovador desarrollado en esta investigación, con un proyecto financiado solicitado al Tecnológico Nacional de México.

14. RESULTADOS

8.1. Inspección de la zona de estudio (Figura 7).



Fuente: Gutiérrez, Trejo y Méndez, 2015

Figura 7.- Condiciones encontradas en los 16 colectores inspeccionados

El 100% de los colectores presentó asolvamiento y taponamiento debido a residuos finos y residuos sólidos, el 50% tiene fallas en su infraestructura, un 15% socavamiento y destrucción parcial, finalmente el 50% tuvo maleza dentro.

8.2. Evaluación de los colectores con rejillas rediseñadas. (Tabla 1 y Figura 8)

Tabla 1.- Volumen de RF y RS antes y después de agregar la rejilla rediseñada

Colector	Antes			Después		
	Volumen Total (m ³) 100%	Volumen de RF (m ³) 30%	Volumen de RS (m ³) 40%	Volumen Total (m ³) 100%	Volumen de RF (m ³) 15%	Volumen de RS (m ³) 5%
1	1.4535	0.4361	0.5814	1.4535	0.2180	0.0727
2	1.4535	0.4361	0.5814	1.4535	-----	-----

RF = residuos finos. RS = residuos sólidos.

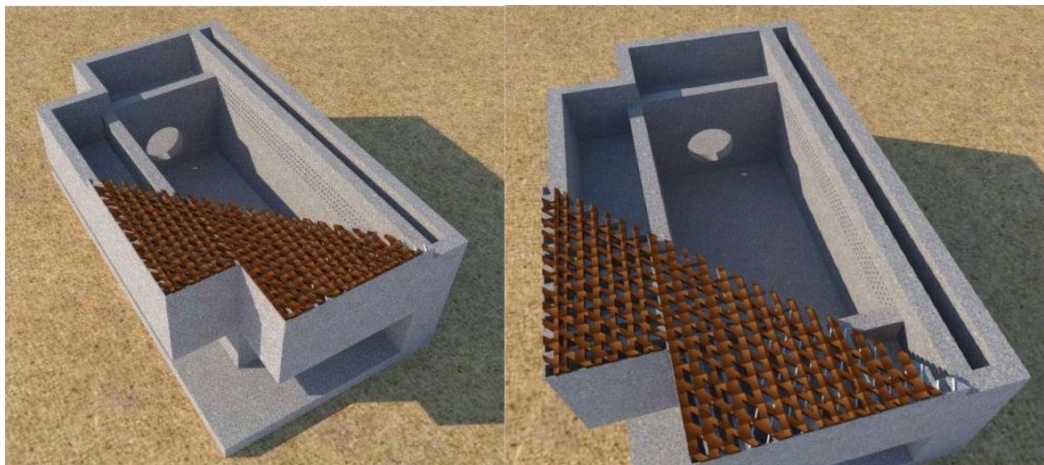
Fuente: Gutiérrez, Trejo y Méndez, 2015



Fuente: Gutiérrez, Trejo y Méndez, 2015

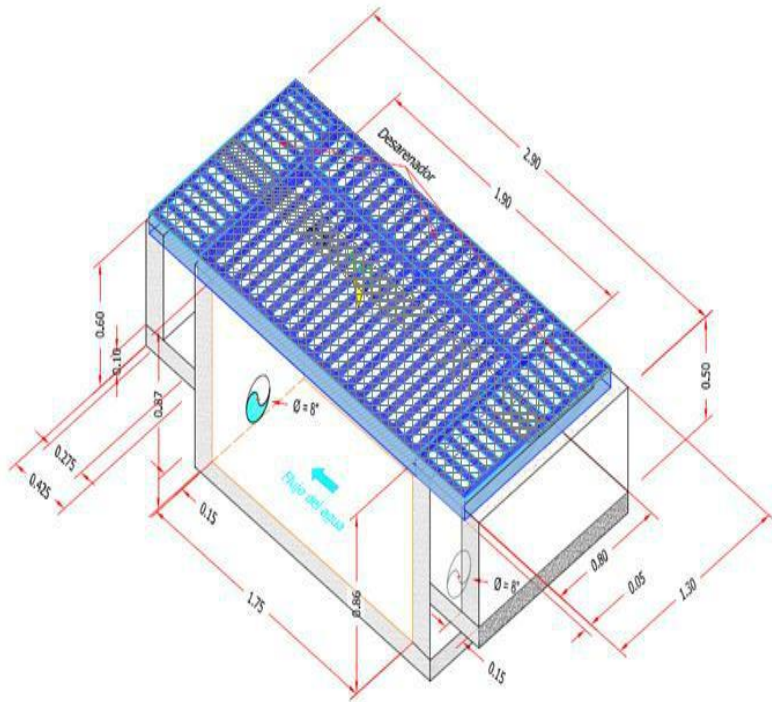
Figura 8.- Volumen de RF y RS antes y después de agregar la rejilla rediseñada

8.3. Propuesta de nuevo colector tipo boca de tormenta. (Figura 9, 10 y 11)



Fuente: Gutiérrez, Trejo y Méndez, 2015

Figura 9.- Vista isométrica del diseño del colector innovador



Especificaciones Constructivas:

Colector pluvial con desarenadores*, **canastilla** y tapa de rejilla de acero con malla electro soldada.

Cajón

- Medidas: 1.90x.90 m
- Profundidad: 85 cm

Desarenadores

- Medida 1: .40x.90x.60 m (2 desarenadores laterales)
- Medida 2: 1.90x.40x.60 m (1 desarenador longitudinal)

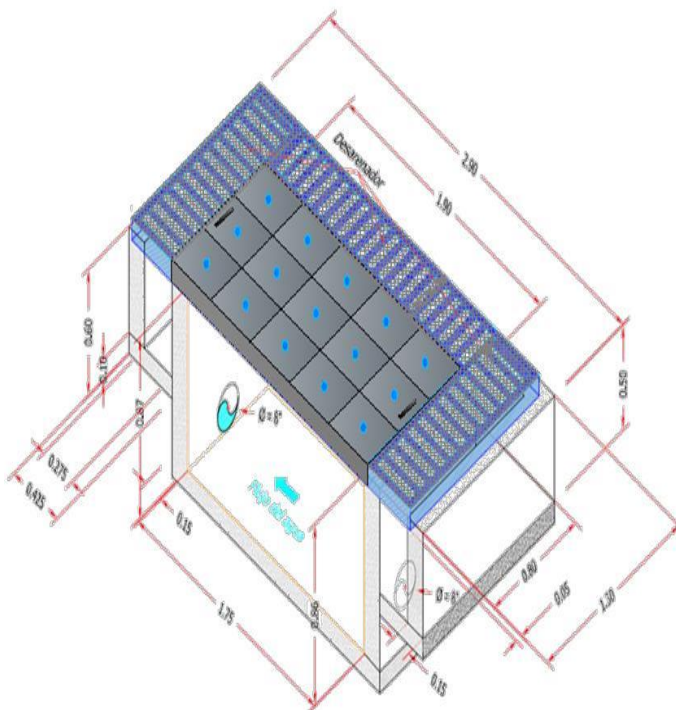
Canastilla

- Medida: 1.90x0.20x0.60 m

*El cajón principal y los desarenadores están contruidos con concreto reforzado normal Clase 1

Fuente: Gutiérrez, Trejo y Méndez, 2015

Figura 10.- Vista isométrica del diseño de colector innovador con tapa de acero.



Especificaciones Constructivas:

Colector pluvial con desarenadores*, **canastilla de acero**, tapa de losa de concreto* y tubería de PVC.

Cajón

- Medidas: 1.90x.90 m
- Peralte de la tapa: 10 cm
- Profundidad: 85 cm
- Diámetro tubería PVC 2", cantidad 15 (Losa concreto)

Desarenadores

- Medida 1: .40x.90x.60 m (2 desarenadores laterales)
- Medida 2: 1.90x.40x.60 m (1 desarenador longitudinal)

Canastilla

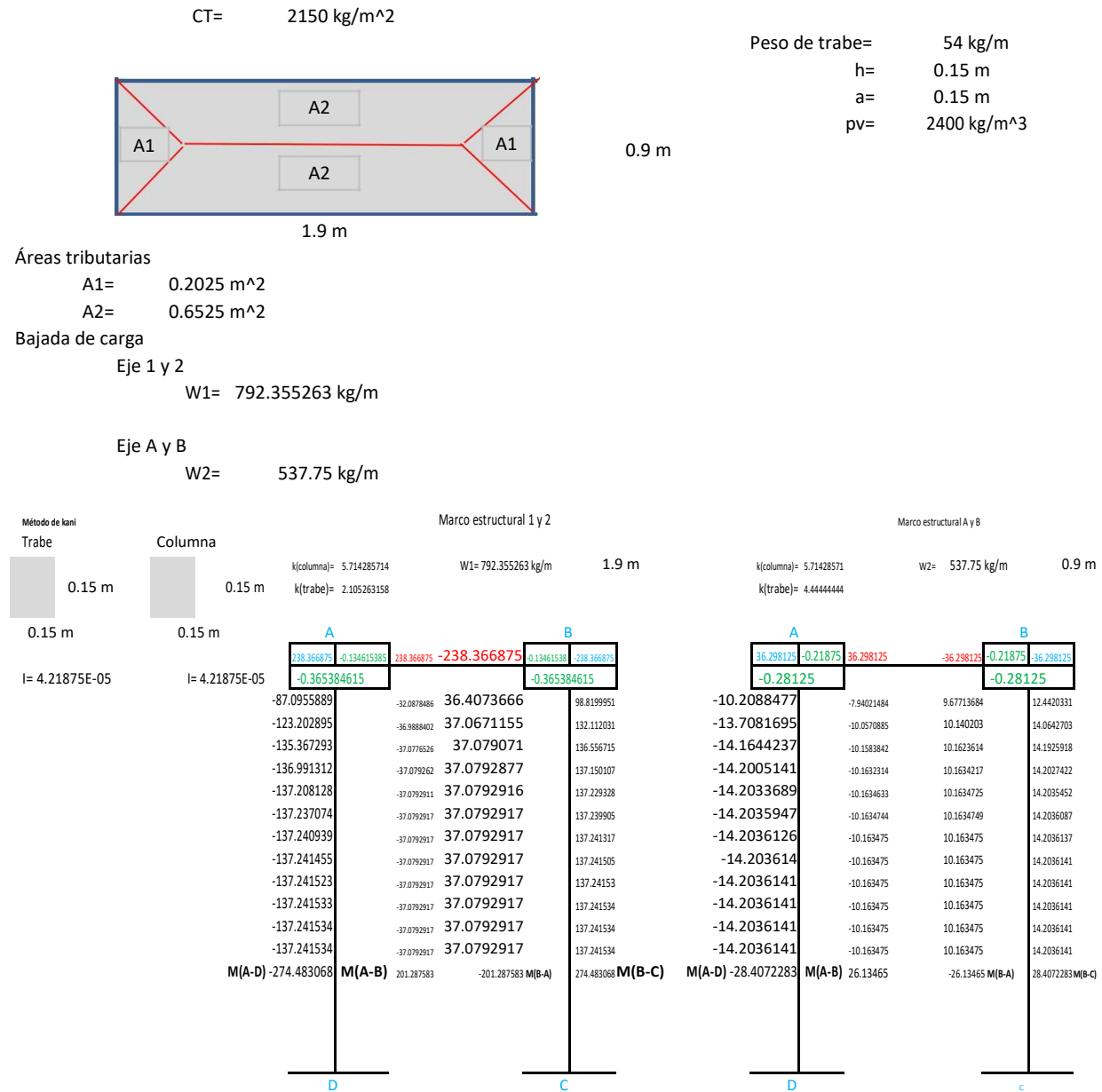
- Medida: 1.90x0.20x0.60 m

*El cajón principal, desarenadores y losa están contruidos con concreto reforzado normal Clase 1

Fuente: Gutiérrez, Trejo y Méndez, 2015

Figura 11. Vista isométrica del diseño de colector innovador con tapas de concreto.

8.4. Análisis estructural del colector propuesto (Figura 12 y 13)



Análisis de cortante y momento en corte longitudinal

Viga A-B
 Vi= 752.7375 KG
 Vh= 0 KG
 Va= 752.7375 KG
 Vb= -752.7375 KG
 x= 0.95 m
 M= -201.287583 kg.m
 Mmáx= 201.287583 kg.m

Diseño de viga longitudinal

Mu= 0.20128758 ton.m 20128.7583 kg-cm
 f'c= 250 kg/cm2
 fy= 4200 kg/cm2
 f*c= 200 kg/cm2
 f'c= 170 kg/cm2

CALCULO DE b,d y As

$$= \frac{0.20128758 \cdot 1000}{0.75 \cdot 4200} = 0$$

Calculo de β_1 =

$$= \frac{0.85}{1 + 0.004 \cdot 250} = 0.92857143$$

Como es >0.85 Beta 1 se considera como 0.85

Suponiendo Rho= 0.75

$$= 0.75 \cdot 0.92857143 = 0.69642857$$

Con el valor anterior entramos al Apéndice B

$$= \frac{20128.7583}{0.69642857} = 55.91$$

CALCULO DE PERALTE EFECTIVO

d= 8.96298142 cm

CONSIDERANDO UN RECUBRIMIENTO DE 5cm

H= 13.9629814 entonces 15 cm

Se propone una sección con la siguiente características

b= 10 cm
 h= 15 cm
 d= 10 cm

Análisis de cortante y momento en corte transversal

Viga A-B
 Vi= 241.9875 KG
 Vh= 1.57898E-14 KG
 Va= 241.9875 KG
 Vb= -241.9875 KG
 x= 0.45 m
 M= -26.13465 kg.m
 Mmáx= 28.3125375 kg.m

Diseño de viga transversal

Mu= 0.02613465 ton.m 2613.465 kg-cm
 f'c= 250 kg/cm2
 fy= 4200 kg/cm2
 f*c= 200 kg/cm2
 f'c= 170 kg/cm2

CALCULO DE b,d y As

$$= \frac{0.02613465 \cdot 1000}{0.75 \cdot 4200} = 0$$

Calculo de β_1 =

$$= \frac{0.85}{1 + 0.004 \cdot 250} = 0.92857143$$

Como es >0.85 Beta 1 se considera como 0.85

Suponiendo Rho= 0.75

$$= 0.75 \cdot 0.92857143 = 0.69642857$$

Con el valor anterior entramos al Apéndice B

$$= \frac{2613.465}{0.69642857} = 55.91$$

CALCULO DE PERALTE EFECTIVO

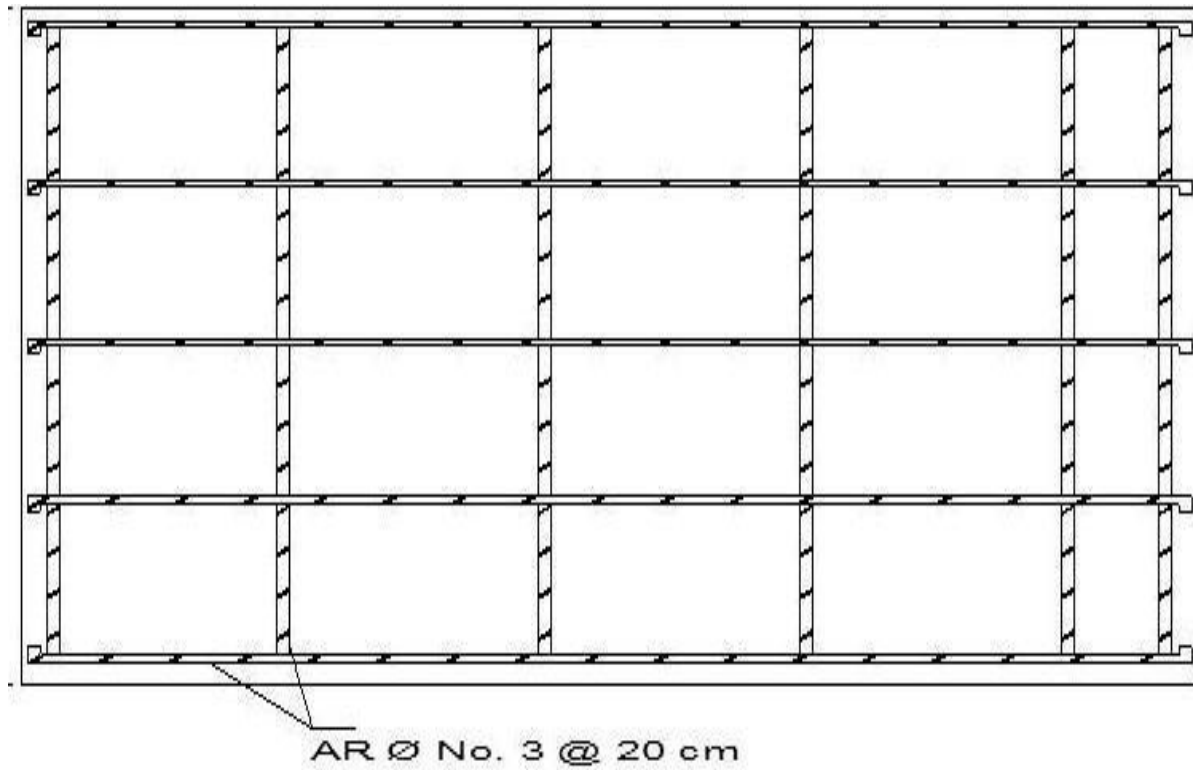
d= 4.53857027 cm

CONSIDERANDO UN RECUBRIMIENTO DE 5cm

H= 9.53857027 entonces 15 cm

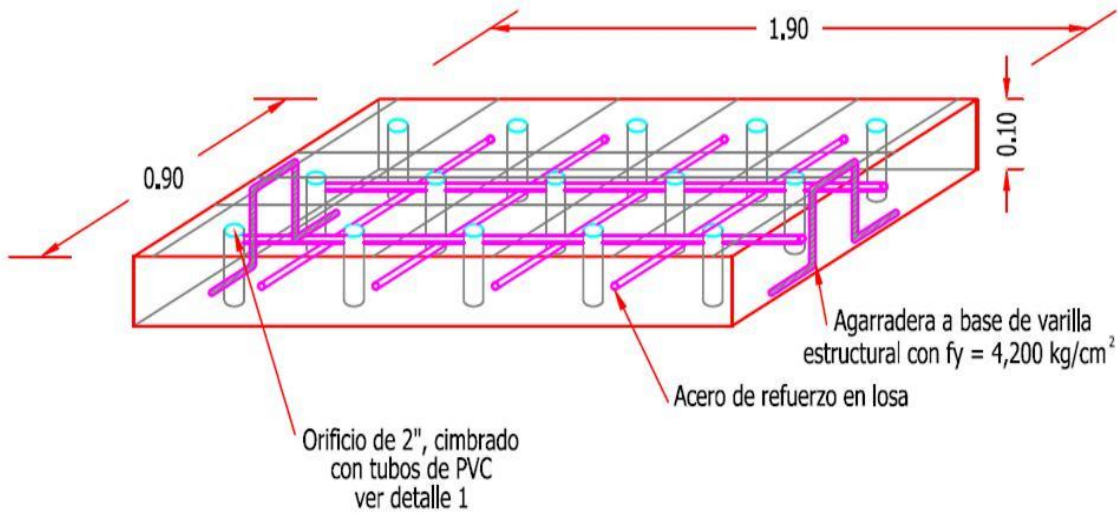
Se propone una sección con la siguiente características

b= 10 cm
 h= 15 cm
 d= 10 cm



Fuente: Gutiérrez, Trejo y Méndez, 2015

Figura 12. Vista y especificación de muro transversal y longitudinal del cajón prefabricado



Especificaciones Constructivas:

Tapa de losa de concreto y tubería de PVC.

- Medidas: 1.90x.90 m
- Peralte de la tapa: 10 cm
- Acero de refuerzo #3 $f_y=4,200 \text{ kg/cm}^2$
- Diámetro tubería PVC 2", cantidad 15 (Losa concreto)

Fuente: Gutiérrez, Trejo y Méndez, 2015

Figura 13. Dimensiones geométricas de tapa de concreto

8.5 Análisis hidráulico e hidrológico

Medidas del colector:

Cajón principal:

Largo= 1.90 m.
Ancho= 0.90 m.
Profundidad= 0.85 m.
Volumen= **1.45 m³.**

Desarenador lado largo:

Largo= 1.90 m.
Ancho= 0.40 m.
Profundidad= 0.60 m.
Volumen= **0.46 m³.**

Desarenador lado corto:

Largo= 0.90 m.
Ancho= 0.40 m.
Profundidad= 0.60 m.

Medidas efectivas restando espesor de muros

Largo= 1.74m.
Ancho= 0.74m.
Profundidad= 0.77m.
Volumen= **0.99m³.**

Medidas efectivas restando espesor de muros

Largo= 1.74m.
Ancho= 0.24m.
Profundidad= 0.52m.
Volumen= **0.22m³.**

Medidas efectivas restando espesor de muros

Largo= 0.74m.
Ancho= 0.24m.
Profundidad= 0.52m.

$$\text{Volumen} = 0.22 \text{ m}^3.$$

$$\text{Volumen} = 0.09 \text{ m}^3.$$

Volumen de azolvamiento encontrado en un colector monitoreado con 34 centímetros de azolvamiento en infraestructura

$$\text{Largo} = 1.74 \text{ m.}$$

$$\text{Ancho} = 0.74 \text{ m.}$$

$$\text{Profundidad} = 0.34 \text{ m.} \quad \text{Esta altura representa el 40\% de la profundidad del}$$

$$\text{Volumen} = 0.44 \text{ m}^3. \quad \text{colector}$$

Volumen de azolvamiento encontrado en un colector monitoreado 37 días después de desazolvarlo con solo 4.25 centímetros de azolvamiento

$$\text{Largo} = 1.74 \text{ m.}$$

$$\text{Ancho} = 0.74 \text{ m.}$$

$$\text{Profundidad} = 0.0425 \text{ m.} \quad \text{Esta altura representa el 5\% de la}$$

$$\text{profundidad Volumen} = 0.05 \text{ m}^3. \quad \text{del colector}$$

Capacidad de volumen de azolvamiento de los desarenadores

$$\text{perimetrales Volumen total} = 0.40 \text{ m}^3.$$

Tomando de referencia el volumen de azolvamiento a los 37 días después del desazolve, realizamos una proyección de azolvamiento total de los desarenadores

$$\begin{array}{l} \text{Azolvamiento} = 0.05 \text{ m}^3. \quad \longrightarrow \quad 37 \quad \text{Días después de} \\ \text{Volumen total} = 0.40 \text{ m}^3. \quad \longrightarrow \quad X \quad \text{desazolvarlo} \\ \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \text{Días para azolvamiento} \\ \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \quad \text{total} \end{array}$$

$$X =$$

$$272$$

En aproximadamente estos días se azolvarían en su totalidad los desarenadores.

8.6. Análisis de precios unitarios (Tabla 2 y 3)

Tabla 2.- Costos de la propuesta y rediseño de rejilla

Mantenimiento correctivo de colector boca de tormenta con implementación de tapa de rejilla con malla electrosoldada.		Colector pluvial boca de tormenta con desarenadores y tapa de rejilla con malla electrosoldada.	
Concepto	Importe	Concepto	Importe
Materiales	\$ 2473.35	Materiales	\$ 15,919.16
Mano de obra	\$ 428.58	Mano de obra	\$ 700.00
Equipo (herramienta)	\$ 55.74	Equipo (herramienta)	\$ 56.00
Costo directo	\$ 2957.66	Costo directo	\$ 16,675.16
Costo indirecto (15%)	\$ 443.65	Costo indirecto (15%)	\$ 2,501.27
Financiamiento (5%)	\$ 170.07	Financiamiento (5%)	\$ 958.82
Utilidad (12%)	\$ 428.57	Utilidad (12%)	\$ 2,416.23
Adicionales (3%)	\$ 120.00	Adicionales (3%)	\$ 676.54
Precio Unitario	\$ 4,119.94	Precio Unitario	\$ 22,228.03

Fuente: Gutiérrez, Trejo y Méndez, 2015

Tabla 3. Precio Unitario de SOINT-DRM

SOINT-DRM				
ESPECIFICACION: Colector pluvial con desarenadores y tapa de rejilla con malla electrosoldada. Cajón con medidas de 1.90x.90 m, con una profundidad de 85 cm. Desarenadores: 1 de .90x.40 m y 2 de 1.90x.40 m y profundidad para ambos de 60 cm.				
CONCEPTO	UNIDAD	CANTIDAD	PRECIO	IMPORTE
MATERIALES				
Rejilla con tapa electrosoldada de 1.90x.90 m	Pieza	1.0000	\$ 7,000.00	\$ 7,000.00
Cimentación de concreto $f'c=250 \text{ kg/cm}^2$	m^3	0.0900	\$ 2,442.56	\$ 219.83
Muros de 8 cm de espesor de concreto reforzado con columnas ahogadas con $f'c 250 \text{ kg/cm}^2$	m^3	0.3600	\$ 2,442.56	\$ 879.32
Desarenador de .90x.40x.60 m	Pieza	2.0000	\$ 2,340.48	\$ 4,680.97
Desarenador de 1.90x.40x.60 m	Pieza	1.0000	\$ 3,139.04	\$ 3,139.04
MANO DE OBRA		JORNAL	(1/REND)	S. REAL
4 peones + 1oficial albañil+1oficial herrero. Rend. = 2 Pieza	Jornal	0.5000	\$ 1,400.00	\$ 700.00
MAQUINARIA Y EQUIPO		C.H		
HERRAMIENTA Y EQUIPO DE SEGURIDAD		%	8.00	(3,5)
				\$ 56.00
OBSERVACIONES		TOTALES		
		MATERIALES		\$ 15,919.16
		MANO DE OBRA		\$ 700.00
		EQUIPO		
		HERRAMIENTA		\$ 56.00
		COSTO DIRECTO		\$ 16,675.16
		COSTO INDIRECTO (15%)		\$ 2,501.27
		FINANCIAMIENTO (5%)		\$ 958.82
		UTILIDAD (12%)		\$ 2,416.23
		ADICIONALES (3%)		\$ 676.54
		PRECIO UNITARIO		\$ 23,228.03

Fuente: Gutiérrez, Trejo y Méndez, 2015

15. DISCUSIÓN

De los antecedentes consultados, concordamos con (Rodríguez y Vergara, 2013) en implementar los desarenadores como medidas estructurales que faciliten la captación de materiales finos y estamos 100% de acuerdo con (Padilla, 2009) que estas medidas se ubiquen estratégicamente antes de la entrada de los colectores pluviales, es por esto que no sugerimos la ubicación que le dio (Banda y Bermeo, 2012) a su propuesta. Afirmando que al estar previos al colector principal los desarenadores y canastilla facilitarían la limpieza y desazolve, para reducir el taponamiento de los albañales de conducción.

16. CONCLUSIONES

El implementar la malla a la rejilla evitó el ingreso del 95% de desechos sólidos, sin embargo los materiales finos se seguían introduciendo, es por eso que se desarrolló una propuesta agregando desarenadores en la periferia del colector para los desechos finos y una canastilla para retener los residuos sólidos.

17. RECOMENDACIONES

El desazolve de los colectores pluviales se debe realizar por lo menos dos veces al año, antes de la temporada de lluvias y después de estas; con la finalidad de que estas obras de desagüe operen de manera eficiente.

Retirar de la superficie superior de las rejillas los desechos sólidos gruesos así como del interior de la canastilla; con el objetivo de dejar despejado el cajón principal para que el desalojo sea más rápido y no se presenten taponamientos superficiales.

Aproximadamente cada seis meses desazolvar el interior de la infraestructura, lo cual consiste en retirar el material sólido fino arrastrado por la escorrentía pluvial, que se sedimenta en el fondo de esta obra de desagüe y que en grandes acumulaciones de este material provocan taponamientos de los albañales de desagüe.

Al realizar mantenimientos preventivos también es indispensable dar tratamiento a la rejilla de acero, esto con la aplicación de pintura epóxica, la cual reduce la corrosión de la rejilla.

12. REFERENCIAS

12.1 Literatura citada

- Antonio Carpio, Henry; García Sigaran, Neydy Carolina; Tobías Hernández, Kenny Christian.** (2011) *“Propuesta de diseño del drenaje pluvial, alcantarillado sanitario y planta de tratamiento para las aguas residuales del casco urbano y colonia la entrevista del municipio san cayetano istepeque, departamento de San Vicente”*. Universidad de El Salvador.
- Arce, Guillermo Antonio; Alberto, Jorge Alfredo.** (2011) *“La actividad humana y su impacto sobre los sistemas de drenaje urbanos. Estudio de caso: los desagües pluviales de la ciudad de corrientes”*. Revista Geográfica Digital. IGUNNE. Fac. de Hum. UNNE. Año 8. N° 16. Julio – Dic. 2011. ISSN 1668-5180 Resistencia, Chaco.
- Banda Quezada, Segundo Gabriel; Bermeo Castillo, Lorena Elizabeth.** (2012) *“Diseño de los sistemas de alcantarillado sanitario y pluvial, estación depuradora de aguas residuales (EDAR) para el centro de albergue, formación, y capacitación juvenil de la fundación Don Bosco - Loja”*. Universidad Técnica Particular de Loja.
- Padilla Santamaría, Mayra Alejandra; Ayala Villarraga, Mauricio.** (2009) *“Diseño de la red de alcantarillado sanitario y pluvial del corregimiento de la Mesa – Cesar”*. Universidad de La Salle.
- Rodríguez Sánchez, Jorge; Vergara González, Eliseo Pablo.** (2013) *“Nuevas tendencias en la gestión de drenaje pluvial en una cuenca urbana”*. Universidad de La Rioja.

12.2 Bibliografía

- Comisión Nacional del Agua (CNA).** (2007) *Manual de agua potable, alcantarillado y saneamiento*. ISBN: 978-968-817-880-5
- Comisión Nacional del Agua. (CNA)** (2013) *Diagnósticos de la infraestructura física de los sistemas de agua potable, alcantarillado sanitario y pluvial de las principales zonas urbanas del estado de Tabasco*. (Licitación No.: IO-016B00988-N13-2013)
- Hernández Sampieri, Roberto.** (1997) *“Metodología de la Investigación”*. Editorial McGRAW - HILL Interamericana de México, S.A. de C.V.

Normas técnicas complementarias. NTC-(2004) para: Diseño y construcción de estructuras de concreto.

Proyecto de Norma Mexicana (PROY-NMX-AA-168-SCFI-2012). *Drenaje Pluvial Urbano – Especificaciones para el manejo del agua pluvial en zonas urbanas.*

SIAPA, 2014. *Lineamientos Técnicos para Factibilidades de alcantarillado pluvial.*

Suárez Salazar, Carlos. (2008) “Costos y tiempo en edificación”. Editorial Limusa.

12.3 Ligas de internet

Fierro Flores, Leopoldo. (2015) “*Tiran al día 25 toneladas de basura en calles de Centro*”. Por Arnulfo de la Cruz, <http://www.tabascohoy.com/2/notas/index.php?ID=247931>, consultado al inicio de la investigación, mayo 2015.

Izquierdo Coffin, Jaime. (2014) “*Lluvias dejan encharcamientos en Villahermosa, Tabasco*”. Notimex. <http://www.unotv.com/noticias/estados/sureste/Lluvias-dejan-encharcamientos-en-Villahermosa-Tabasco-774724/>. consultado al inicio de la investigación, mayo 2015.

SELF-REGULATED SYSTEM **OF PREVENTIVE RESETTING OF FLOOD WATERS**

MARIA KROKIS⁽¹⁾, VICTOR KOLDUN⁽²⁾

⁽¹⁾ Lviv Technologic Lyceum, Lviv, Ukraine krokis2000@mail.ru

⁽²⁾ Lviv Technologic Lyceum, Lviv, Ukraine victorkoldun@gmail.com

SUMMARY

The instability of the climate has always been a major civilization problem. Especially considering the fact that the world population has been growing steadily and people just have no other choice but to settle in the new, more dangerous places in which water supply can dramatically flood them. Therefore, the issue of flood protection is becoming more and more acute and urgent.

The project offers a fundamentally new method of combating floods by deepening river beds in places with small slope bottom. River bed is overlapped by the controllable rifts at the very bottom, so that deepening of the beds does not change the hydrological regime of the river. By setting the parameters of shoals opening and closing, one can, in a wide range, maintain the bandwidth of the beds and stable level of water regardless the atmospheric precipitations. The offered method, which was experimentally tested at several working models of river bed, has shown high efficiency in almost all proportions of depth and width and slopes of the river bottom.

Adjustable rift is basically a regular gateway, which overlaps only the lower part of the river. The degree of the rift opening is set by a float on the surface of the river. Such a rift will be made of the same materials and by the same technology as all the other hydraulic structures. According to preliminary estimations of costs the deepening of the river and its equipment with controllable rifts will be commensurate with constructing several bridges across the river.

The project is economically feasible and environmentally neutral. Disposable funds for the creation of engineering system of preventive flood protection will pay off within a few years.

1. RELEVANCE OF THE PROBLEM

The population of the planet is growing steadily, people are forced to settle in places that are flooded during the pouring of the water. So the issue of flood protection is becoming more and more urgent and relevant, what one can hear on TV news almost every day.



Figure 1. Flood

Certainly, the humanity has been struggling with floods for centuries by building the protective dams. However, this protection has serious drawbacks as dams take up a large land area and hinder the other communications. The main drawback of the existing hydraulic engineering constructions is that their real strength can be assessed only by flooding. As soon as the flood water breaks through the dam in at least one place, it all turns into aimless waste of money.

2. WHAT THE IDEAL SOLUTION OUGHT TO BE?

Obviously, if we had a system of high bandwidth channels, a kind of global continental sewerage from our cities directly to the world ocean (Fig. 2), we could dump all the excess water through them.

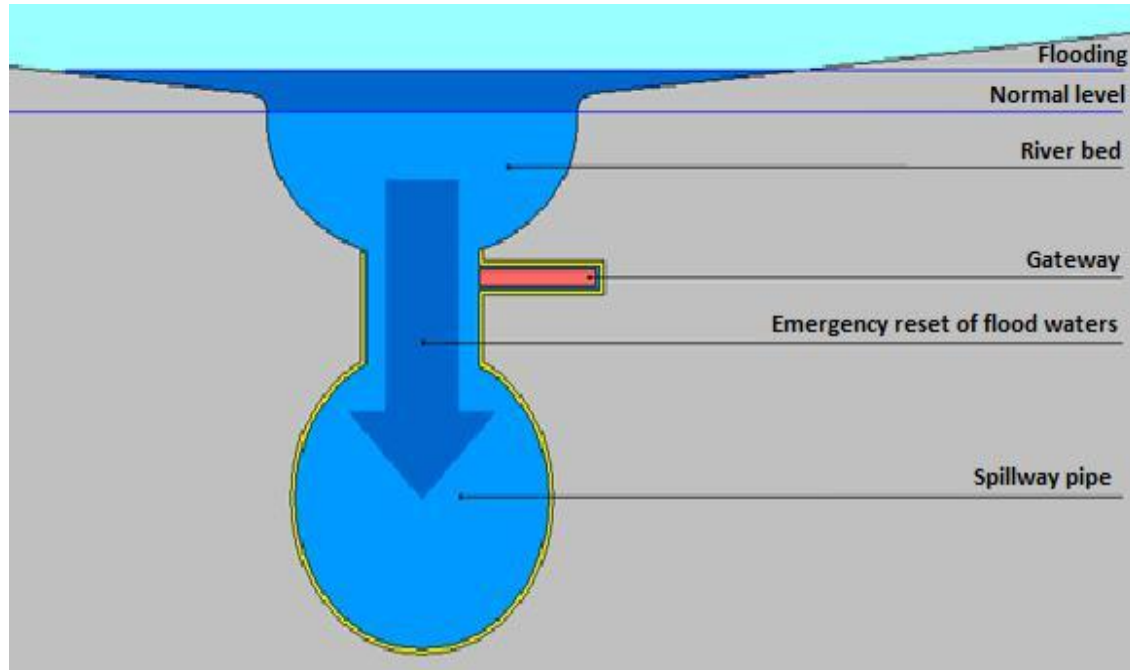


Figure 2. Resetting of flood waters through a network of global sewerage collectors.

But such technical solution is too expensive so far.

3. HOW TO GET CLOSER TO IDEAL?

To lay the global sewerage collectors in the places where they will cause the least harm while pending. And also to do their laying and subsequent maintenance on the least costly way.

If you look closely, you could see that the river beds meet such conditions – they are directed towards the ocean (or, sometimes, towards a large inland lake). And the laying of global sewerage collectors along the bottom of rivers will minimally affect the environment and civilizational communications.

4. A WORKING HYPOTHESIS OF THE PROJECT

Deepening the existing river bed and arrangement of artificial rifts will maintain the set water level that is almost not dependent on rainfall.

And, importantly, we need to deepen not the whole bed, but only its most sloping areas (Fig. 3).

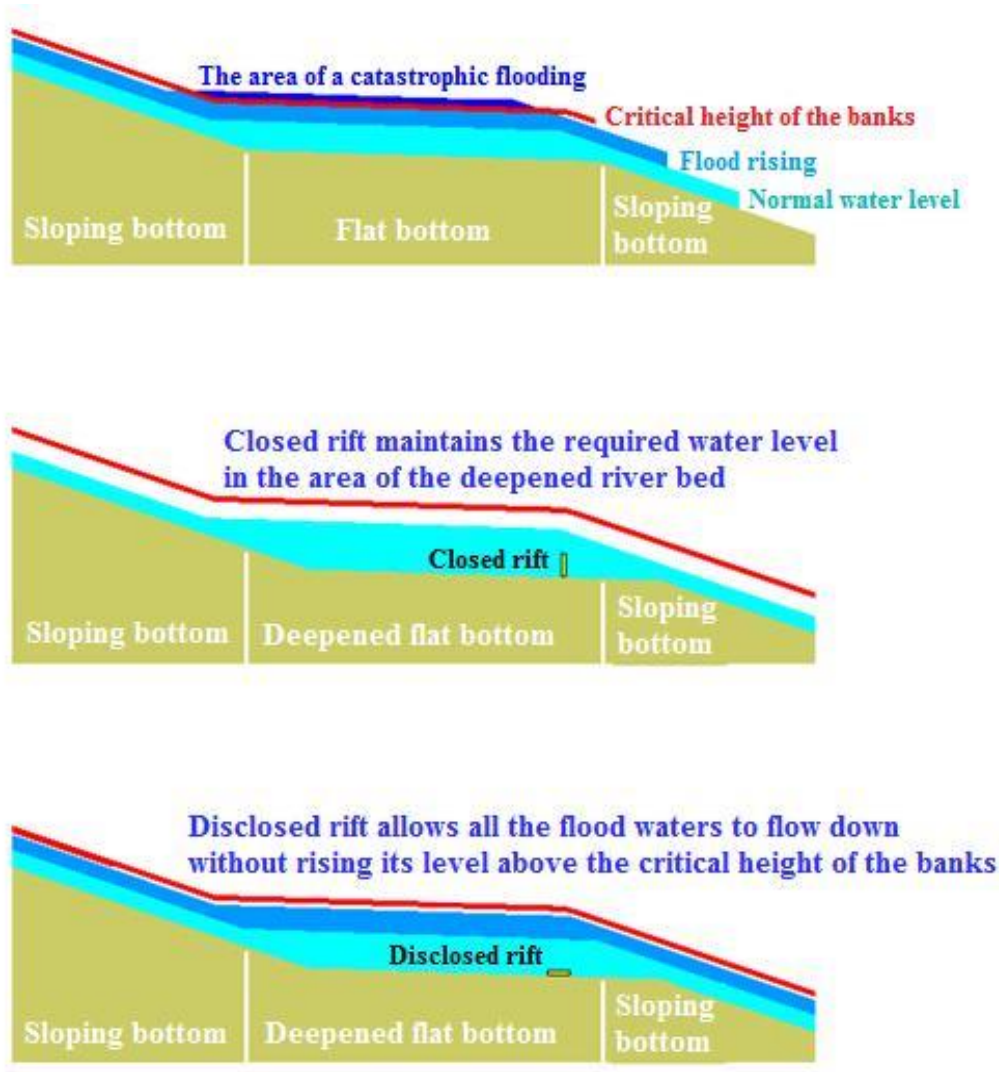


Figure 3. Diagram of locations where there is a real need of deepening the bottom of the rivers to prevent flood.

5. THE MATERIALS AND OF THE RESEARCH

The review of the literature, studies the most common methods of combating floods. A patent search to identify ideas that have been implemented at one time due to the lack of means to implement them. Indeed, the authors of patents and patent applications are usually interested only in search for methods and devices to combat the effects of the disaster.

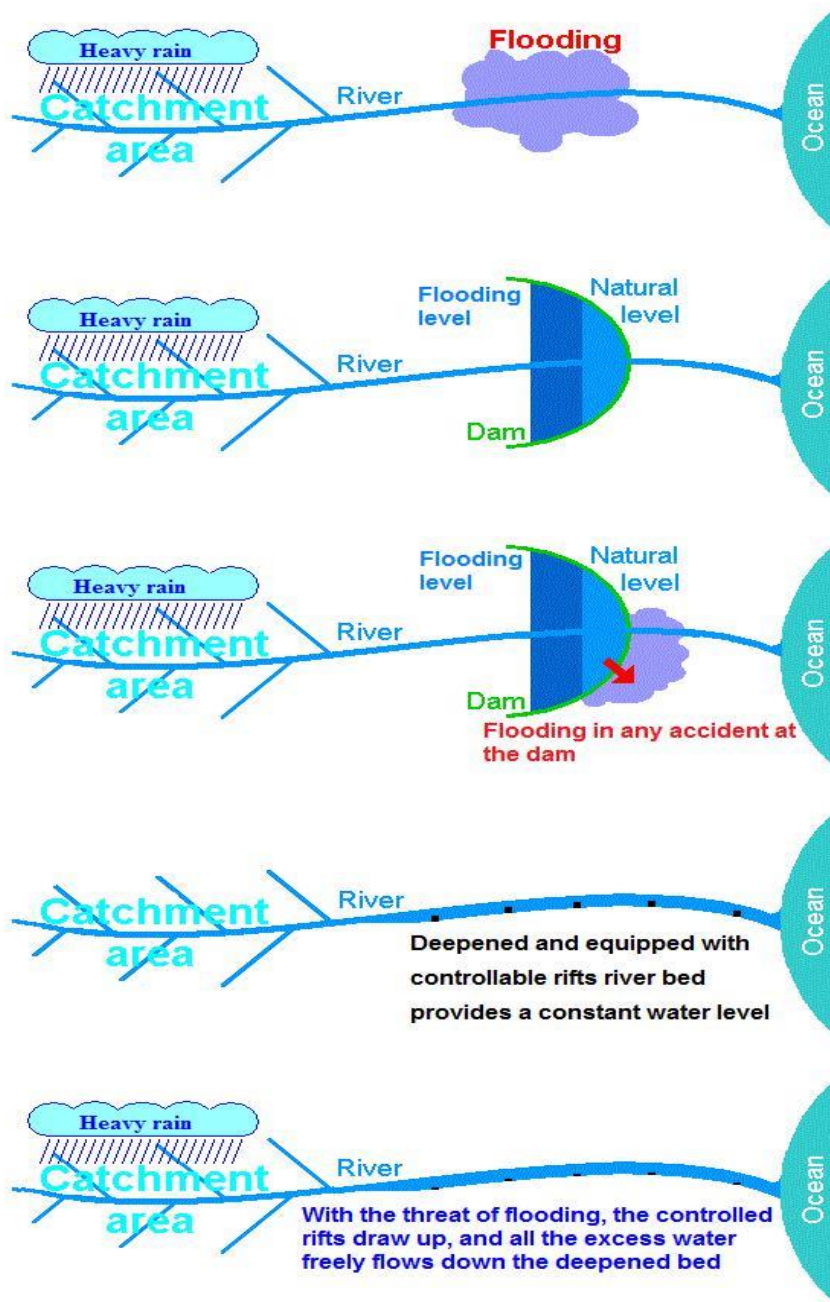


Figure 4. Diagram showing the principal advantage of the offered method over classical constructing of reservoirs.

To maintain the previous level of water and to avoid negative impacts on the ecology, the river bottom is equipped with artificial rifts of variable configuration (Fig. 5), which are actually sluice gates that overlap only the lower part of the river bed.

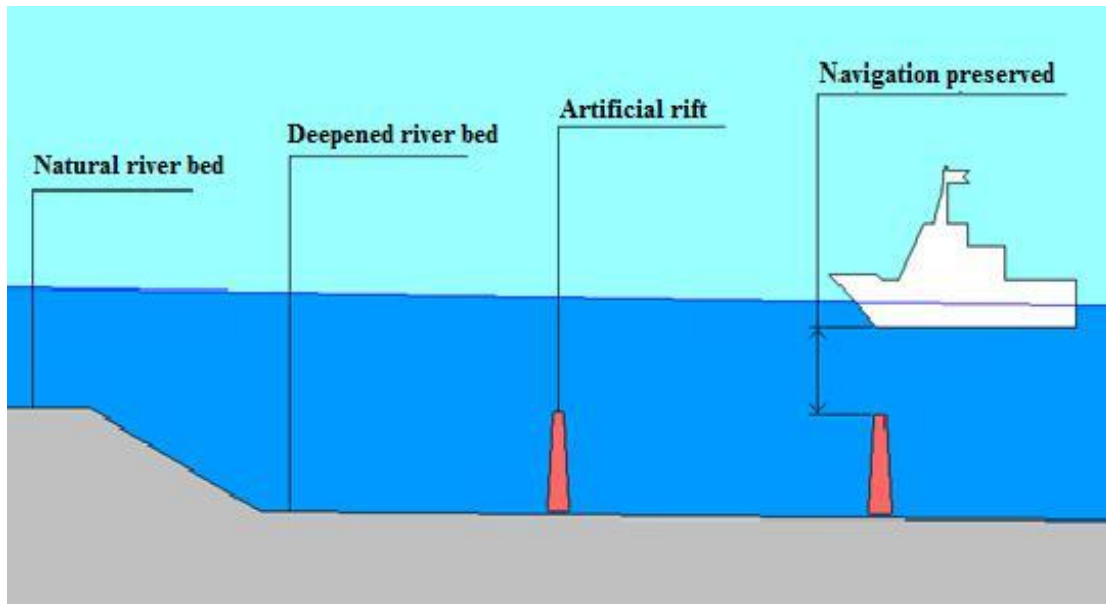


Figure 5. Scheme of the modified river bed

With the threat of flooding, artificial rapids are offset (Figure 6) and hydraulic radius of the river rises so much that it will let flow through all the flood water.

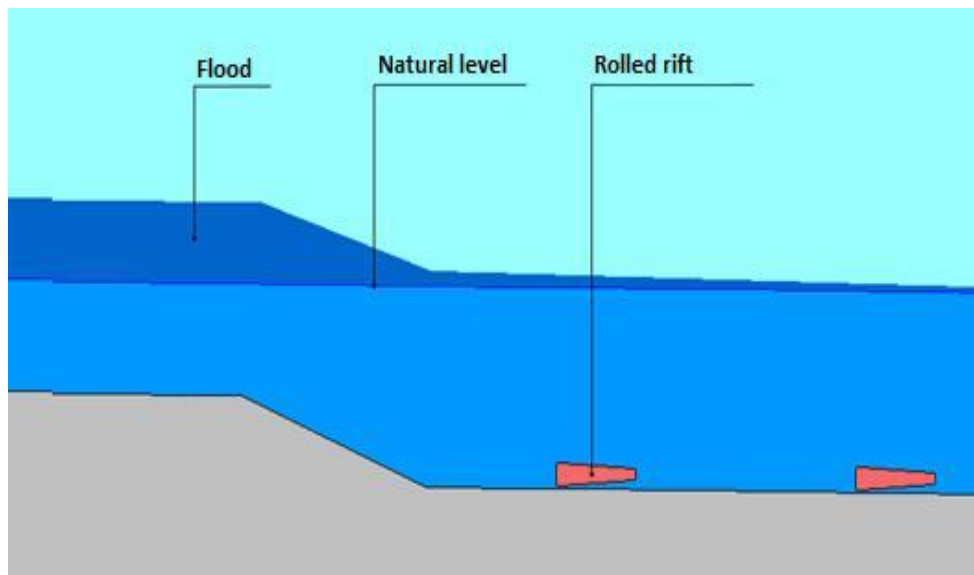


Figure 6. Schematic diagram of the flood water reset

6. THE RESULT OF THE EXPERIMENTS

After a theoretical study of hypothesis, a working model was created, which was conducted with several series of experiments.

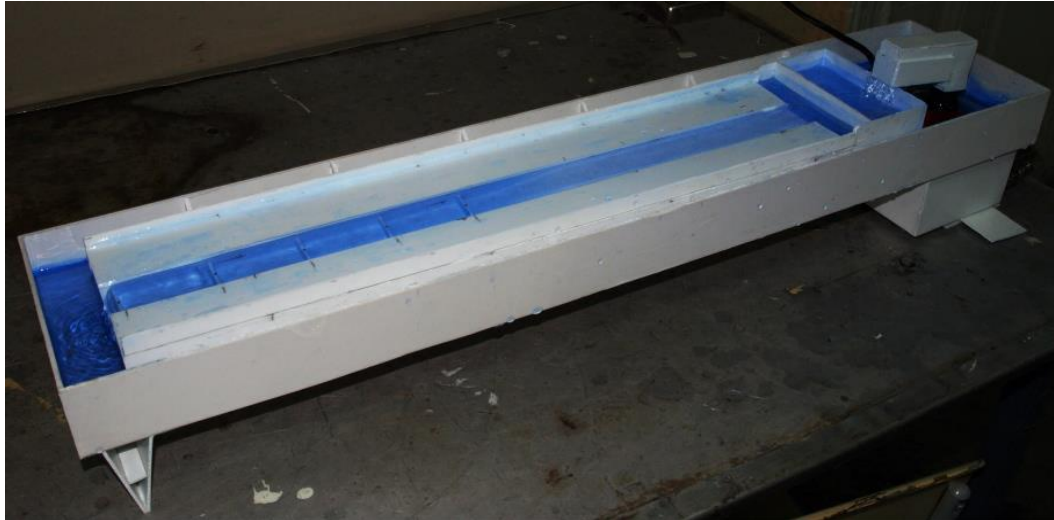


Figure 7. Layout of river bed.

The bed of the river model has two consecutive fragments: standard and deepened swivel shoals.

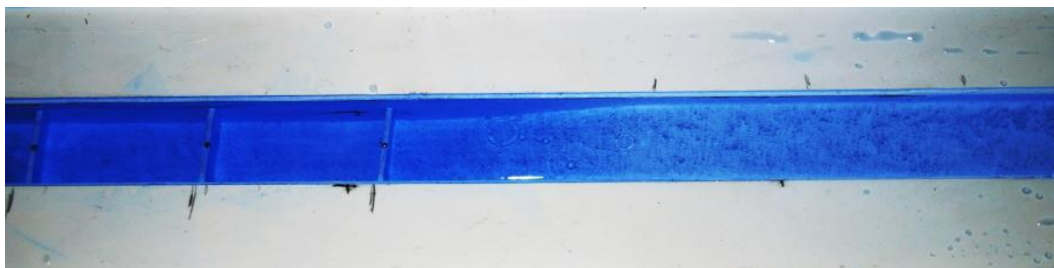


Figure 8. Left – the deepening of the bed rifts.

With the increase of flood flow water begins to leave the banks, flooding both conventional and deepened bed with **closed** rifts.

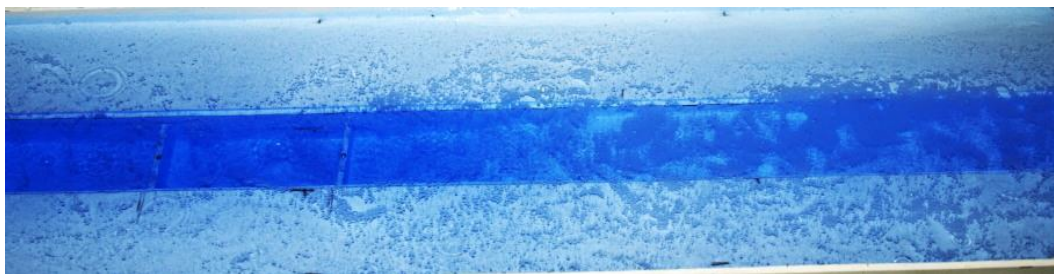


Figure 9. Simulated flood in closed rifts.

However, one has only to disclose rifts, both in their area of water immediately begins to decrease.

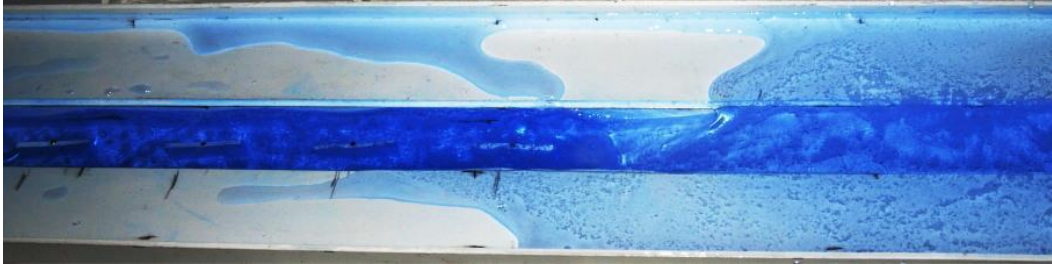


Figure 10. Flood descending in the area of disclosed shoals.

The ability to save river navigation with its equipment with artificial rifts was also tested.

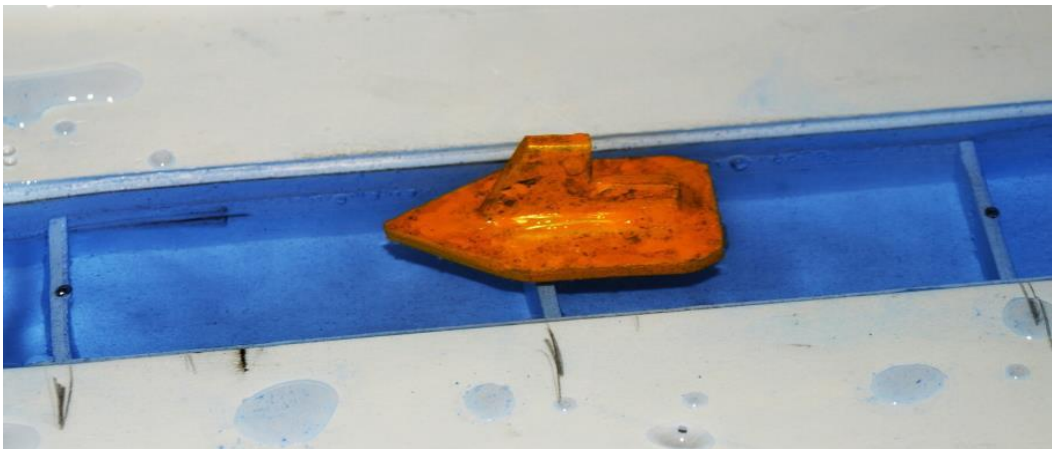


Figure 11. The model of the ship passes freely above the rifts.

At the next stage of the project a new experimental model was made, on which the self-regulated rifts were being tested.

7. THE SYSTEM OF SELF-REGULATED RIFTS

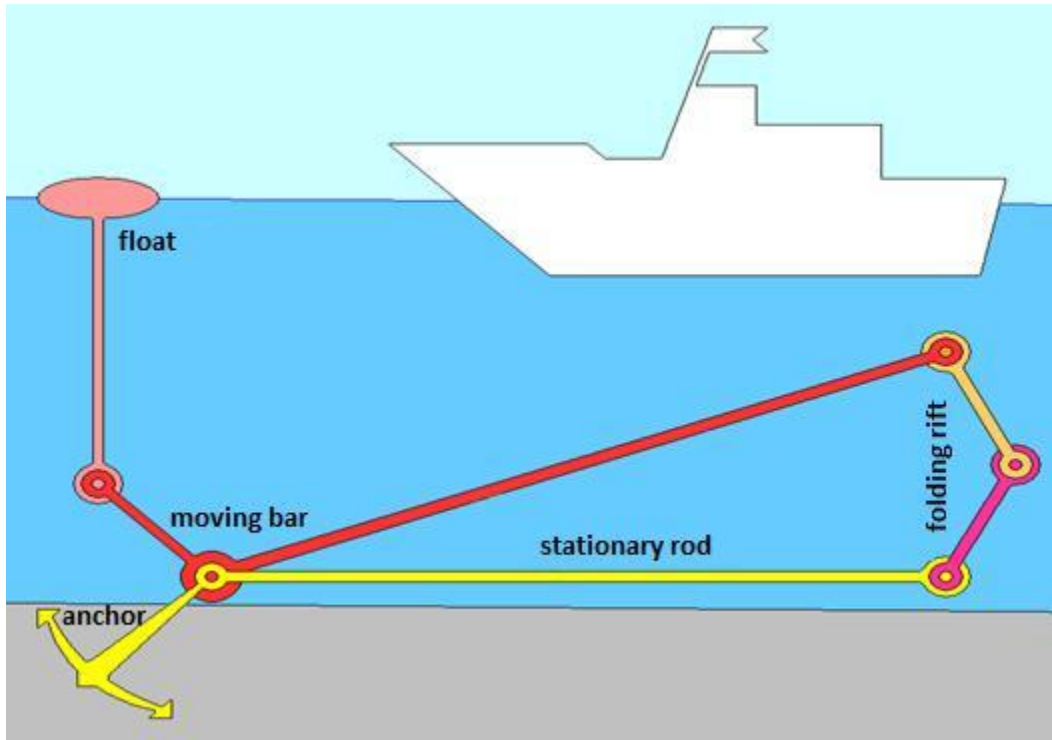


Figure 12. Schematic diagram of the self-regulated rift.

Folding rift, fastened with anchor to the continental rocks, restrains bottom water flow. Once the water level begins to rise, float will rise with it rolling the rift through a system of levers. With decreasing of water level, the float returns the rift to the rising closed position.

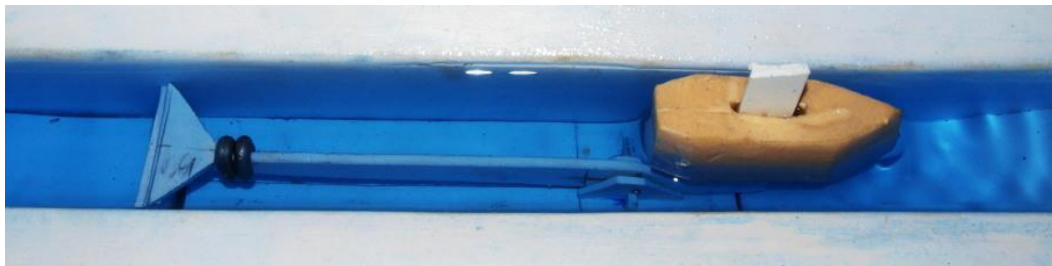


Figure 13. Disclosed rift with normal water level.



Figure 14. Flood raises the float, which discloses the rift.



Figure 15. Variant of the rift design.

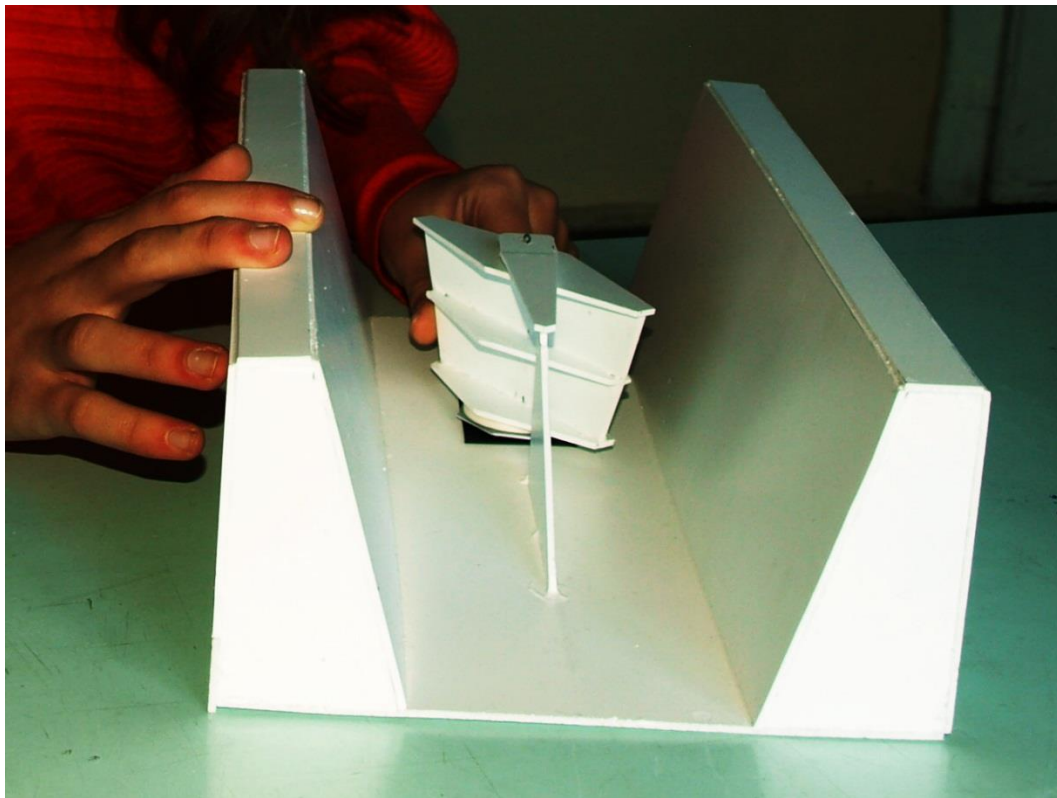


Figure 16. Work on the underwater part of the autonomous swivel rift.

8. ANALYSIS OF THE OBTAINED RESULTS

First of all, we should note that the rifts are a special type of hydraulic structures, which do not need sealing. They only hinder the flow of bottom water layers, remotely resembling the effect of braking parachutes.

Experiments on fully confirmed the correctness of the hypothesis. Indeed, deepening the channel, we increase its throughput. Thanks also controlled rolling, you can always return the water level to the state, which was to deepen. This ensures the stability of the hydrological regime of the region and not allowed lowering rates of groundwater. Our project is environmentally neutral.

The distance between the rifts given not only the hydrology of the river, as the requirements of navigation. Above each shallows formed a small threshold, and the rapids are further apart, the higher the drop of water on that doorstep. Assuming that the maximum height threshold can overcome when moving river boats against the current, we will choose the distance between the rapids.

According hydro meteorological sudden arrival is only possible when water dam, the water is usually comes gradually. Therefore, knowing the hydrological condition of the region, we can choose the level of deepening of the channel such that it coped well with the theoretically best possible floods in the region.

Float-articulated control system of artificial rifts enables fully automatic maintenance of water level in the river.

9. ANALYSIS OF ADDITIONAL PATENT RESEARCH ON THE GIVEN SUBJECTS

After conducting the experiments and gaining some experience, a broader patent search was carried out in order to seek ideas, which were forgotten because they had appeared too early and didn't have the technical means for their implementing. But the review of patents beginning from the American patent US346140 (1885) to this year's published patent applications, shows that all the known inventors have been following the same way – searching for methods and devices to combat the effects of the disaster.

The deepening of river bed and setting a system of controlled shoals enables high quality control of the water flow level and thir effective protection from flood spills. The project is economically feasible. Disposable funds for the creation of engineering system of preventive flood protection will pay off within a few years. Practice shows that the real losses and damage from floods as technological disasters are incomparably higher.

10. THE FURTHER DEVELOPMENT OF THE PROJECT

Successful experimentally confirmed hypothesis brings the project to the level of complex research: search for appropriate shoals constructions, determining their optimal location in river bed, reducing the turbulence of water flows in range of the shoals, and more. Also the research of the controlled shoals capabilities is being conducted – not only to avoid the disastrous consequences of floods, but to adjust smoothly the water level in rivers as well.

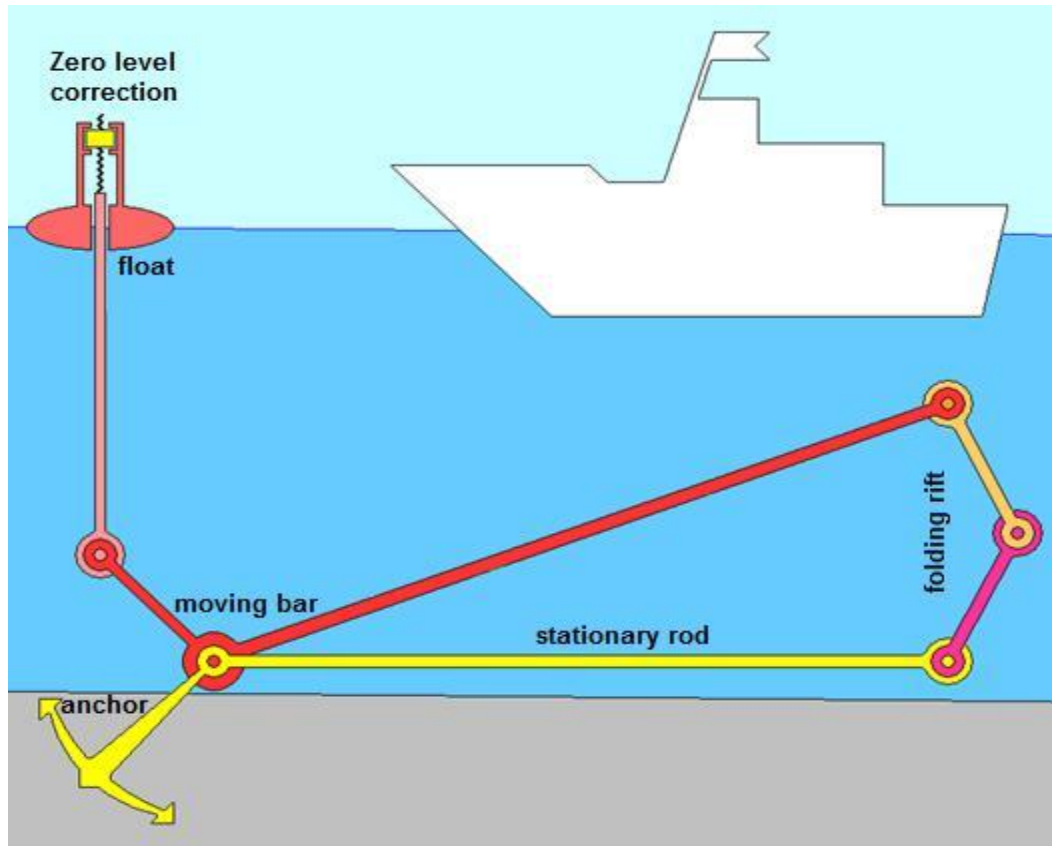


Figure 17. Rift as a regulator of water level in the river.

11. REFERENCES

- 1) Borysenkov E.P., Pasettskyi V.M. Tysiacheletnia letopis neobychnykh yavleniy prirody (The thousand-year annals of the extraordinary phenomena of nature). – M., Mysl'. 1988 – 522 p
- 2) Honcharenko S.U. Fizyka atmosfery dlya dopytlyvykh (Fizika atmosphere for dopitlivih) - K. : Tehnika, 1981. - 159 p.
- 3) Enokhovych A.S. Physics. Equipment. Production. Quick Reference. Guide for secondary school teachers of physics.) - M. : Gosuchpedizdat MOE RSFSR, 1962. - 574 p.
- 4) Product robit Vseukraïnskogo competition "Jerel to the net." - K: Center ekologichnoï osviti that Informácie, 2012. - 100 p.
- 5) Konstantinov NM and other hydraulics, hydrology, hydrometry:. / Training. for schools:. At 2 pm, Part 1 -M. : Executive. wk, 1987. -. 304, p. : silt.
- 6) Konstantinov NM and other hydraulics, hydrology, hydrometry:. / Training. for schools:. At 2 pm, Part 2. -M. : Executive. wk, 1987. -. 431 p. : silt.
- 7) Mizhnarodny congress "ETEVK 2013" (m. Yalta, 1-5 chervnya 2013 p.). Zbirka dopovidey. K. : Druk LLC "Nesting", 2013. - 428 p.
- 8) Moses NI human eyes Mathematics Ecology: The man, nature and the future of civilization. - M. : Mol. Guard, 1988. - 254 [2] p. : silt. - (Eureka).
- 9) NF Fedorov, S. Shifrin Sewerage. - M. : Higher. wk., 1968. 592 p.
- 10) <http://mgsupgs.livejournal.com/1383590.html> - Destruction of the cascade of dams in China
- 11) http://www.silver.ru/air/programmes/den_goroda/tema/57961/ - Flooding in Komsomolsk-on-Amur
- 12) <http://tyzhden.ua/News/81673> - Danube pidnyavsya to record rivnya i in Budapeshti
- 13) <http://russian.people.com.cn/31519/8405337.html> - Flooding has destroyed more than 800 hectares of forest in the Amur region.
- 14) <http://russian.people.com.cn/31516/8377486.html> - As a result of the floods in the county Akchy Xinjiang 5 people were killed, 3 missing.
- 15) <http://tyzhden.ua/Gallery/84169> - Povin in Toronto. Flooded bilsha Chastina Mista.
- 16) <http://russian.people.com.cn/31516/8377214.html> - Flooding in Xinjiang killed five people.
- 17) <http://tyzhden.ua/News/79072> - On Chernigivschini dosi pidtoplenimi zalishayutsya three settlements.
- 18) <http://russian.people.com.cn/31516/8376675.html> - The number of flood victims has reached 76 people in the Chinese city of Fushun.
- 19) <http://russian.people.com.cn/31516/8374895.html> -. As a result, 233 thousand people flood in Heilongjiang province have undergone evacuation.
- 20) <https://www.facebook.com/tri.sugiarto.357/posts/10200735687186121> - Pasca meluapnya 5 sungai di Wasior Papua Barat, aktivitas warga masih lumpuh total dan Banjir
- 21) <http://www.moidagestan.ru/blogs/47911/32735> - Flooding on the Amur
- 22) http://censor.net.ua/photo_news/244072/ - Flood in Europe - disappointing forecasts
- 23) <http://glavred.info/mir/navodnenie-252364.html> - Flooding in Europe: in Germany, ships explode, and Croatia are waiting for a record flood
- 24) <http://kp.ua/daily/030613/396973/> - Bad weather has swept Europe: Ukraine storms, and in Germany and the Czech Republic - flooding
- 25) <http://tyzhden.ua/News/79067> - In Saudiivskiy Araviï through anomalni poveni zaginulo bilshe 20 people.
- 26) <http://korrespondent.net/world/1568563> - Flood in Germany: Authorities evacuated tens of thousands of residents.

- 27) <http://www.dni.ru/incidents/2013/9/15/260050.html> - 500 people missing in the flood in the United States.
- 28) <http://earth-chronicles.ru/news/2013-09-14-51014> - Very heavy rains caused flooding in the western United States.
- 29) <http://korrespondent.net/world/1603357> - The massive flooding in Colorado: the fate of more than 200 residents is unknown.
- 30) <http://tsn.ua/spetstemi/-311241.html> - bearing-down on povin Odeschini flooded budinki she took Zhittyia dvoh people.
- 31) <http://repost.com.ua/index.php/news/news/ukraine-news/1219> - Zlivi i povin diyshli to Vinnitsi.
- 32) <http://tyzhden.ua/Gallery/93247> - Venetsiya pishla pid water.
- 33) <http://tyzhden.ua/Gallery/92292> - Povin in Indiï: bilshist richok viyshli s beregiv.
- 34) <http://tyzhden.ua/News/87822> - In Pakistani od poveni postrazhdali mayzhe two milyoni people.
- 35) Patent DE1265063 B - Bewegliches Wehr mit biegsamer Stauwand - DANIEL DIPLING HANS.
- 36) Patent JPH11117269 A - GATE DEVICE FOR CHANNEL - YAMAMOTO YOJI.
- 37) Patent US5178489 A- Hydrodynamic control system - Joseph Suhayda.
- 38) Patent US3667234 A- Reducing and retarding volume and velocity of a liquid free-flowing in one direction - Lizasoain Gabriel V De.
- 39) Patent US8408841 B2 - Flow resistance modifier apparatuses and methods for moving fluids - Lawrence George Brown, Gregory Andrew MacDonald Brown.
- 40) Patent US3355896 A - Adjustable irrigation dam - Price Douglas M.
- 41) Patent US247030 A - Flood-gate - Wiley W. Bdwaeds.
- 42) Patent US4478534 A - Flood control system - Ivy McIlwain.
- 43) Patent US346140 A - Breakwater - William S. Bates.
- 44) Patent US3167922 A - Device for the correction of river beds - JACQUES CHABERT; MAURICE REMILLIEUX.
- 45) Patent CN1490466 A - Method for bringing bed sludge of Huanghe river under control - LIU XINHUA.
- 46) Patent WO03006747 A2 - WATER CONTROL GATE AND ACTUATOR THEREFORE - OBERMEYER HENRY , MO T W, ECKMAN ROBERT.
- 47) Patent US7435036 B2 - Flexible water gate - Martin Cullen.
- 48) Patent SU649778 A1 - DAM - KROSHNEV ALEKSANDR V; SERGEEV BORIS.
- 49) Patent GB2035427 A - PNEUMATICALLY INFLATABLE FLEXIBLE ENVELOPE TYPE DAM - SUMITOMO ELECTRIC INDUSTRIES.
- 50) Patent GB967354 A - Collapsible weir - JACOB CORNELIS BUIJZE.
- 51) Patent US 3173269 A - Collapsible dam - Norman M Imbertson.
- 52) Patent US 4103496 A - Collapsible and expansible barrage - Arturo Colamussi, Vittorio Merli.
- 53) Patent CN1560375 A - Environmental protection type multi-purpose riverbed for flood and drainage - DING QUAN.
- 54) Patent US 495788 A - Louis debarle - LOUIS DEBARLE, OF PARIS, FRANCE.

CAPÍTULO 5

-Ingeniería Industrial-

APLICACIÓN DE LA LOGÍSTICA EN EL SERVICIO HOTELERO DE LA CIUDAD DE NEIVA

ANA LUCIA PAQUE SALAZAR ⁽¹⁾

⁽¹⁾ *Corporación Universitaria del Huila CORHUILA, Neiva - Huila,
Colombia, ana.paque@corhuila.edu.co*

RESUMEN

La implementación logística en los procesos industriales y administrativos generan eficiencia en tiempos y costos, mejorando la calidad del servicio, estructurando parámetros adecuados de cantidad y calidad evitando la escases, motivo por el cual se realizó un trabajo investigativo que permitió determinar qué porcentaje del gremio hotelero de la ciudad de Neiva tiene dentro de su organización un esquema o procedimiento logístico que permita lograr altos estándares de calidad en el servicio.

La metodología utilizada fue una investigación aplicada de tipo no experimental con enfoque cuantitativo, donde se analizaron aspectos como: concepto de logística, servicio al cliente, stock, gestión de inventarios y procesamiento de pedidos.

Como resultado, se logra evidenciar e identificar aspectos relevantes y pertinentes en: análisis de los porcentajes demanda vs oferta, debilidades en operaciones logísticas de la organización, relación y trato con los proveedores, grado de control en la gestión, identificación de costos operativos, porcentaje de los tiempos de aprovisionamiento, gestión de inventarios, manejos de stock, mantenimiento y satisfacción del cliente en el momento de otorgar la calificación por los servicios recibidos, además se identificó que la principal característica de los hoteles es el tradicionalismo, pues prestan todos sus servicios basados por las experiencias de los administradores mas no por tener un sistema logístico estructurado que los oriente hacia los tres frentes de la sostenibilidad económico, ambiental y social.

PALABRAS CLAVES: Hotel – Proceso – Logística

ABSTRACT:

The implementation logistics in industrial and administrative processes generate efficiency in time and costs, improving the quality of the service, structuring appropriate quantity parameters and quality avoiding the scarcity, reason for which was carried out a research work which allowed determine what percentage of the hotel from the city of Neiva Guild have within your organization a scheme or logistic procedure that can achieve high standards of quality of service.

The methodology used was an applied research of non-experimental type with quantitative approach, where aspects analyzed as: concept of logistics, service customer, stock, inventory management and order processing.

As a result, manages to reveal and identify pertinent aspects in: analysis of percentages demand versus supply, weaknesses in logistics operations of the Organization, relationship and deal with suppliers, degree of control in the management, identification of operating costs, percentage of time of provisioning, inventory management, management of stock,

maintenance and customer satisfaction at the time grant qualification for services received also identified that the main feature of the hotels is traditionalism, because they provide all their services based on the experiences of managers more not to have a logistical system structured that you orient them towards the three fronts of the economic, environmental and social sustainability.

KEY WORDS: Hotel – Process – Logistics

1. INTRODUCCIÓN

El sector turístico en el departamento del Huila siempre ha tenido un gran auge a través de los años e impulsados por los beneficios tributarios de la ley PAEZ como descuentos de impuestos a la creación de nuevas empresas del sector turístico y demás, tienen como objetivo principal ofrecer un excelente servicio de calidad generando la satisfacción de los clientes; por ello deben contar con un sistema logístico óptimo en el que puedan manejar un buen servicio al cliente, el cumplimiento de pedidos, el manejo de inventarios y suministros (Sanchez, 2013).

Un sistema logístico es un procedimiento muy complejo y para aplicarse se debe tener en cuenta una serie de factores que varían dependiendo de cada región y de cada sector económico; es visto como la finalidad de unificar todos los recursos de la empresa creando un flujo armónico entre operaciones logísticas de la organización, mejorando las relaciones y el trato con los proveedores, proporcionando un mayor control en la gestión con estos, permitiendo reducir los costos operativos de manera significativa y la disminución de los tiempos de aprovisionamientos, mejorando la gestión de inventarios y optimizando los stock y así prestar un servicio satisfactorio para el cliente (Helen L, 2011).

El objetivo de esta investigación radica en determinar las condiciones actuales de los sistemas logísticos en los hoteles de la ciudad de Neiva; para ello es necesaria una caracterización del sector hotelero, determinando que hoteles cuentan con un sistema logístico y sustentar la diferencia entre los hoteles que manejan el sistema con los que no lo tienen.

2. METODOLOGÍA

La investigación se realizó a través de los siguientes pasos: realizar revisión de literatura, bases teóricas, elaborar el instrumento de medición, definición de la población objetivo y entrevista en trabajo de campo con dicha población.

La población total estaba comprendida por 165 establecimientos, de los cuales quedaron 74 firmas, quienes cumplían con la definición de actividad principal de ofrecer alojamiento a personas, mediante precio, de forma habitual y profesional, con o sin otros servicios complementarios establecida por la Real Academia Española y de acuerdo a la clasificación uniforme de las actividades económicas por procesos productivos CIU, cuyo código correspondía al 5511, lo que permitió definir la población objetivo para la aplicación del instrumento de medición (encuesta).

Significa que la población objetivo fue inferior a 100 establecimientos, permitiendo optar por trabajar toda la cantidad tipo censo, aplicando el instrumento en un 100 por ciento a los 74 establecimientos registrados ante la cámara de comercio de Neiva, para su posterior análisis e interpretación de datos a través del software SPSS y entrega de resultados.

Así mismo, se realizó un estudio aplicado, con un enfoque cualitativo – cuantitativo acogiendo la percepción de los entrevistados como la sumatoria de datos, permitiendo llegar a las conclusiones a través de todas las evidencias recolectadas.

Para la aplicación de la encuesta se hizo una prueba piloto con el 10 por ciento de la población objetivo, correspondiente a 7 consultados, donde se puso a prueba el instrumento, prueba que fue llevada correctamente, lo que permitió al investigador corregir cualquier problema perdido en la etapa de desarrollo, evaluando el instrumento y verificando que las construcciones de interés son medidas adecuadamente y que la población objetivo podía interpretar correctamente las preguntas y que no habría distracciones en el momento del diligenciamiento de la encuesta.

3. DESARROLLO DE LA INVESTIGACION

La implementación logística en los procesos industriales y administrativos generan eficiencia en tiempos y costos, mejorando la calidad del servicio, estructurando parámetros adecuados de cantidad y calidad evitando la escases (Lambán, 2013).

La importancia de la logística en las organizaciones a través del tiempo ha ido evolucionando constantemente, debido a que el mercado es más competitivo y las organizaciones deben generar procesos eficientes para optimizar los tiempos y los costos, motivo por el cual se ha convertido en una de las principales herramientas para que una organización sea considerada como una empresa del primer mundo.

La logística es la gestión del flujo, y de las interrupciones en el manejo de materiales (materias primas, componentes, subconjuntos, productos acabados y suministros) (Frazelle, 2002). Sin embargo, las implementaciones logísticas son mínimas y especialmente en el sector hotelero ubicado en la ciudad de Neiva. Las causas que han llevado a la identificación del problema manifiestan la deficiencia en los controles de calidad tanto a nivel operativo como administrativo, la insuficiencia en el manejo de las TIC'S y por último la carente necesidad de capacitar a los trabajadores.

Las causas anteriormente mencionadas traen consigo una serie de efectos como lo es el descontrol de mercancías y suministros adquiridos, la des-comunicación entre las áreas de trabajo, donde se observa la tendencia de trabajo tradicional, resistencia al cambio y acatar procesos establecidos, presentando una gran barrera para mejorar los procesos logísticos que se quieren implementar.

Los beneficios que traerá la implementación logística ayudarán a incrementar la competitividad y la rentabilidad de los hoteles de la ciudad y a la vez convertir la logística en modelo a seguir creando mecanismos planificados de las actividades internas y externas de las empresas hoteleras ubicadas en la ciudad de Neiva.

Un sistema logístico correctamente implementado permitirá gerenciar estratégicamente la adquisición, el movimiento, el almacenamiento de productos y el control de inventarios, así como todo el flujo de información asociado. Así mismo permitirá determinar y coordinar en forma óptima el producto correcto, el cliente correcto, el lugar correcto y el tiempo correcto (Correa, 2009).

3.1 Contextualización Teórica

La creciente importancia del servicio al cliente en las organizaciones, acaba por convertirse en una exigencia cada vez mayor a los departamentos de suministro, que lo convierten, a su vez, en requerimientos a los proveedores, de todo lo cual se ocupan los métodos que configuran las nuevas aproximaciones conceptuales a la logística.

Por este motivo, las presiones competitivas dentro de unas economías cada vez más globalizadas, giran en el sentido de incorporar la logística como un componente estratégico dentro de la empresa desde la doble vertiente de mejorar el servicio a los clientes, perfeccionando a su vez la relación con los proveedores, y todo ello bajo la búsqueda permanente de la calidad en todos los procesos de aprovisionamientos, producción, distribución, mantenimiento y servicio post-venta de las empresas (Pau i Cos, 2008).

3.1.1 Logística

“Logística es dar a los negocios reglas que permitan a la dirección seguir, valorar, priorizar y controlar todos los distintos elementos del aprovisionamiento y distribución que inciden en la satisfacción del cliente, en los costos y beneficios” (Pau i Cos, 2008).

Igualmente “es el conjunto de técnicas y medios destinados a gestionar: el flujo de materiales y el flujo de la información, con el objetivo principal de satisfacer las necesidades en bienes y servicios de un cliente y/o mercado en calidad, cantidad, lugar y momento (Pau i Cos, 2008).

3.1.2 Aprovisionamiento

El aprovisionamiento es la actividad logística mediante la cual cualquier entidad hotelera se provee del material necesario para su funcionamiento, mediante el aprovisionamiento, se dotará de los productos necesarios para el desempeño de su actividad (Morales M, 2011).

De acuerdo a Pau i Cos, (2008) aprovisionar es una función destinada a poner a disposición de la empresa todos aquellos productos, bienes y servicios del exterior que le son necesarios para su funcionamiento y para cumplir estas funciones es necesario:

- Prever las necesidades.
- Planificarlas en el tiempo.
- Expresarlas en términos adecuados.
- Buscarlas en el mercado.
- Adquirirlas.
- Asegurarse de que son recibidas en las condiciones demandadas.
- Pagarlas.

3.1.3 Compras

La literatura nos ilustra que las compras es una actividad del aprovisionamiento que tiene por objeto adquirir aquellos bienes y servicios que la empresa necesita del exterior, garantizando el abastecimiento de las cantidades requeridas en el momento preciso y en las mejores condiciones posibles de calidad y precio.

3.1.4 Planificación de Compras y Aprovisionamiento

Dentro del proceso logístico debe existir la planificación con el fin de planificar las necesidades de las áreas, de acuerdo con las previsiones realizadas.

Dentro de la planificación se debe tener en cuenta algunas actividades como se evidencian en la figura 1.

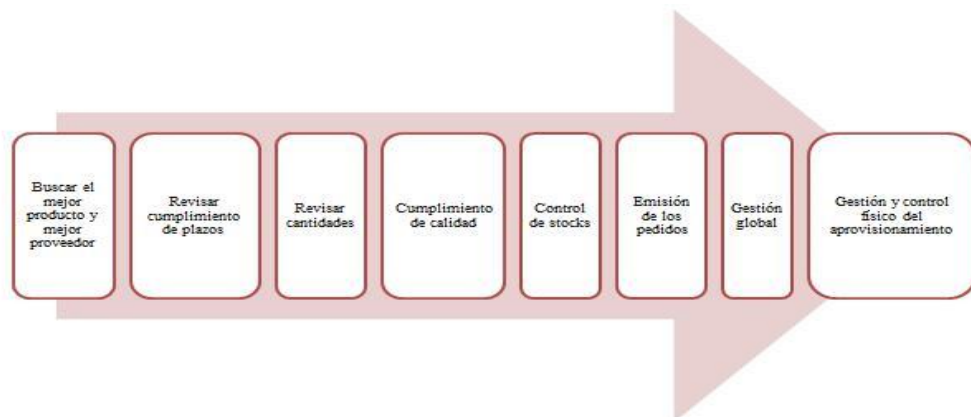


Figura 1.- Actividades Planificación de compras y aprovisionamiento

3.1.5 Stock

Las organizaciones actuales necesitan cada día más de una buena gestión de stocks, ya que la competitividad exige una mejora continua y la permanente optimización de los recursos, obligando a la reducción de niveles de stock por el costo que ellos representan tanto a nivel financiero, de riesgo (seguro, obsoleto) y de almacenaje.

A nivel hotelero para ejercer control sobre la gestión de stocks, teniendo en cuenta la cantidad de stock con la que dispone, se puede analizar de dos maneras diferentes:

- **Absoluto:** es decir, el valor del stock en unidades o pesos.
- **Relativo:** en relación al consumo de dicho stock y para ello la literatura nos brinda dos variables para obtener la información:

Cobertura; Teniendo en cuenta la medida del nivel de stock en tiempo de consumo, dado en días o meses, y **Rotación;** donde se mide el número de veces que se repone el stock a lo largo del año.

3.1.6 Servicio al Cliente

El servicio al cliente está dado en la calidad del servicio teniendo en cuenta como el proceso de cambio que compromete a todos los miembros de la organización alrededor de valores, actitudes y comportamientos en favor de los clientes del negocio (Prieto P, 2010).

3.1.7 Enfoque Tradicional & Enfoque Logístico

La evolución de la logística ha permitido un gran avance en la interacción de todas las áreas internas de la empresa, obteniendo magníficos resultados en los despilfarros y errores en el pronóstico, permitiendo con esto reducir los gastos internos y estructurando el quehacer logístico en función de la demanda vs la oferta.

La Tabla 1 muestra la evolución en la gestión logística en el desempeño y proyección de las empresas.

Tabla 1.- Análisis comparativo enfoque tradicional vs enfoque logístico

TRADICIONAL	APLICACIÓN LOGISTICA
GESTION DE COMPRAS	
REALIZAR LAS COMPRAS DE ACUERDO A PEDIDOS	ORDEN PERFECTA
SE COMPRA SI PLANEACION Y CONTROL	HAY EFICIENCIA Y BUENAS PRACTICAS MEDIANTE UN INDICADOR
ENCAMINADA A LA ADQUISICION, REPOSICION PARA E ADECUADO DESEMPEÑO DE LA ORGANIZACIÓN	ESQUEMAS DE NEGOCIACION E INTEGRACIÓN
GESTION DE INVENTARIOS	
SEÑAL DE EFICIENCIA Y SABIDURIA	STOCKS – COSTOS
GESTION DE TRANSPORTE	
NO SE PREOCUPABAN POR LA GESTION DE LA DISTRIBUCION	REDES DE VALOR
SERVICIO A CLIENTE	
PERCEPCION DIIRECTA DEL COMERCIANTE	ESTUDIO DE NECESIDADES
CLIENTE Vs SERVICIOS	SERVICIOS Vs CLIENTES

3.2 Descripción del Proceso de Análisis de los Datos

Los resultados se analizaron utilizando técnicas de estadística descriptiva, donde se organizó, contabilizó, tabuló y graficó los resultados obtenidos en el instrumento aplicado, como también el software estadístico SPSS como herramienta para su análisis cualitativo.

4. RESULTADOS

Tabla 2.- Cuenta con un departamento de logística

Si	9
No	65
Total	74

De los 74 hoteles visitados tan solo el 12% cuentan con un departamento de logística establecido, por tanto el 88% se sostienen de una forma empírica.

La idiosincrasia de la región tiene procedimientos estandarizados que a los administradores les ha funcionado a través de la experiencia y no tener una preparación profesional, les hace creer y estar seguros que como lo han realizado y se sigue realizando, es el mejor método y para qué invertir en procedimientos más complejos que tienen un gasto adicional que menoscaba las ganancias.

Tabla 3.- Servicios cuales son ofertados por el hotel

Lavandería	66
Restaurante	45
Bar	39
Discoteca	1
Jacuzzi	4
Sauna O Turco	5
Spa	2
Piscina	12
Total	174

La mayoría de los hoteles cuenta con un servicio adicional al hospedaje y que solo un hotel cuenta con el servicio de discoteca, ya que de los 74 hoteles un 38% cuenta con el servicio de lavandería, el 26% con el servicio de restaurante, el 22% con el servicio de bar, 1% con el servicio de discoteca y spa, el 2% con el servicio de jacuzzi, el 3% con el servicio de sauna o turco y el 8% cuenta con el servicio de piscina.

Tabla 4.- Tiempo reposición de lencería

Cada mes	0
Cada 2 meses	0
Cada 3 meses	3
Cada 6 meses	5
Más De 6 meses	54
Total	62

El comportamiento del sector para la adquisición de la lencería es cada vez que se les está agotando el inventario, pero no tienen un plan de compras y adquisición establecido, de los 74 hoteles encuestados el 87% indicaron que hacen la reposición de lencería a más de 6 meses de uso, el 8% lo hace cada 6 meses y un 5% lo hace cada 3 meses.

Tabla 5.- Tiempo adquisición de suministros

Cada mes	61
Cada 2 meses	0
Cada 3 meses	1
Cada 6 meses	0
Más De 6 meses	0
Total	62

Tabla 6.- Tiempo abastecimiento de los alimentos

Diariamente	6
Cada 8 días	21
Cada 15 días	8
Cada mes	0
Otro. Cuál?	1
Total	36

Los hoteles se abastecen con una periodicidad mensual para la compra de elementos para el aseo y desinfección de la infraestructura como para la lencería.

Para el abastecimiento de los alimentos predomina cada 8 días aprovechando la etapa de senescencia de los alimentos, mientras que un 23% lo hace 15 días y el 8% lo hace diariamente.

Una constante predominante por parte de los administradores de los hoteles es la dinámica en la adquisición de productos de aseo y químicos de manera mensual, con inversiones altas por ser adquiridos mensualmente teniendo como base el consumo anterior, entran en gastos adicionales sin aprovechar cualquier descuento en productos ofrecidos por los proveedores dentro de sus ofertas comerciales.

Tabla 7.- Disposición de bodega para la recepción de pedidos

Si	33
No	3
Total	36

Fuente: Autores

El análisis nos muestra que de 36 hoteles el 92% cuenta con bodegas adecuadas para el recibimiento de pedidos y un 8% no cuenta con este espacio demarcado, hacen improvisaciones en el momento de recibir mercancía, suministros, insumos, etc.

Tabla 8.- Sistema de inventario utilizado

PEPS	19
UEPS	0
Rectail	0
Periódico	5
Otro. Cuál?	5
Total	29

Podemos concluir que de los 74 hoteles solo 29 manejan alguna clase de inventario donde el 66% de estos manejan el sistema de inventario PEPS y el 17% manejan el sistema de inventario periódico y el otro 17% otra clase de inventario llamado Zeus.

Tabla 9.- Variables para selección de proveedores

Condición de Entrega	0
Condiciones de Pago	0
Calidad	51
Prestigio	3
Precio	0
Total	54

El 94% de la población tiene en cuenta la variable calidad a la hora de escoger sus proveedores mientras y un 6% tiene en cuenta el prestigio del proveedor.

Tabla 10.- Medio publicitario para captar clientes

Referidos	67
Convenios	20
Publicidad	67
Temporadas	74
Total	228

Podemos concluir que los clientes llegan a los hoteles en temporadas altas en un 33%, por publicidad un 29%, referido un 29% y por convenios en un 9%.

El medio publicitario es por referidos y cuñas radiales, porque el comportamiento atípico es para la temporada de Junio en las fiesta autóctonas del departamento.

Tabla 11.- Valoración del servicio al cliente

Llamada Telefónica	22
Encuesta	15
Buzón De Sugerencia	37
Total	74

Los hoteles se preocupan por la satisfacción del cliente donde un 50% utiliza el buzón de sugerencia, el 30% usa la llamada telefónica y el 20% por medio de la encuesta.

En general los hoteles cuentan con un servicio de calificación que permite conocer la calidad de los servicios, los aspectos de mejora y las quejas de los servicios o atención recibida y que no se quiere tener un enfrentamiento directo con el inculpado pero del cual si desea quejarse o felicitar, con la finalidad de mejorar el servicio recibido.

5. CONCLUSIONES

La presente investigación ha llevado a cabo un estudio aplicado a las empresas hoteleras de la ciudad de Neiva con el objetivo de determinar las condiciones actuales de la aplicación del sistema logístico que utilizan. El éxito de un sistema logístico parte de la preparación de los recursos que posee cada hotel y la meta final es hacer la logística rápida y eficiente para la satisfacción del cliente y reducción de costos.

Se realizó la caracterización del sector hotelero de la ciudad de Neiva observando que la principal característica de los hoteles es el tradicionalismo, pues prestan todos sus servicios basados por las experiencias de los administradores mas no por tener un sistema logístico estructurado que los oriente.

Otra característica que se identifico es que los hoteles prefieren vincular sus empleados por medio de un contrato indefinido, con el fin de dar permanencia y seguridad en el trabajo.

En cuanto al pago de salarios, el 89% oscila entre uno y uno punto cinco salarios mínimos a sus empleados.

De los 74 hoteles el 46% se abastecen de bienes e insumos con establecimientos mayoristas y en el momento de hacer la adquisición de los alimentos lo más relevante para los hoteles es la calidad y en cuanto a tipo de inventario que manejan el 66% utiliza el tipo de inventario PEPS.

Se identificó qué solo 12% del sector hotelero utiliza un sistema logístico para el desarrollo de sus actividades y la prestación del servicio.

El tiempo que predominan para el abastecimiento de insumos y suministros son: cada 6 meses haciendo la reposición de lencería y cada mes se abastecen los suministros de aseo.

En general el diagnóstico de la investigación arrojó que tan solo 9 hoteles de los 74 analizados cuentan con la aplicación de un sistema logístico refiriendo que es un sistema excelente, pues ayuda a optimizar recursos, mejorar la eficiencia y eficacia de sus procesos, a independizar los diferentes departamentos sin desmejorar la comunicación en ningún momento y según la controladora de alimentos y bebidas del hotel Chicala Yina Paola Rocha manifestó que la aplicación del sistema logístico en el hotel “mejoró bastante la eficiencia y eficacia de las compras vs los niveles de stock y lo más importante se logró la estandarización de los procedimientos”.

6. AGRADECIMIENTOS

Los autores expresan los más sinceros agradecimientos a la Corporación Universitaria del Huila “CORHUILA” por el apoyo brindado en la presente investigación, de la misma manera a los profesionales que nos ofrecieron las ayudas en la fijación de criterios lingüísticos y la disposición de los administradores y dueños de la cadena hotelera de la ciudad de Neiva.

7. BIBLIOGRAFIA

- **Ballou, R. H.** (2004). *Logística Administración de la Cadena de Suministro*. Mexico: Pearson Educación.
- **Cardozo, A.** (13 de Marzo de 2013). *revistapym*. Obtenido de <http://www.revistapym.com.co/noticias/industria-hotelera/boom-industria-hotelera-colombia>
- **Cooper, D. J.-D.-M.** (2010). *Administración y Logística en la Cadena de Suministro*. Mc Graw Hill.
- **Correa, A. y.** (2009). Tecnologías de la información en la Cadena de Suministro. *DYNA*, 37- 48.
- **Frazelle, E.** (2002). *The Logistics of Supply Chain Management*. New York: McGraw-Hill.
- **Helen L, R.** (2011). El valor de la Logística. *Logística Empresarial No. 1*, 25.
- **HERNANDEZ, S. R.** Metodología de la investigación. 1ra. Edición, 2007, MC. Graw Hill, México
- **Lambán, M. d.** (01 de Marzo de 2013). Modelo para el cálculo del costo de almacenamiento de un producto: caso de estudio en un entorno logístico. Zaragoza, España.
- **Morales M, T.** (2011). *Aprovisionamiento y organización del office en alojamientos*. España: IC Editorial.
- **Pau i Cos, J.** (2008). *Manual de logística integral*. España: Ediciones Díaz de Santos.
- **Pires, S. C.** (2007). *Gestión de la Cadena de Suministros*. España: McGraw-Hill.
- **Prieto P, J. E.** (2010). *Gerencia del servicio la clave para ganar todos*. Colombia: Ecoe Ediciones.
- **Sanchez, R. E.** (07 de Agosto de 2013). El Auge Hotelero. *La Nación*, pág. 06.
- **Velasco Sánchez, J.** (2013). *Gestión de la logística en la empresa: planificación de la cadena de suministros*. Larousse - Ediciones Pirámide.

DIAGNÓSTICO DE LA SITUACIÓN ACTUAL DE LOS RESIDUOS SANGUINOLENTOS GENERADOS POR EL PROCESO DE EVISCERADO.

VANESSA CATALINA BERMEO RODRÍGUEZ ⁽¹⁾, MARIA STHEFANIE CLEVES ASTUDILLO ⁽²⁾ & DIEGO FERNANDO SUAREZ CORTES ⁽³⁾

⁽¹⁾ Corporación Universitaria del Huila - CORHUILA, Neiva, Colombia, ycbermeo@corhuila.edu.co

⁽²⁾ Corporación Universitaria del Huila - CORHUILA, Neiva, Colombia, mscleves@corhuila.edu.co

⁽³⁾ Corporación Universitaria del Huila – CORHUILA, Neiva, Colombia, diego.suarez@corhuila.edu.co

RESUMEN

El objetivo de esta investigación es caracterizar la situación actual de los residuos sanguinolentos generados por el proceso de eviscerado de pescado en la Piscícola María del Mar LTDA del Departamento del Huila, para poder identificar que residuos genera el proceso, la cantidad y su disposición final, además se brindaran alternativas para aprovechar estos residuos sanguinolentos, ayudando no solo al medio ambiente si no a la empresa en general.

Palabras Claves: Residuos, proceso, alternativas

ABSTRACT

The objective of this research is to characterize the current situation of the bloody waste generated by the process of gutting fish in the Piscícola Maria del Mar LTDA del Departamento del Huila, to identify that waste generated by the process, quantity and final disposal, alternatives also be provided to take advantage of these bloody waste, helping not only to the environment if not the company in general.

Key Words: Waste, process, alternativez

INTRODUCCIÓN

Las metodologías actuales de cultivo y procesamiento de peces pueden generar impactos positivos y negativos sobre el medio ambiente, como por ejemplo aquellos asociados a las descargas de sus residuos por parte de sus efluentes caracterizados por ser ricos en materia orgánica, nutrientes y sólidos en suspensión que pueden alterar las propiedades físico-químicas de los cuerpos de agua y por tanto las comunidades de organismos acuáticos. En el departamento del Huila existen procesos productivos a nivel piscícola que no cuentan con la implementación de acciones que conduzcan al buen uso de los recursos hídricos, ya que los residuos sanguinolentos están siendo vertidos a estas fuentes, sin saber la disposición final que esto genera.

Por ende, esta investigación se realizó sobre el diagnóstico de la situación actual de los residuos sanguinolentos generados por el proceso de eviscerado de pescado.

Se realizó una visita a todo el proceso en general, y así se obtuvo una valoración de la situación actual de los residuos sanguinolentos generados por la actividad de eviscerado.

1. DESARROLLO DEL PROYECTO

Para el desarrollo de este proyecto de Investigación se realizaron visitas de campo tanto a la represa como a la planta de procesamiento donde a través de observación directa se obtuvo información concreta de la situación actual.

En una segunda visita a la planta nos enseñaron como es todo el proceso, desde la recepción de la Tilapia, hasta su despacho. Posteriormente nos explicaron el tratamiento que reciben los residuos sanguinolentos generados por el proceso de eviscerado y donde son vertidos.

Como ejercicio académico se tomaron muestras a los residuos sanguinolentos, y así tener una información más clara y precisa de los componentes que tienen estas aguas y que tan aptas son para ser vertidas a una quebrada, este proceso se efectuó a través de un laboratorio de Aguas, siendo esta una empresa que presta servicios de ingeniería y laboratorio.

1.1. Proceso de Producción

La Piscícola cuenta con una finca ubicada en el Municipio de Campoalegre donde se hace el proceso de incubación de los alevinos, en la Represa de Betania están los jaulones donde se lleva a cabo la etapa de engorde, cada jaulón tiene una capacidad de 20 toneladas y tienen autorizados por el gobierno diez, su planta de procesamiento está localizada en una vereda del municipio de Yaguara, cultivan variedades de peces, pero el de mayor proporción es la Tilapia, que comúnmente se le llama Mojarra Roja.

Los alevinos llegan a los jaulones con una longitud de 1cm de largo y un peso de 1.5g, en el proceso de engorde que se lleva a cabo en la represa reciben entre 6 y 7 raciones de purina diarias para acelerar su crecimiento, se capturan cuando tienen alrededor de 5 a 6 meses para ser transportados a la planta, son trasladados de inmediato en camiones con

refrigeración donde ya tienen el hielo depositado (*Fig. 1*), para que así no entren en proceso de descomposición y lleguen en excelentes condiciones de sanidad para el debido proceso.



Figura 1. - Turbo que transporta la tilapia

Cuando la tilapia llega a la planta son depositadas en piletas en el área de descargue, son alrededor de 3500 a 4500 toneladas a una temperatura entre 10° a 15°C. Pasan al área de rayado donde se les corta el abdomen, después al eviscerado donde se le retira la hiel y las vísceras (*Fig. 2*), posteriormente al lavado donde se les termina de retirar los residuos, dicho lavado se realiza con agua potable (*fig. 3*), finalmente pasan al área de clasificación y empackado (*Fig. 4*), la tilapia se ubica en posición en donde el abdomen quede en la parte inferior para que vaya escurriendo, quedando listo para ser despachado.



Figura 2. - Proceso de producción (Corte y eviscerado)

En el área de empackado son clasificadas de acuerdo a su peso y tamaño:

- Menos de 80g: Chicharra
- 80g – 100g : Llaverito
- 100g – 160g : Llaverito
- 180g – 250g : Mojarrin
- 250g – 350g : Media libra

- 350g – 480g : Tres cuartos
- 480g – 550g : Libra
- 550g – 650g : Libra y cuarto
- 650g – 750g : Libra y media
- 750g – Más : Súper



Figura 3. - Proceso de producción (Lavado)



Figura 4. - Clasificación y empackado

Así como la tilapia tiene su proceso para poder ser comercializada, los residuos sanguinolentos también, cuando se lleva a cabo el eviscerado y lavado, se unen estas dos componentes que son transportadas por tubería a unas albercas (*Fig. 5*) que son las siguientes: en la primera se encuentra una malla donde caen todas las vísceras y los pescados pequeños que no pueden ser distribuidos por su tamaño.

Para no ser desperdiciados se someten a altas temperaturas en una caldera, obteniéndose aceite, y posteriormente concentrado. La empresa lo utiliza para alimentar sus propios alevinos o se vende a terceros.



Figura 5. - Alberca de residuos sanguinolentos

En la segunda alberca ya sale el agua sangre con un porcentaje de grasa que ya trae de los procesos anteriores, en la tercera pasan por unas mallas donde va disminuyendo la cantidad de grasa, ya en la 4, 5 y 6 alberca pasa el agua sangre ya un poco más limpia para finalmente ser vertida a la quebrada la boa.

Los residuos que el proceso genera son desechos de tipo infecciosos y anatomopatológicos:

- **Desechos infecciosos:** desechos contaminados con sangre u otros fluidos corporales.
- **Desechos anatomopatológicos:** tejidos, órganos o fluidos humanos, partes corporales y cadáveres de animales.

1.2. Disposición final

Las pruebas que se realizaron a los residuos sanguinolentos, se llevaron a cabo para obtener información más clara y precisa de los componentes que tienen estas aguas y que tan actas son para ser vertidas a la quebrada, este proceso se efectuó con una empresa que presta servicios de ingeniería y laboratorio.

Los resultados entregados por el laboratorio se analizaron y compararon con la resolución 631 del 2015, quien es la que establece los parámetros y los valores límites máximos permisibles que deberán cumplir quienes realizan vertimiento puntuales a los cuerpos de agua superficiales. Las muestras se hicieron en la entrada de la trampa de sólidos y en la salida de la trampa de grasas.

En la entrada de la trampa de sólidos se analiza el procesamiento y conservación del pescado (*Tabla 1*), donde nos muestra los resultados que arrojan la prueba de laboratorio y los parámetros según la Resolución 631/2015.

Se examinó que la piscícola solo cumple con el nivel del PH del agua, los demás parámetros los sobrepasa, el de mayor magnitud es el de Grasas y Aceites, según la resolución lo permitido es de 20 mg/L y los resultados arrojan 6272 mg/ L.

Tabla 1. - Entrada de la trampa de sólidos

ENSAYO FISICOQUIMICO - ENTRADA TRAMPA DE SÓLIDOS				
PARÁMETRO	UNIDADES	RESULTADOS	RESOLUCIÓN 631 /2015	CUMPLIMIENTO
			Procesamiento y conservación del pescado	
Temperatura	°C	22.8	NO APLICA	NO APLICA
pH a 23°C	Unidades	6.83	6.00 - 9.00	SI CUMPLE
Demanda Química de Oxígeno (DQO)	mg O2/L	1100.4	600.00	NO CUMPLE
Demanda Bioquímica de Oxígeno (DBO)	mg O2/L	786.00	400.00	NO CUMPLE
Oxígeno Disuelto (OD)	mg O2/L	5.10	NO APLICA	NO APLICA
Sólidos Suspendidos	mg/L	6183.50	200.00	NO CUMPLE
Sólidos Disueltos	mg/L	3122.00	NO APLICA	NO APLICA
Sólidos Totales	mg/L	9305.50	NO APLICA	NO APLICA
Grasas y Aceites	mg/L	6272.00	20.00	NO CUMPLE
Materiales Flotantes	mg/L	2550.00	NO APLICA	NO APLICA
Coliformes Totales	NMP/ 100 ml	24 x 10 ⁶	NO APLICA	NO APLICACION

En la salida de la trampa de grasas (*Tabla 2*), pasa exactamente igual al anterior, el único parámetro que la piscícola está cumpliendo según la resolución es el PH del agua que está entre los parámetros establecidos. Sin embargo, bajo gratificadamente el nivel de Grasas y Aceites, pero siguen incumpliendo con los demás parámetros establecidos.

Tabla 2. - Salida de la trampa de grasas

ENSAYO FISICOQUIMICO – SALIDA TRAMPA DE GRASAS				
PARÁMETRO	UNIDADES	RESULTADOS	RESOLUCIÓN 631 /2015	CUMPLIMIENTO
			Procesamiento y conservación del pescado	
Temperatura	°C	21.5	NO APLICA	NO APLICA
pH a 23°C	Unidades	6.87	6.00 - 9.00	SI CUMPLE
Demanda Química de Oxígeno (DQO)	mg O2/L	932.4	600.00	NO CUMPLE
Demanda Bioquímica de Oxígeno (DBO)	mg O2/L	666.0	400.00	NO CUMPLE
Oxígeno Disuelto (OD)	mg O2/L	4.99	NO APLICA	NO APLICA
Sólidos Suspendidos	mg/L	1246.00	200.00	NO CUMPLE
Sólidos Disueltos	mg/L	3202.00	NO APLICA	NO APLICA
Sólidos Totales	mg/L	4448.00	NO APLICA	NO APLICA

Grasas y Aceites	mg/L	2998.00	20.00	NO CUMPLE
Materiales Flotantes	mg/L	0.00	NO APLICA	NO APLICA
Coliformes Totales	NMP/ 100 ml	24 x 10 ⁵	NO APLICA	NO APLICA

Es por esta razón que las Piscicultura impacta en el medio ambiente a través de dos procesos: el consumo de recursos y la generación del producto final. Presentándose una degradación ambiental y es ocasionada cuando se introduce en el agua cantidades importantes de desechos (*Residuos sanguinolentos*).

1.3. Mecanismos

Hoy en día existe un sin número de programas de uso de aguas residuales. Por ejemplo, en la India hay varios centenares de sistemas de riego con aguas residuales. En los Estados Unidos de América, se han puesto en práctica diversos sistemas de riego con aguas residuales cuyo número aumenta con rapidez. (Salazar Cano, 2004)

Sin embargo, sólo un número relativamente pequeño de sistemas de riego en el mundo se ha diseñado y realizado de tal forma que confiera la debida protección del medio ambiente.

Algunos contaminantes o residuos que traen estas aguas podrían afectar al medio ambiente, pero pueden servir de nutrientes cuando se encuentran en agua de riego en estanques de peces.

Algunos mecanismos que se podrían utilizar para la reutilización de estas aguas residuales serian:

- El uso de procedimientos típicos como los fangos activos que está dividido por pasos:
 1. **Rejillas:** es donde se detienen los materiales gruesos.
 2. **Trampa de grasas:** es donde se eliminan las sustancia de menos densidad que el agua y por su peso flotan (*aceite, grasas*).
 3. **Tanque de aireación:** Los difusores de burbuja fina insuflan aire en el agua residual con el objetivo de que las bacterias aeróbicas degraden la materia prima contaminante.
 4. **Clarificador:** Tiene por objetivo separar por sedimentación el agua tratada.
 5. **Cloración:** Se utiliza un clorinador para destruir las bacterias patógenas haciendo que el agua esté lista para ser reutilizada.

El fango activo es capaz de descomponer las sustancias orgánicas contaminantes.

- Las lagunas de estabilización son un sistema de tratamiento biológico, está constituida por una excavación en el suelo donde el agua residual se almacena para recibir su tratamiento por medio de la actividad bacteriana con acciones simbióticas de las algas u otros organismos. Cuando el agua residual es descargada en una laguna de estabilización se realiza un proceso de auto purificación o estabilización natural. (Quiroz Vega, 2009)

- Las técnicas de membranas que trabajan si la adicción de productos químicos, actúa como un filtro muy específico que dejara pasar el agua, mientras que retiene los sólidos suspendidos y otras sustancias. Funcionan como una pared selectiva, donde ciertas sustancias pueden atravesarla mientras otras quedan atrapadas en ella.
- El tratamiento biológico de las aguas residuales es el método preferido para el control de los vertidos a quebradas, ríos y represas. Porque se utiliza para bajar la carga orgánica de compuestos orgánicos solubles, hay dos categorías principales:
 1. **Tratamiento aeróbico:** el agua se airea con aire comprimido (Oxígeno).
 2. **Tratamiento anaeróbico:** Funcionan bajo condiciones libres de oxígeno.

La recuperación de las aguas residuales permite emplearlas en diferentes usos, siendo algunos de ellos los siguientes:

- **Agricultura:** Los efluentes utilizados para riego proceden de aguas domésticas y aguas depuradas. Las aguas residuales brutas no se utilizan para riego de especies para consumo, pero si para riego de especies arbóreas.
- **Fines municipales y recreativos:** Riego forestal, riego de parques y jardines públicos, para prevención de incendios municipales y forestales.
- **Transporte y lavado:** Lavado de productos acabados o semiacabados, y para mantenimiento.

CONCLUSIÓN

Conocer las principales características de los contaminantes y la adopción de alternativas de tratamiento de efluentes piscícolas es todavía muy incipiente para los procesos de producción de productos piscícolas, la invitación es a que se debe incentivar más a la investigación en este sector, en el cual es muy importante el desarrollo y adaptación de tecnologías de tratamiento al inicio, durante y final del proceso, pero también se debe considerar el desarrollo de investigación en función de técnicas de producción más limpia.

Gran parte del impacto ambiental que tienen los residuos sanguinolentos del proceso de eviscerado no puede ser cuantificada. Los residuos son vertidos, casi en su totalidad en la quebrada. Esta situación representa, además de un evidente daño ambiental y un gran desperdicio de recursos que pueden ser empleados en diversas actividades, donde se requiere un cambio de visión ambientalista, donde se entienda que los residuos no son solo algo de lo que tenemos que deshacer inmediatamente sino que son recursos que podemos y debemos aprovechar.

Es importante resaltar que las Piscícolas deberán encontrar medidas de manejo más convenientes que permitan cumplir con la legislación ambiental y aprovechar los residuos.

REFERENCIAS

Quiroz Vega, C. (2009). Manual de agua potable, alcantarillado y saneamiento. *Comisión Nacional de Agua "CONAGUA"*, versión digital disponible en:
<http://www.conagua.gob.mx/CONAGUA07/Publicaciones/Publicaciones/Libros/10DisenoDeLagunasDeEstabilizacion.pdf>

Salazar Cano, R. (2004). Tratamiento de aguas residuales en acuicultura. *Universidad de Nariño*, versión digital disponible en:
https://www.google.com.co/?gfe_rd=cr&ei=YvWfVquVMoLF-AXC6LXIaw#q=tratamiento+de+aguas+residuales+en+acuicultura

Minambiente. (2015). Resolución 0631 de 2015. *Ministerio de ambiente y desarrollo sostenible*, versión digital disponible en:
https://www.minambiente.gov.co/images/normativa/app/resoluciones/d1-res_631_marz_2015.pdf

REESTRUCTURACIÓN DEL FUNCIONAMIENTO DE UNA HIPOTECARIA

PEREZ RAMÍREZ JORGE ALBERTO ⁽¹⁾, CHÁVEZ RAMÍREZ
ROBERTO CARLOS ⁽²⁾

⁽¹⁾ Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingenierías, Guadalajara, México, albertopr32@gmail.com

⁽¹⁾ Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingenierías, Guadalajara, México, crack.bip.flyp@hotmail.com

RESUMEN

El diseño de sistemas de producción es la organización de las instalaciones físicas de la compañía con el propósito de optimizar el uso de los recursos, especialmente el personal, equipo, materiales y energía. Incluye la localización planta y el diseño del edificio, el manejo de materiales y la distribución en planta, siendo esta última la de mayor importancia para la disciplina.

La distribución en planta es el arreglo físico de maquinaria y equipos para llevar a cabo la producción, estaciones de trabajo, personal, ubicación de materiales de todo tipo y en toda la etapa de elaboración, y el equipo de manejo de materiales.

El proyecto tiene la finalidad de Mejorar la distribución dentro de la planta de pinturas para mejorar la eficiencia de los espacios.

Con ayuda de las técnicas de registro de información se busca obtener una visión objetiva de la eficiencia de la empresa para evaluar el diseño y mejorar los procesos. Los instrumentos de registro más utilizados dentro de la técnica del Estudio del Método son los gráficos y los diagramas, y de estos existen gran diversidad en cuanto a estructura y propósito.

Mediante el método de factores ponderados la ciudad más apta para la ubicación del almacén de la hipotecaria fue Guadalajara, los traslados son más cortos y los caminos están en buenas condiciones; los proveedores de pintura se encuentran ubicados en varios puntos cercanos al almacén.

Con el método de centro de gravedad se obtuvo la mejor ubicación para abastecerse de pintura de acuerdo a la ubicación de los proveedores.

Con ayuda de los métodos MUTHER SLP de los análisis de relación de actividades y tablas origen destino, se realizó un análisis meticuloso de la distribución y la eficiencia de los recorridos.

Gracias a las técnicas de registro se implementaron pequeñas mejoras que se vieron reflejadas directamente en los tiempos empleados para la distribución y el abastecimiento del material.

La eficiencia del recorrido de los materiales era del 38.30% y la eficiencia aumentó al 41.52%, también se llegó a la conclusión de que era necesaria una reubicación de los departamentos, oficinas y los almacenes.

Palabras clave: Distribución en planta, técnicas de registro, eficiencia de recorrido del material.

ABSTRACT

The design of production systems is the organization of the physical facilities of the company in order to optimize the use of resources, especially personnel, equipment, materials and energy. It includes the plant and building design, materials handling and distribution plant location, the latter being the most important for the discipline.

The layout is the physical arrangement of machinery and equipment to carry out production, workstations, personal, location and materials of all kinds throughout the design phase, and material handling equipment.

The project aims to improve distribution within the paint plant to improve efficiency of space. Using the techniques of recording information is sought an objective view of the efficiency of the company to evaluate the design and improve processes. The instruments most commonly used in the art recording Studio Method are graphs and diagrams, and these are great diversity in structure and purpose.

By the method of weighted factors most apt for store location city mortgage was Guadalajara, transfers are shorter and the roads are in good condition; paint suppliers are located at various points near the store.

With the center of gravity method the best location to stock up on paint according to the location of the suppliers was obtained.

Using the methods of analysis MUTHER SLP activity relationship origin and destination tables, a careful analysis of the distribution and efficiency of the routes it was made.

With recording techniques small improvements that were reflected directly in the times used for the distribution and supply of the material were implemented.

Travel efficiency of materials was of 38.30% and 41.52% efficiency increased to, it was also concluded that a relocation of departments, offices and warehouses was necessary. Keywords : plant distribution , recording techniques, efficiency media path.

1. INTRODUCCIÓN

Actualmente existen muchas empresas que se dedican a producir productos o brindar servicios, pero en la mayoría de los casos utilizan métodos que han aprendido empíricamente con el tiempo, a prueba y error, este conocimiento se ha transmitido de generación en generación. Algunas empresas llegan a ser exitosas produciendo grandes lotes de productos o brindan servicios en gran parte de la ciudad, sin embargo, son empresas que tiene un gran potencial y pueden crecer aún más y, en el mejor de los casos solo explotan el veinte por ciento de su potencial.

2. SELECCIÓN DEL PROYECTO

Se seleccionó una hipotecaria que se dedica a dar mantenimiento a los edificios y casas, en la mayoría de los casos solo es necesario pintar los departamentos, para ello se requieren de muchos litros de pintura a la semana y para resolver este problema y evitar que la entrega de los departamentos y/o casas no estén en tiempo y forma, se usa un almacén que se abastece constantemente. Actualmente compran pintura CASTHER y a diario la pintura es transportada desde el almacén hasta los departamentos que se ubican en varios municipios de la zona metropolitana.

Con mucha frecuencia, en la planta se presenta problemas relacionados con los trayectos que sigue el material desde el lugar de abastecimiento hasta el almacén, también dentro de la planta donde es común ver retrasos, choques y demoras en trayectos que sigue el material antes de salir hacia su destino.

3. OBJETIVOS

- Mejorar la distribución dentro de la planta para mejorar la eficiencia de los recorridos, disminuir los accidentes y el aprovechamiento de los espacios.
- Encontrar la mejor ubicación para un segundo almacén de pintura y material de construcción en general.
- Analizar los factores que son importantes para la empresa y encontrar la ubicación ideal de acuerdo con las necesidades de la empresa.



Revisar y mejorar de forma objetiva la eficiencia de los recorridos y las secuencias que sigue el material dentro y fuera de la planta con la ayuda de métodos aprendidos en la clase de diseño de sistemas de producción y de ingeniería de métodos.

4. MATERIALES

Para llevar a cabo la investigación, y los diagramas usamos los recursos disponibles a nuestro alcance, los cuales son:

- Lápiz
- Pluma
- Borrador
- Cuaderno
- Libros
- Laptop (Con Word y Sketchup)

5. METODOLOGÍA

Esta investigación se basa en el método deductivo. Partimos de datos generales previamente establecidos en los siguientes libros. “Diseño de instalaciones de manufactura y manejo de materiales”, “Ingeniería industrial, métodos estándares y diseño del trabajo” e “Introducción a la ingeniería industrial”. Para luego aplicarlo a casos individuales y deducir varias suposiciones por medio del razonamiento lógico.

Realizaremos una visita de campo a la hipotecaria x para encontrar problemas vinculados con el diseño de las instalaciones y empezar a Investigar en estos libros anteriormente mencionados todo lo relacionado con ello para intentar dar solución a los problemas encontrados.

6. DEARROLLLO

6.1. Método de factores ponderados

Se busca ubicar un almacén para pinturas en la mejor ciudad de acuerdo a las necesidades de la hipotecaria, actualmente la pintura que utiliza la hipotecaria es pintura marca CASTHER. En base a los estudios hechos se obtuvieron los siguientes datos:

Tabla 1.- Factores ponderados

Factor	Ponderación	Guada lajara	Zapopan	Tonalá	Tlajomulc o
Transporte	.10	8	6	4	5
Trafico	.15	3	6	8	8
Condición de las calles	.15	7	7	7	8
Clima	.05	8	5	4	4
Temporales de lluvia y calor	.05	6	8	3	3
Numero de distribuidoras	.10	9	5	3	4
Distancia entre las distribuidoras	.05	10	5	5	2
Precio	.10	7	6	7	1
Puntualidad de las entregas	.15	4	6	5	5
Disponibilidad del material	.10	6	4	5	3
Total	1	6.3	5.85	5.5	4.9

Guadalajara es la mejor opción para localizar el almacén de pintura en relación a los factores considerados como los más importantes por la hipotecaria.

6.2. Método de centro de gravedad

Se busca la mejor ubicación para un almacén para pintura.

El almacén actual se encuentra ubicado en la calle agua marina entre la avenida federalismo y avenida de los maestros. Se abastece en 4 puntos de venta que se muestran a continuación:

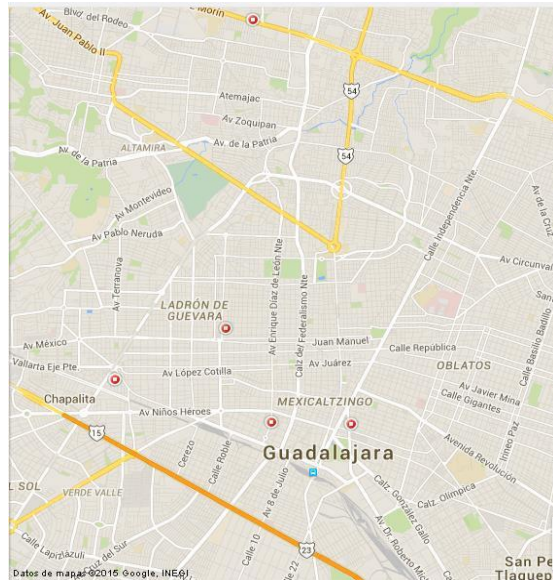


Figura 1.- Centros de abastecimiento

6.3. Metodo de centro de gravedad

Tabla 2.- Centro de gravedad

	Coordenadas	Pintura en litros
A	(5.21, 1.42)	76
B	(6.48, 1.38)	95
C	(2.14, 2.31)	38
D	(4.30, 3.36)	114

$$C. C. G. X = \frac{(5.21)(76) + (6.48)(95) + (2.14)(38) + (4.30)(114)}{76 + 95 + 38 + 114} = 4.9 \quad [1]$$

$$C. C. G. Y = \frac{(1.42)(76) + (1.38)(95) + (2.31)(38) + (3.36)(114)}{76 + 95 + 38 + 114} = 2.19 \quad [2]$$

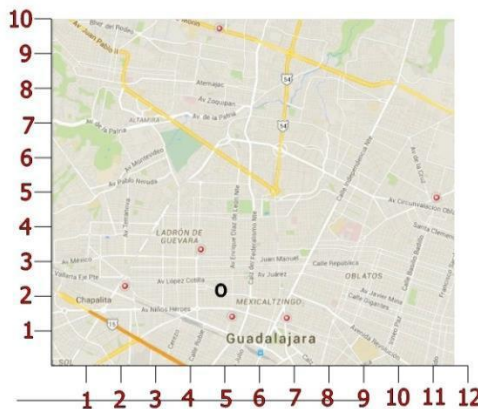


Figura 2.- Plano cartesiano de los centros de abastecimiento

Tabla 6.- Tabla de penalizaciones

	TOTAL	PUNTAJE DE PENALIZACIÓN
R	32.3	115.5
2	0	10
3	0	60
4	0.5	7.5
5	0.5	22.5
6	22.3	57.9
7	14.8	54.7
8	22.3	68.6
9	27.8	27.8
10	32.3	63.2
S	0	0
	TOTAL 186.8	TOTAL 487.7

186.8

487.7

(100) = 38.30% [3]

Después de desarrollar la tabla de origen destino se obtuvieron resultados muy bajos en relación a la eficiencia del recorrido y la secuencia que sigue el transportista durante la semana; es necesario mejorar la secuencia para mejorar la eficiencia de recorrido.

Tabla 7.- Rutas de recorrido propuesto

Día	Ruta	Real	Optimo	%
Lunes	R, 2, 3, 9, 10, S	10	10	100
Martes	R, 4, 5, 8, 6, 9, 10, S	12	10	83
Miércoles	R, 8, 6, 7, 10, S	12	10	83
Jueves	R, 6, 9, 10, 8, 7, S	18	10	55.5

6.5. Tabla origen destino propuesto

Tabla 8.- Consumo de pintura

Día	Pintura por semana	Litros de pintura	Total de litros	Importancia relativa
Lunes	323	0.5	100/10	10
Martes	323	2	75/10	7.5
Miércoles	323	4.5	45/10	4.5
Jueves	323	1	103/10	10.3

Tabla 9.- Tabla origen destino

	R	2	3	4	5	8	7	6	9	10	S
R		10 10		7.5 22.5		4.5 22.5		10.3 72.1			
2			10 10								
3									60	10	
4					7.5 7.5						
5						7.5 7.5					
8							10.3 10.3	7.5+4.5 24			
7										4.5	10.3
6							4.5 9		7.5+10.3 17.8	13.5	41.2
9										10+7.5+10.3 27.8	
10						10.3 82.4					10+7.5+4.5 22
S											

Tabla 10.- Tabla de penalizaciones

	TOTA L	PUNTAJE DE PENALIZACIÓN
R	32.3	127.1
2	10	10
3	10	60
4	7.5	7.5
5	7.5	7.5
6	22.3	26.8
7	14.8	54.7
8	22.3	24
9	27.8	27.8
10	32.3	104.4
S	0	0
	TOTA L 186.8	TOTAL 449.8

186.8

449.8

(100) = 41.52% [4]

6.6. Diagramas de cuerdas

Lunes

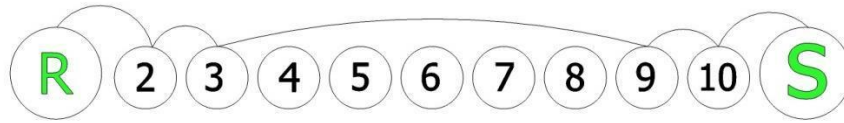


Figura 3.1.- Ruta del recorrido original

Martes

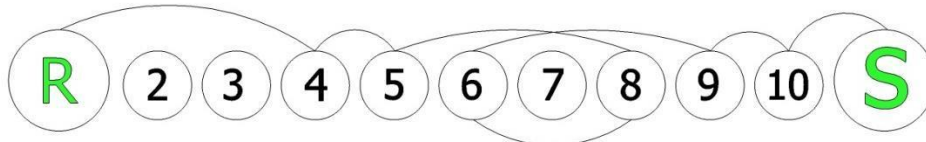


Figura 3.2.- Ruta del recorrido original

Miércoles

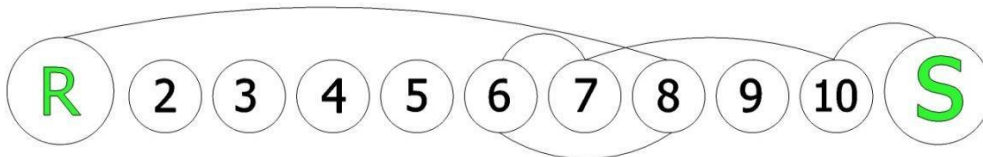


Figura 3.3.- Ruta del recorrido original

Jueves

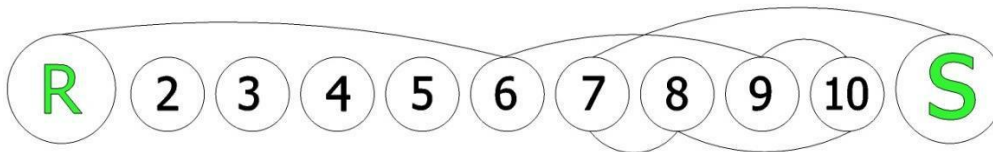


Figura 3.4.- Ruta del recorrido original
Tabla 11.- Tabla de rutas del recorrido actual

Ruta: R 2 3 4 5 6 7 8 9 10 S

Día	Ruta	Real	Optima	%
Lunes	R 2 3 9 10 S	10	10	100
Martes	R 4 5 8 6 9 10 S	14	10	71.42
Miércoles	R 8 6 7 10 S	14	10	71.42
Jueves	R 6 9 10 8 7 S	16	10	62.5
				76.335

Lunes

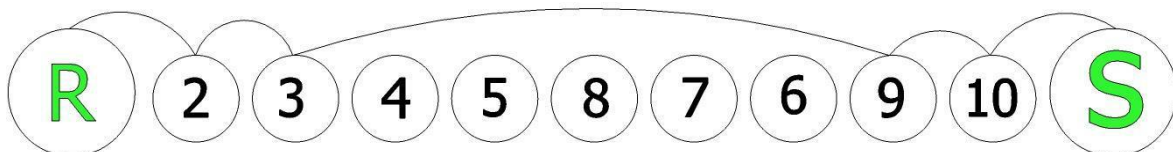


Figura 4.1.- Ruta del recorrido propuesto

Martes

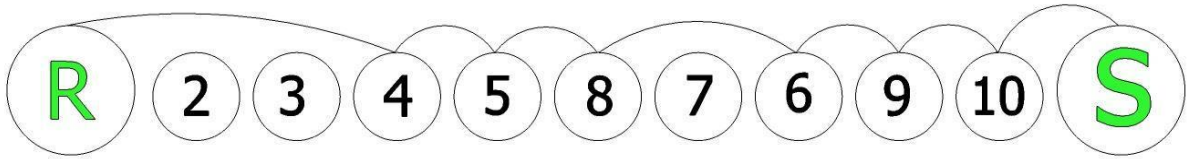


Figura 4.2.- Ruta del recorrido propuesto

Miércoles

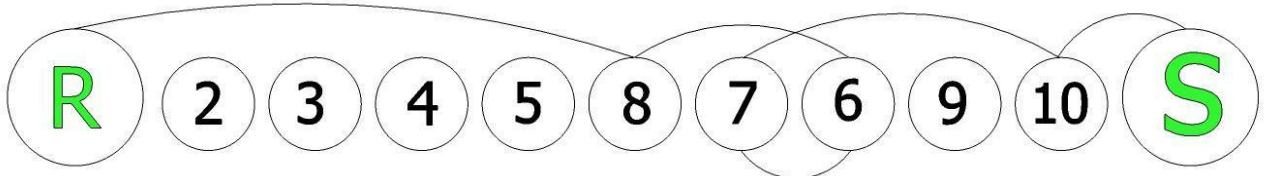


Figura 4.3.- Ruta del recorrido propuesto

Jueves

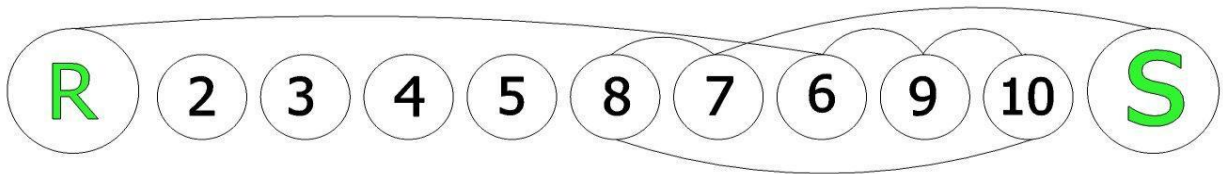


Figura 4.4.- Ruta del recorrido propuesto

Ruta propuesta: R 2 3 4 5 8 7 6 9 10 S

Tabla 12.- Tabla de rutas del recorrido propuesto

Día	Ruta	Real	Optima	%
Lunes	R 2 3 9 10 S	10	10	100
Martes	R 4 5 8 6 9 10 S	12	10	83
Miércoles	R 8 6 7 10 S	12	10	83
Jueves	R 6 9 10 8 7 S	18	10	55.5
				80.375

6.7. Método Muther slp

Esta metodología conocida como SLP por sus siglas en inglés, ha sido la más aceptada y la más comúnmente utilizada para la resolución de problemas de distribución en planta a partir de criterios cualitativos, aunque fue concebida para el diseño de todo tipo de distribuciones en planta independientemente de su naturaleza. El método reúne las ventajas de las aproximaciones metodológicas precedentes e incorpora el flujo de materiales en el estudio de distribución, organizando el proceso de planificación total de manera racional y estableciendo una serie de fases y técnicas que, como el propio Muther describe, permiten identificar, valorar y visualizar todos los elementos involucrados en la implantación y las relaciones existentes entre ellos.

6.7.1. Desarrollo

Figura 4.1.- Diagrama del metodo Muther Slp

6.7.2

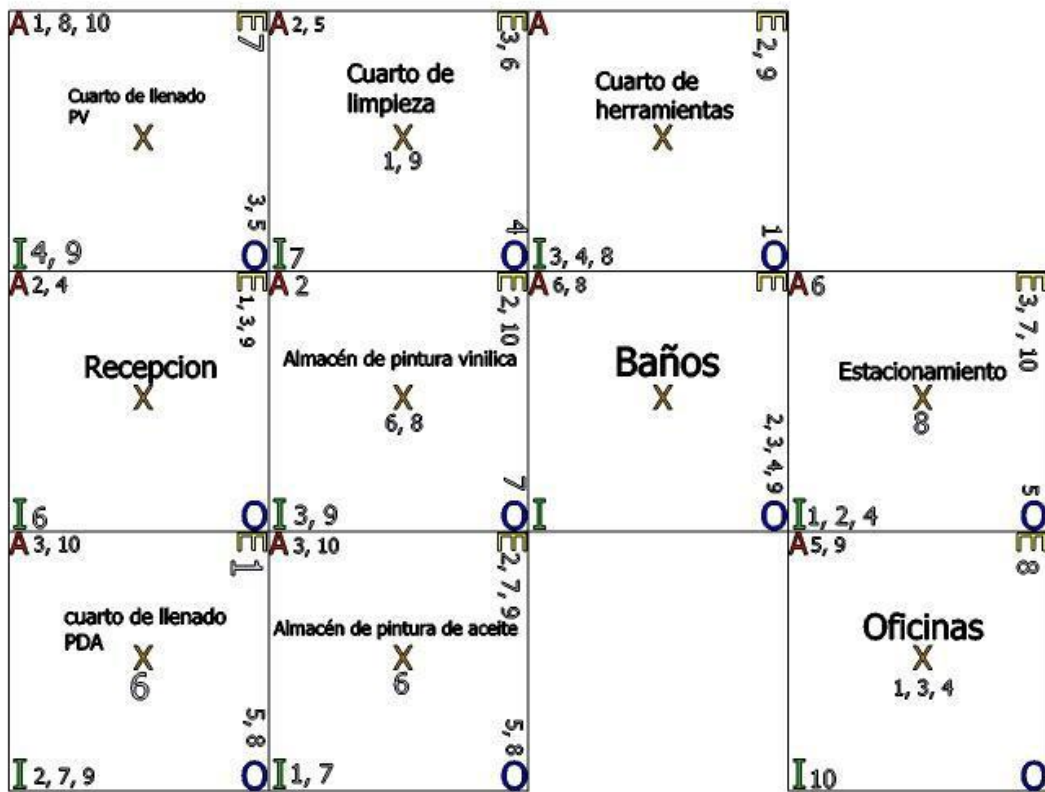


Análisis de relación de actividades:

Tabla 13.- Tabla de relación de actividades

	A	E	I	O	U	X
1.Almacen de pintura vinilica	2	4, 10	3, 9	7	5	6, 8
2.Cuarto de llenado	1, 8, 10	7	4,9	3,5	6	
3.Almacen de pintura de aceite	4	8,9,10	1, 7	2, 5		6
4.Cuarto de llenado	3,10	1	2, 7, 9	5, 8		6
5.Baños	6, 8			2, 3, 4, 9	1, 7, 10	
6.Oficinas	5, 9	8	10		2,7	1, 3, 4
7.Cuarto de herramientas		2, 9	3, 4, 8	1	5, 6, 10	
8.Cuarto de limpieza	2, 5	3, 6	7	4	10	1,9
9.Estacionamiento	6	3, 7, 10	1, 2, 4	5		8
10.Recepcion	2, 4	1, 3, 9	6		5, 7, 8	

Figura 4.2.- Análisis de relacion de actividades



Los resultados muestran que la distribución de la planta no es muy eficiente y puede mejorar; para lograr un óptimo uso del espacio disponible, se debe modificar la distribución de acuerdo con el método Muher SLP y a las necesidades de la planta, llevar a cabo el proyecto es de gran importancia para acercarse a los objetivos de la empresa como son evitar retrasos, disminuir los tiempos de espera o tiempo muerto durante la jornada de trabajo, evitar los choques entre las rutas y disminuir la distancia entre los departamentos de pintura y los departamentos de llenado.

7. CONCLUSIONES

Gracias a las técnicas de registro se obtuvo un panorama claro de la eficiencia de las entregas, de los recorridos que hace los materiales dentro de la planta antes de salir a su destino y los accidentes más comunes y mejorar las medidas de seguridad durante la jornada de trabajo. También se analizaron a detalle los puestos de trabajo y el uso que se le da al material de trabajo y las molestias que causa a los trabajadores, en la mayor parte de los casos se debe al mal uso que se le dan a las herramientas. También se llegó a la conclusión de que es necesaria la capacitación para todos los trabajadores, la capacitación supera en varios aspectos a la experiencia obtenida empíricamente.

8. REFERENCIAS

- (s.f.). Obtenido de <http://www.ingenieriaindustrialonline.com/herramientas-para-el-ingeniero-industrial/ingenier%C3%ADa-de-metodos/t%C3%A9cnicas-de-registro-de-la-informaci%C3%B3n/>
- Ana. (19 de septiembre de 2014). *Planeación y diseño de instalaciones industriales*. Recuperado el 20 de febrero de 2016, de optimización y diseño: <http://padlet.com/anaurcuyo22/guia1intro>
- Benjamin, W. N., & FreivaldsAndris. (1990). *Ingeniería industrial*. México: Mc Graw Hill.
- López, B. S. (16 de 04 de 2012). *ingeniería industrial online*. Recuperado el 20 de 02 de 2016, de herramientas para el ingeniero industrial : <http://www.ingenieriaindustrialonline.com/herramientas-para-el-ingeniero-industrial/ingenier%C3%ADa-de-metodos/t%C3%A9cnicas-de-registro-de-la-informaci%C3%B3n/>

CAPÍTULO 6

-Ingeniería Química-

CINÉTICA DE LA TRANSICIÓN DE MICELAS ESFÉRICAS A CILÍNDRICAS EN COPOLÍMERO TRIBLOQUE.

G. LANDAZURI ⁽¹⁾, M. F. BARRAGAN ⁽¹⁾, E. BARAJAS ⁽¹⁾, E. TORRES ⁽¹⁾,
Y. RHARBI ⁽²⁾ & J.F.A. SOLTERO ⁽¹⁾

⁽¹⁾ *Departamento de Ingeniería Química, CUCEI, Universidad de Guadalajara, Guadalajara, Jal. 44430, MÉXICO, e-mail gabriel.landazuri@gmail.com*

⁽²⁾ *Laboratoire Rhéologie et Procédés, UJF/INPG/CNRS, UMR 5520, B.P.53, F-38041 Grenoble Cedex 9, FRANCE. e-mail rheologie@ujf-grenoble.fr*

RESUMEN: Se estudió la cinética de transición esfera a cilindro en micelas de copolimero tribloque P103 (PEO₁₇PPO₆₀PEO₁₇). Esta transición se indujo por un salto de temperatura de la fase de esfera a la fase de cilindro y se monitoriza con dispersión dinámica de luz. La combinación de la intensidad de dispersión y el radio hidrodinámico se utiliza para mostrar que las micelas crecen de manera constante en forma cilíndrica durante todo el proceso de crecimiento. Se encontró que la transición exhibe un comportamiento exponencial simple, incluso en el caso de grandes desviaciones del equilibrio. El aumento lineal en la velocidad de fragmentación con el aumento de la concentración de copolímero muestra que la transición es dominada por un mecanismo que implica la fusión y la fragmentación de micelas de tamaño normal.

PALABRAS CLAVE: Dinámica, micelas de copolimero, copolímeros anfifílicos.

ABSTRACT: The kinetics of the sphere-to-rod transition was studied in aqueous micelle solutions of triblock copolymer P103 (PEO₁₇PPO₆₀PEO₁₇). This transition was triggered by a temperature jump from the sphere phase to the rod phase and monitored with dynamic light scattering. The combination of the scattering intensity and the hydrodynamic radius were used to show that the micelles grow steadily as rods throughout the growth process. The transition was found to exhibit a single exponential behavior even in the case of large deviations from equilibrium. The linear increase in the decay rate with increasing copolymer concentration shows that the transition is dominated by a mechanism involving fusion and fragmentation of proper micelles.

KEYWORDS: dynamic, copolymer micelles, amphiphilic copolymers.

1. Introducción

Los copolímeros de bloque anfifílicos están diseñados para auto-ensamblarse en agua en forma de esferas, cilindros, etc. (Hamley, 2005; Alexandridis y Lindman, 2000). La cinética de transición de una morfología a otra es crucial en la definición de su uso para aplicaciones específicas, tales como la administración de fármacos, cosméticos, síntesis de materiales mesoestructurados, detergencia, y modificadores reológicos (Denkova *et al.*, 2010). En el caso en que la tensión superficial entre los bloques es grande, los agregados pueden ser atrapados en estados metaestables sin llegar a equilibrio termodinámico (Nicolai *et al.*, 2010; Lund *et al.*, 2006; Won *et al.*, 2003; Johnson y Prud'homme, 2003; Jacquin *et al.*, 2010; Lejeune *et al.*, 2010). Por lo tanto, la comprensión de la cinética de estas transiciones sigue siendo un gran reto para los diseños y control de varios aspectos de su aplicación.

1.1. Cinética en micelas de tensioactivo. La mayor parte de nuestro conocimiento sobre la dinámica de los sistemas de auto-asociativos proviene del estudio de cinética de tensioactivos (Aniansson y Wall, 1974; Aniansson *et al.* 1976; Wall y Aniansson, 1980; Kahlweit, 1982; Lessner *et al.* 1981; Rene y Bolhuis, 2006; Rharbi *et al.* 2000; Rharbi *et al.* 1999; Rharbi *et al.* 2003; Zana, 2005; Waton y Zana, 2007; Turner y Cates, 1990). Dichos estudios identifican dos mecanismos principales: uno consiste en la expulsión gradual e inserción de unímeros de tensioactivo (Gráfico 1), y la otra consiste en la fusión y fragmentación de micelas completas (Gráfico 2).

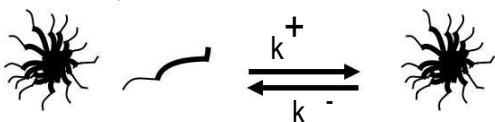


Gráfico 1

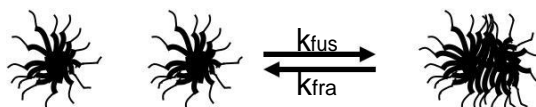


Gráfico 2

La mayoría de los experimentos cinéticos en tensioactivos que investigan el retorno al equilibrio después de una pequeña perturbación, producen dos relajaciones con diferentes escalas de tiempo. La cinética rápida es atribuida por Aniansson y Wall (AW) a la inserción de tensioactivo libre en las micelas existentes. Este proceso modifica el tamaño de las micelas sin afectar su número (Aniansson y Wall, 1974; Aniansson *et al.* 1976; Wall y Aniansson, 1980). Por otra parte, la cinética lenta se atribuyó a ya sea la disociación-crecimiento de micelas a través de inserción/expulsión sucesiva de unímeros (Aniansson y Wall, 1974; Aniansson *et al.* 1976; Wall y Aniansson, 1980) o a fusión y fragmentación (Kahlweit, 1982; Lessner *et al.* 1981; Rene y Bolhuis, 2006). La dinámica en equilibrio en micelas de tensioactivo se probó utilizando barrido de tiempo de fluorescencia con pruebas hidrofóbicas de pireno (Rharbi *et al.* 2000; Rharbi *et al.* 1999; Rharbi *et al.* 2003). Estos experimentos llegaron a la conclusión de que la fusión y la fragmentación tienen lugar en el equilibrio en tensioactivos no iónicos (Rharbi *et al.* 2000; Rharbi *et al.* 1999; Rharbi *et al.* 2003).

La dinámica de micelas tipo gusano fue descrito por Turner y Cates (1990) en términos de mecanismos de fusión y fragmentación. Este modelo predice una distribución exponencial de longitudes y un promedio de longitud de micelas $L \approx [\text{tensioactivo}]^{0.5}$.

1.2. Cinética de las micelas de copolímero de bloque. Contrariamente a los tensioactivos, la dinámica de los copolímeros de bloque es muy sensible a la calidad de disolvente y puede variar de lento a estancado (Lund *et al.* 2006; Won *et al.* 2003; Johnson y Prud'homme, 2003). Halperin

y Alexander (1989) predijeron que la dinámica de micelas de copolímero de bloque es dominada por inserción-expulsión de unímero. Sin embargo Dormidontova (1999) argumentó que fusión-fragmentación es favorable en la etapa temprana de la formación de micelas e inserción-expulsión de unímero llega a ser dominante en equilibrio.

Hay dos tipos de experimentos cinéticos de copolímeros de bloque, uno se ocupa de la dinámica en el equilibrio y el otro se ocupa de la transición entre las diferentes morfologías.

1.2.1. Dinámica en el equilibrio en copolímeros de bloque. La dinámica en equilibrio se deduce a partir de la cinética de aleatorización de las micelas de copolímero de bloque (Lund *et al.* 2006; Won *et al.* 2003; Van Stam *et al.* 2000; Rager *et al.* 1997; Underhill *et al.*, 1997). En estos experimentos utilizaron dispersión de neutrones resuelta en el tiempo a mezclas de copolímeros deuterados e hidrogenados (Lund *et al.* 2006; Won *et al.* 2003) o fluorescencia resuelta en el tiempo en copolímeros rotulados fluorescentemente (Van Stam *et al.* 2000; Rager *et al.* 1997; Underhill *et al.*, 1997). Debido a la aleatorización se encuentra que la cinética es independiente de la concentración de polímero, lo cual se atribuyó a mecanismos inserción-expulsión (Lund *et al.* 2006).

1.2.2. Dinámica de formación de micelas de copolímeros en bloque. Al igual que el caso de los tensioactivos, la transición monómero-micelas exhibe dos procesos; uno rápido y uno lento (Van Stam *et al.* 2000; Lund *et al.*, 2009). La cinética rápida está asociada a la formación de micelas metaestables a través de la inserción de copolímeros libres en las micelas existentes (Johnson y Prud'homme, 2003; Lund *et al.*, 2009). El proceso lento fue atribuido ya se a la fusión-fragmentación (Michels *et al.*, 1997) o a la inserción-expulsión (Lund *et al.*, 2009).

1.2.3. Dinámica de transición esfera-a-cilindro en copolímeros de bloque. La dinámica de la transición esfera-a-cilindro no se conoce del todo en copolímeros de bloque. Ha habido pocos estudios cinéticos de esta transición los cuales usan microscopía electrónica, dispersión de luz dinámica (DLS), y dispersión de neutrones (Zhang *et al.*, 2008; Lund *et al.*, 2009; Michels *et al.*, 1997; Burke y Eisenberg, 2001; LaRue *et al.*, 2006; Ma *et al.*, 2002; Lin *et al.*, 2010; Denkova *et al.* 2009; Kadam *et al.*, 2009; Lund *et al.*, 2011).

Esta transición es a menudo provocada por salto de cosolvente (Zhang *et al.*, 2008; Denkova, *et al.* 2009), salto de sal (Denkova, *et al.* 2009; Kadam *et al.*, 2009; Parekh *et al.*, 2012), o salto de temperatura (LaRue *et al.*, 2006). Burke y Eisenberg (2001) estudiaron la dinámica de transición esfera-a-cilindro en copolímeros de poliestireno-poli(ácido acrílico) (PS-PAA) en una mezcla de agua y solvente orgánico. Ellos atribuyeron la transición esfera-a-cilindro a un mecanismo que implica (i) la adhesión de micelas esféricas, (ii) la formación de collares en forma de cilindros, y (iii) el alisado de los cilindros (Burke y Eisenberg, 2001). También se describe la transición de cilindro a esfera que ocurre en dos pasos: (i) la formación de bulbos en los extremos de los cilindros y (ii) la separación de estos bulbos (Burke y Eisenberg, 2001). Otro estudio describe esta transición procediendo por formación al azar de bulbos a lo largo de los cilindros (Ma *et al.*, 2002).

Dos estudios recientes investigaron la dinámica lenta esfera-a-cilindro en el copolímero tribloque Pluronic P123 en una mezcla de agua, sal, y etanol (Denkova *et al.*, 2009; Kadam *et al.*, 2009).

Uno de estos estudios indicó que la transición podría ocurrir a través tanto de fusión como de fragmentación e intercambio de unímeros (Denkova *et al.* 2009).

En la mayor parte de los estudios de la dinámica en copolímeros de bloque, la transición es activada por salto de cosolvente. Sin embargo, un informe posterior mostró que la cooperación entre los solventes pueden afectar la transición entre morfologías en mezclas de solventes (Denkova *et al.*, 2011). Por lo tanto, resulta importante conocer la dinámica de la transición esfera-a-cilindro en copolímeros puros, sin aditivos (co-disolventes, sales, bases, o ácido). Un caso interesante es cuando la transición se activa por un salto de temperatura (T_{salto}) aplicado al caso de Poli (óxido de etileno)-poli (óxido de propileno)-poli (óxido de etileno) (PEO-PPO-PEO) que es una familia de copolímeros tribloque anfifílicos termosensibles que ha sido ampliamente utilizada para la liberación controlada de fármacos, la formulación farmacéutica, cosmética, bioseparación, y extracción (Schmolka, 1991; Kabanov *et al.*, 2002; Alexandridis, 1996).

Estos copolímeros en el agua, exhiben una concentración micelar crítica (CMC) y una temperatura micelar crítica (CMT). Estos se auto-ensamblan para formar micelas por encima de la CMT con el PPO como el núcleo y el PEO como coraza (Alexandridis, 1996; Alexandridis *et al.*, 1994). La cinética de Pluronic de bajo peso molecular fue investigado a fondo en experimentos de salto de temperatura (T_{salto}) y, al igual que tensioactivos no iónicos, se encontró que implican tanto la inserción-expulsión (AW) como la fusión-fragmentación (Hecht y Hoffmann, 1995; Michels y Waton, 1997; Goldmints *et al.* 1997; Kositzka *et al.*, 1999; Waton *et al.*, 1999; Kositzka *et al.*, 1999; Waton *et al.* 2001; Michels *et al.* 2001). El copolímero tribloque Pluronic P103 (PEO₁₇PPO₆₀PEO₁₇) de Mw intermedio es un buen candidato para la elaboración de los vínculos entre la dinámica de los tensioactivos Mw pequeño y copolímeros con Mw grandes.

En este trabajo, se investiga la dinámica de la transición esfera-a-cilindro en pluronic P103 en agua. La transición se inicia por el aumento de la temperatura de la zona micelar esférica a la zona de micelas cilíndricas. La intensidad de dispersión y el radio hidrodinámico de las micelas fueron monitoreados durante todo el experimento usando DLS. Se discute la posibilidad de que la transición esfera-a-cilindro sea dominada por la inserción-expulsión o la fusión-fragmentación. La dinámica de crecimiento se compara con la simulación para dos casos (1) fusión-fragmentación aleatoria y (2) adición sucesiva de esferas a micelas cilíndricas. Finalmente se calculan la constante de velocidad de segundo orden para la fusión y velocidad de fragmentación.

2. Materiales y métodos

El copolímero tribloque Pluronic P103 fue donado por BASF (lote No. WPAA632B), tiene un peso molecular nominal de 4950 g/mol con fórmula química PEO₁₆PPO₆₁PEO₁₆, el copolímero fue usado como se recibió, es decir, sin una purificación adicional.

Para la preparación de soluciones se utilizó agua bi-distilada y desionizada obtenida de un proceso de ultrafiltración milipore. Las soluciones de copolímero se prepararon en frascos de vidrio, pesando las cantidades necesarias de agua bi-distilada y el copolímero tribloque Pluronic P103. Una vez preparadas las muestras se colocaron en un agitador mecánico durante 12 horas para homogeneizar, se cubrieron con papel aluminio para evitar el contacto con la luz y se mantuvieron a la temperatura a la que serían posteriormente medidas para promover su estabilización.

Se realizaron mediciones de dispersión dinámica de luz en un equipo Zetasizer 4000 equipado con un analizador de partículas de ángulo variable con un intervalo de ángulos de 45-135°. El equipo opera con un láser de 5mw de He-Ne y una longitud de onda de 633 nm. El procesador de señal es un multi-bit correlador Marlvern 7132 y se utiliza una apertura de luz en el fotomultiplicador de 400 mm. La temperatura es controlada por medio de un peltier interno en el equipo. La función de correlación de intensidad es analizada por el método de CUMULATES (Koppel, 1972) para el cálculo del radio hidrodinámico aparente y la intensidad total de luz dispersada. La distribución de tamaños de las micelas se obtiene por la aplicación de la transformada de Laplace a la función de auto-correlación medida de los datos de intensidad de dispersión usando el programa CONTIN (Provencher, 1982). También se utilizó el equipo Zetasizer Nano ZS90 con capacidad de medición de en radio hidrodinámico de 0.3 nm a 5 micras utilizando óptica de dispersión de 90° en un rango de temperaturas de hasta 120°C.

3. Resultados y discusión

En esta sección se presentan los resultados experimentales del estudio de la dinámica micelar del sistema P103/agua a concentraciones y temperaturas por encima de las condiciones críticas a las cuales forman agregados micelares de forma esférica y cilíndrica.

3.1. Estructura micelar de las soluciones acuosas de P103.

En la figura 1 se muestra la dependencia del radio hidrodinámico (R_h) de una solución de P103 (3 % wt) con la temperatura abarcando las secciones de premicelización, de micelas esféricas y de micelas elongadas. Los radios hidrodinámicos se midieron en soluciones copoliméricas las cuales fueron previamente equilibradas por más de 12 h a cada temperatura. Se encontró que R_h es casi constante entre 25°C y 32°C y de aproximadamente 8 nm, similar al R_h reportado en varias ocasiones en la literatura (Liang *et al.*, 2007). La intensidad de dispersión no mostró una dependencia clara del ángulo, por lo que se infiere que las micelas permanecen esféricas en ese rango de temperatura. Por arriba de 33°C tanto R_h como la intensidad crecen rápidamente. El factor de forma obtenido de $I_{135^\circ}/I_{45^\circ}$ crece al incrementar la temperatura y a 40°C $I_{135^\circ}/I_{45^\circ} = 1.3$. Esto sugiere que las micelas de P103 crecen longitudinalmente conforme la temperatura rebasa los 32°C.

Como se muestra en la figura 2, el tamaño micelar presentó dependencia de la concentración de copolímero. En el régimen de micelas alargadas, a concentraciones bajas de copolímero se forman micelas de mayor tamaño que las formadas a concentraciones mayores dentro del intervalo estudiado. Esto puede deberse a desviaciones en la linealidad en las mediciones de dispersión de luz a altas concentraciones causado por la cercanía de las micelas, puede deberse también a la proximidad con el punto de enturbiamiento u otra posibilidad es que la cercanía entre micelas, abundancia de cadenas poliméricas y choques entre micelas permita que la dinámica micelar sea más efectiva y que provoque que las micelas sean más pequeñas.

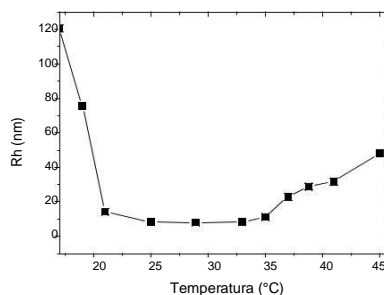


Figura 1.- Dependencia del radio hidrodinámico Rh (■) en la temperatura para una solución 3 % wt. de P103 en agua medida a un ángulo de 90°.

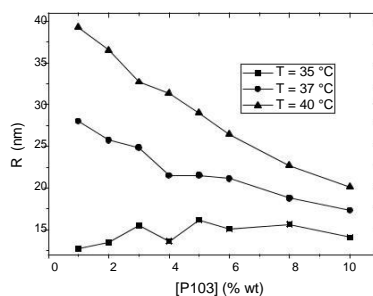


Figura 2.- Dependencia del radio hidrodinámico Rh con la concentración para soluciones de P103 en agua a temperaturas de 35, 37 y 40 °C medidas a un ángulo de 90°.

3.2. Experimentos cinéticos usando la intensidad total de dispersión.

Cuando la temperatura fue rápidamente incrementada de T_1 a T_2 tanto la intensidad total de dispersión (I_{disp}) como el radio hidrodinámico crecen durante los siguientes minutos u horas. La velocidad de incremento depende en gran medida de la concentración del copolímero en solución. La figura 3a muestra el decaimiento de la intensidad total de dispersión vs tiempo para una solución de P103 al 2 % wt después de cambiar súbitamente la temperatura de 25°C a 40°C. El decaimiento cinético se ajusta razonablemente a una función mono-exponencial con un tiempo de relajación aparente τ (ecuación 1). Esto sugiere que el decaimiento creciente está compuesto por un proceso único.

En la literatura experimentos de salto de temperatura en copolímeros tribloque plurónicos como L64 (Waton *et al.*, 2001; Muller, 1979; Gormally *et al.*, 1980; Lang y Zana, 1987; Huibers *et al.*, 1995) y F85 (Goldmints *et al.*, 1997) muestran dos cinéticas de intercambio claras; una rápida y otra lenta. Se encontró que la intensidad de dispersión crece en el proceso rápido y después decrece en el proceso lento (segundo proceso) a temperaturas moderadas por arriba de la cmt o crece nuevamente (tercer proceso) a altas temperaturas. El primer proceso está asociado con la incorporación de copolímero libre en las micelas lo cual genera micelas metaestables de mayor tamaño que las micelas propias. La concentración de macromoléculas de copolímeros libres en P103 se encontró alrededor de ≈ 0.07 % wt a 25 °C y decrece al aumentar la temperatura y a 40°C la concentración micelar crítica (cmc) es despreciable ($cmc < 0.01\%$) (Waton *et al.*, 1999). Como la concentración de copolímero libre es despreciable comparada con el micelizado, el incrementar la temperatura no induce crecimiento de las micelas por incorporación de monómero

libre en ellas. Cuando la cinética fue monitoreada entre t_{mc} y 26°C , fue monitoreado un proceso rápido en la intensidad de dispersión y fue atribuido a la condensación de copolímero libre en las micelas (Rharbi y Wiinik, 1999 Rharbi *et al.*, 2000; Rharbi y Wiinik, 2002; Rharbi y Wiinik, 2003; Rharbi *et al.*, 2004). El crecimiento lento de la intensidad en nuestra cinética parece corresponder al tercer proceso lento observado en los experimentos de salto de temperatura en pluronics L64 y P85 (Michels *et al.*, 2001; Goldmints *et al.*, 1997; Michels y Waton, 1997; Kositzta *et al.*, 1999; Waton *et al.*, 2001; Muller, 1979; Gormally *et al.*, 1980; Lang y Zana, 1987; Huibers *et al.*, 1995). La cinética lenta puede envolver varios mecanismos: 1) deshidratación de las micelas 2) condensación cooperativa y disolución de monómeros y 3) proceso fusión–fragmentación o 4) proceso fragmentación–crecimiento.

$$I_{scat}(t) = (I_{scat}(\infty) - I_{scat}(0)) \cdot \exp(-t/\tau) + I_{scat}(\infty) \quad [1]$$

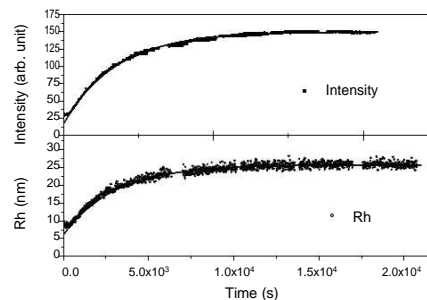


Figura 3.- Intensidad dispersada (a) y radio hidrodinámico (b) vs. tiempo para soluciones acuosas de P103 ([P103]=2.0 %) después de transferir la solución de una temperatura $T_1 = 25^\circ\text{C}$ a $T_2 = 40^\circ\text{C}$. Los decaimientos se ajustaron a una expresión mono-exponencial (líneas sólidas).

3.3. Cinética del tamaño micelar

La intensidad total contiene información del tamaño micelar promedio, de la polidispersidad, de la distribución de tamaños así como del contenido de agua en las micelas. Para micelas monodispersas, la intensidad de dispersión puede ser escrita como sigue

$$I_{disp} \propto (n_{mic} - n_w)^2 \phi_{mic} \cdot V_{mic} \quad [2]$$

donde V_{mic} es la fracción volumen de las micelas, ϕ_{mic} es la fracción volumen de tensioactivo, n_{mic} y n_w son los índices refractivos de las micelas y agua respectivamente. Durante el proceso de relajación todos esos parámetros pueden variar simultáneamente, y pueden complicar la descripción del proceso dinámico. En particular el proceso rápido correspondiente al incremento rápido de la intensidad de dispersión podría ser atribuido ya sea a incremento del tamaño micelar o a la deshidratación de las micelas. Consecuentemente, la variación de cada uno de los parámetros micelares debe ser monitoreada de manera individual. En la figura 3b se muestra el cambio del radio hidrodinámico (R_H) con el tiempo para [P103] = 2 % wt. Los decaimientos de R_H son también compuestos por un proceso único, lo cual confirma que el proceso que envuelve interacciones monómero-micela no es relevante en este rango de temperaturas. El decaimiento de

R_H se ajusta razonablemente a una expresión mono exponencial con una velocidad $k_{obs}^{RH} = 1/\tau$.

$$R_H(t) = (R_H(\infty) - R_H(0)) \cdot \exp(-t/\tau) + R_H(\infty) \quad [3]$$

Si las micelas crecen con tendencia a elongarse es más apropiado seguir el crecimiento de su longitud. Como el crecimiento de micelas alargadas puede ser calculado a partir del radio

hidrodinámico, podemos seguir con seguridad la dinámica usando el decaimiento de R_h . Deberíamos enfatizar en que a bajas concentraciones de P103, R_h es representativo de la longitud de contorno de las micelas alargadas mientras cerca y por encima de la concentración de superposición, el decaimiento de R_h refleja la cinética del tamaño de malla de la red transitoria.

3.4. Decaimiento cinético de la relación de aspecto.

Las micelas crecen longitudinalmente durante el proceso de crecimiento. Esto se observa en la evolución del factor asimétrico, que se estimó de la relación intensidad a 135° entre la intensidad a 45° (figura 4) la relación $I_{135^\circ}/I_{45^\circ} \approx 0.9$ a 25°C es cercana a 1 y corresponde a micelas esféricas. Después del salto de temperatura de 25°C a 40°C , $I_{135^\circ}/I_{45^\circ}$ aumenta progresivamente con el tiempo y alcanza un máximo de 1.3, lo que indica que la presencia de micelas alargadas. Este decaimiento también se ajusta a una función mono exponencial con tiempo característico similar al estimado en el decaimiento de R_h . Esto hace deducir que las micelas crecen longitudinalmente durante el proceso de relajación y solo su longitud aumenta con el tiempo.

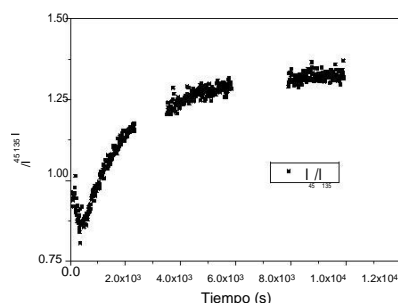


Figura 4.- Factor de aspecto $I_{45^\circ}/I_{135^\circ}$ vs. tiempo para soluciones acuosas de P103 ($[P103] = 3.0$ %) después de transferir la solución de una temperatura $T_1 = 25^\circ\text{C}$ a $T_2 = 40^\circ\text{C}$. I_{45° e I_{135° son las intensidades dispersadas medidas a 45° y 135° respectivamente.

3.5. Velocidad de intercambio

Los decaimientos de relajación de P103 con $\tau = 6400$ s para 1 % wt a 187 s para 10 % son extremadamente pequeños comparados con los de pluronics más hidrofílicos tales como L64 (Waton *et al.*, 2001; Muller, 1979; Gormally *et al.*, 1980; Lang y Zana, 1987; Huibers *et al.*, 1995) y P84 (Goldmints *et al.*, 1997), que dan un tiempo de crecimiento del orden de milisegundos en la escala de tiempo. La cinética de intercambio depende de la relación PPO/PEO así como de la longitud del bloque PPO. Por ejemplo L64 (EO₁₃PO₃₀EO₁₃), P84 (EO₁₉PO₄₃EO₁₉) y P104 (EO₂₇PO₆₁EO₂₇), donde PPO/PEO entre 1.13 y 1.15 exhiben tiempos de relajación de milisegundos. El copolímero P103 (EO₁₇PO₆₀EO₁₇) con PPO/PEO = 1.76 da tiempos de relajación en el rango de 100s – 6000s. Un sistema más hidrófobo, el pluronic P123 (EO₂₀PO₇₀EO₂₀) con PPO/PEO = 1.75 y bloque PPO más largo exhibe tiempos de relajación del orden de días en ausencia de aditivos.

El decaimiento creciente de P103 disminuye al decrecer la concentración de polímero en el rango de concentración investigado (figura 5). La velocidad de crecimiento calculada a partir de la intensidad de dispersión $k_{\text{obs}}^I = 1/\tau$ crece desde 0.00015483 s^{-1} y 0.0053 s^{-1} para [P103] entre 1 % wt y 10 % wt (figura 6). Cuando la velocidad de intercambio fue monitoreada usando el decaimiento del radio hidrodinámico, (k_{obs}^{RH}), la k_{obs}^{RH} se encontró superponible con el trazo

de k_{obs}^I , para el rango completo de [P103] investigado (figura 6). La cinética de intercambio en pluronic puede englobar el cambio de varios parámetros: el número de copolímeros por micela (N_{agg}), la distribución de tamaños, o incluso el contenido de agua (Waton *et al.*, 2001). Si el experimento cinético solo abarcara la variación del N_{agg} , entonces $I_{disp} \propto N_{agg} \propto V_{mic} \propto RH^3$ (ecuaciones 1, 2 y 3) y en el caso de decaimientos exponenciales $k_{obs}^I = 3 \cdot k_{obs}^{RH}$. Sin embargo, como $k_{obs}^I \approx k_{obs}^{RH}$, podemos concluir que la cinética de micelas propias a micelas alargadas envuelve el cambio de otros parámetros adicionalmente a la variación del número de agregación, tales como el índice refractivo y la distribución de tamaños.

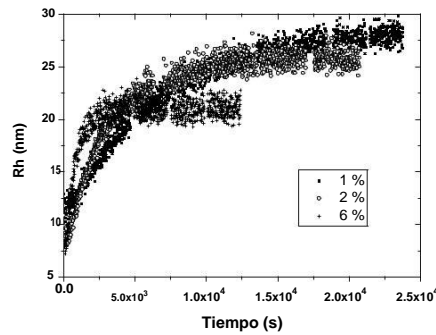


Figura 5.- Radio hidrodinámico R_h vs. tiempo para soluciones acuosas de P103 después de transferir las soluciones de una temperatura $T_1 = 25\text{ }^\circ\text{C}$ a $T_2 = 40\text{ }^\circ\text{C}$ para [P103] = 1.0 %, 2% y 6%

El incremento en las velocidades de crecimiento al aumentar la concentración de copolímero (figura 6) puede ser explicada por medio de un proceso de segundo orden probablemente envolviendo fusión de micelas o fragmentos en una larga. En el caso en que el proceso de crecimiento es dominado por el proceso colisión fusión se espera que la velocidad k varíe linealmente con la concentración de P103 si la velocidad de segundo orden es constante. Por otro lado, en el caso de agregados grandes y para pequeñas desviaciones del equilibrio k es predicha a crecer de cómo $[C_0]^{0.6}$. Este no es el caso, k se encuentra que crece como $k \propto [P103]^\alpha$ con un exponente $\alpha = 1.54$ para R_H y 1.42 para la intensidad. Resultados similares fueron reportados por Denkova *et al.* (2009) quienes encontraron la velocidad de crecimiento el pluronic P123 en presencia de etanol y KCl y vario en la razón $[P123]^{1.1}$.

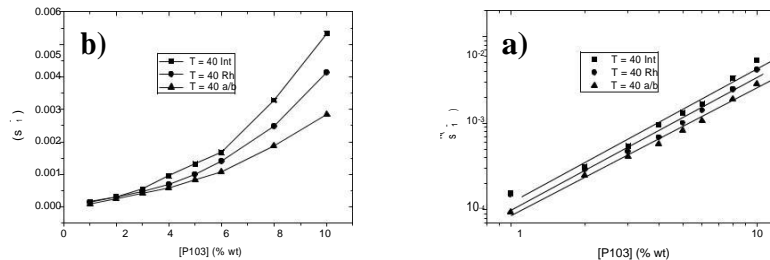


Figura 6.- a) Velocidad de crecimiento (k) calculada al ajustar los decaimientos a una expresión mono exponencial graficada contra la concentración de P103. k se calculó del decaimiento de la intensidad dispersada (■), del decaimiento de R_h (●) y de la relación a/b del modelo de Perrin para micelas alargadas (▲). b) Grafica de k vs. [P103] representada en escala log-log ajustada a ley de la potencia. El decaimiento se midió después que la solución se transfirió de una temperatura $T_1 = 25\text{ }^\circ\text{C}$ a $T_2 = 40\text{ }^\circ\text{C}$

3.6. Efecto de la temperatura en el proceso de crecimiento

La figura 7 presenta la cinética de crecimiento monitoreada a 35 °C, 37 °C y 40 °C para el sistema P103/agua. Los valores finales de R_h se encontró que crecen al aumentar la temperatura, 13nm a 35 °C, 25nm a 37 °C y 35nm a 40 °C. Por otro lado, se encontró que la velocidad de intercambio (k) es casi independiente de la temperatura dentro de la precisión de nuestro experimento (figura 8). Este resultado infiere que mientras el tamaño de las micelas crece alrededor de 2.7 veces entre 35 °C y 40 °C, k permanece casi constante en este rango de temperatura. Esto muestra que la constante de velocidad de segundo orden es independiente de la temperatura entre 35 °C y 40 °C.

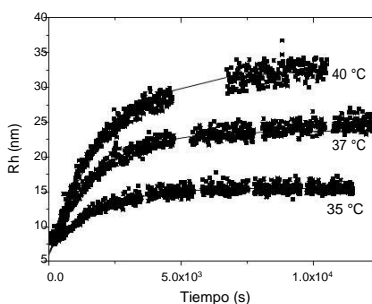


Figura 7.- Radio hidrodinámico R_h vs. tiempo para soluciones acuosas de P103 ($[P103] = 3.0 \%$) después de transferir la solución de una temperatura $T_1 = 25 \text{ °C}$ a T_2 para $T_2 = 35 \text{ °C}$, 37 °C y 40 °C .

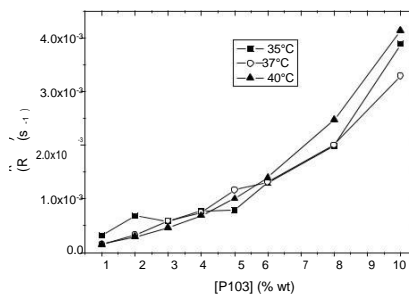


Figura 8.- Velocidad de crecimiento (k) calculada del ajuste de decaimientos de R_h a una expresión mono-exponencial, graficado contra la concentración de P103. El decaimiento fue medido después de haber transferido la solución de $T_1 = 25 \text{ °C}$ a T_2 para $T_2 = 35 \text{ °C}$ (■) 37 °C (○) y 40 °C (▲)

3.7. Transición de micelas alargadas a micelas esféricas

Para todas las muestras estudiadas observamos que la transición de esferas a micelas alargadas es mucho más lenta que la transición contraria, de cilindros a esferas. Cuando se disminuyó la temperatura de 40 °C a 25 °C, R_h decrece en menos de 10 segundos mientras para la misma concentración la transición de esferas a micelas alargadas toma más de 1h (figura 9). En estas condiciones no podemos medir cuantitativamente el tiempo característico τ para la transición de micelar de gusanos a esferas porque este tiempo es menor que el que se toma para que la temperatura cambie. El proceso de crecimiento es más bien de segundo orden y envuelve la interacción de al menos dos micelas. La velocidad de difusión controlada es de orden mayor, más rápida que el proceso de crecimiento observado. Por lo tanto el crecimiento no es por difusión controlada pero reacciona como tal. Esta reacción es inhibida por repulsión estérica entre las micelas y la geometría de interacción entre ellas. Por otro lado, el rompimiento micelar es un

proceso de primer orden y depende principalmente de la interacción molecular dentro de la micela.

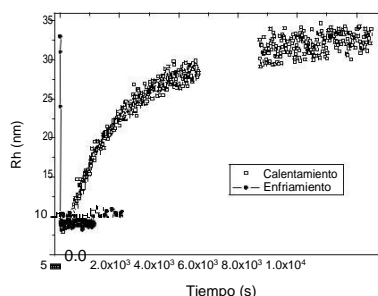


Figura 9.- Radio hidrodinámico R_h vs. tiempo para soluciones acuosas de P103 ($[P103] = 3.0$ %), después de transferir la solución de una temperatura $T_1 = 25$ °C a $T_2 = 40$ °C comparando con el decaimiento de la misma solución transferida de una temperatura $T_1 = 40$ °C a $T_2 = 25$ °C

3.8. Mecanismo del proceso de crecimiento

La mayoría de los experimentos de salto de temperatura monitoreados usando dispersión de luz mostraron un proceso lento con amplitud negativa justo por encima de la *cmt* (segundo proceso) y un tercer proceso a alta temperatura con amplitud positiva cerca al punto de enturbiamiento (tercer proceso). El segundo proceso fue atribuido a la formación–ruptura de las micelas y el tercero fue atribuido al colapsamiento–fragmentación de micelas. Por otro lado, Zana *et al.* propusieron que en sus experimentos que los dos procesos presentan mecanismos similares “formación–ruptura”. Estos experimentos fueron llevados a cabo usando la evolución de la intensidad de dispersión y las conclusiones se hicieron suponiendo el número de micelas, el número de agregación y el contenido de agua de las micelas. Como la cinética de la intensidad de dispersión contiene varios parámetros interconectados, es más relevante discutir la cinética usando el cambio en el radio micelar. El segundo proceso reportado previamente envuelve una reducción del tamaño micelar vía ruptura de las micelas en varios tamaños desde cadenas de copolímero hasta sub-micelas y la integración de dichas especies en otras micelas. Por otra parte, el tercer proceso observado envuelve el crecimiento del tamaño micelar vía condensación de monómero o fusión de micelas propias o fragmentos de micela (sub-micelas) formando micelas alargadas.

La distribución de tamaños no mostró traza alguna de monómeros libres durante el proceso de intercambio de esferas a la forma alargada. Esto puede sugerir que el proceso de crecimiento envuelve condensación de monómero libre pero es dominado por fusión de micelas propias o fragmentos micelares. Esto también es corroborado por el incremento de la velocidad de intercambio con la concentración de polímero.

Debido a que el incremento en el tamaño de las micelas alargadas con la temperatura es de 2.7 veces entre 35 °C y 40 °C, no es seguida por variación alguna en la velocidad de crecimiento (k) podemos concluir que el mecanismo de la cinética de crecimiento no es controlada por las condiciones termodinámicas que controlan el tamaño final de las micelas.

El proceso de crecimiento puede tomar lugar por medio de varias vías posibles:

1) Podemos imaginar que las cadenas copolimericas y fragmentos micelares integran micelas propias solo para formar micelas termodinámicamente estables. De acuerdo a este proceso, cuando las pre-micelas se unen a micelas propias, directamente forman micelas con la

distribución de tamaño final. Este proceso llevaría a dos poblaciones de micelas, una de micelas propias de tamaño pequeño que crecen a expensas de las grandes, las cuales se encogen. En el mejor de los casos, se observaría una distorsión de la distribución de tamaños durante la cinética de intercambio. Este mecanismo no concuerda con la evolución observada de la distribución de tamaños, es decir, una población de micelas.

2) El otro mecanismo posible envuelve eventos sucesivos fusión–condensación de micelas /cadenas poliméricas en micelas propias para producir cualquier tamaño de micelas hasta que se obtenga un tamaño micelar termodinámicamente estable. En contraste con el mecanismo previo, que permite solo el evento de producir micelas estables, el mecanismo de crecimiento presente produce micelas de cualquier tamaño. Este mecanismo puede describir la evolución observada de la distribución de tamaños, donde el tamaño promedio de partícula decrece y la polidispersidad relativa permanece constante. Por lo tanto un mecanismo envolviendo fragmentación sucesiva de agregados en micelas cualquier tamaño puede describir mejor los resultados experimentales.

3.9. Números de agregación

La cinética micelar envuelve parámetros tales como tamaño micelar, polidispersidad, distribución de tamaños, número de cadenas poliméricas por micela (número de agregación N_{agg}), contenido de humedad etc. El número de agregación es uno de los parámetros importantes para describir directamente la evolución temporal de las micelas y su distribución de tamaño en experimentos cinéticos. Existen algunas técnicas para determinar los números de agregación de sistemas micelares diversos, entre ellas están SANS, DLS-viscosidad intrínseca, SLS, fluorescencia de extinción resuelta en el tiempo, etc. además de modelos que a partir de algunos datos experimentales o termodinámica predicen números de agregación a condiciones diferentes o de otros sistemas (Foster *et al.*, 2009; Nolan *et al.*, 1997; Alexandridis *et al.*, 1994, Leermakers, 1989; Denkova *et al.*, 2008; Mazer *et al.*, 1976).

En este trabajo se optó por buscar datos experimentales reportados en la literatura y aplicar el modelo de Perrin como lo reportan Mazer *et al.* (1976) tomando como datos experimentales lo reportado por Nolan *et al.* (1997). A partir del modelo de Perrin se determinaron los números de agregación para el sistema P103/agua a temperaturas entre 21 y 45 °C mediante el modelo para micelas esféricas, alargadas, y tipo disco, además de las relaciones de intensidades. Como se observa en la figura 10, el modelo que más se acerca a los resultados experimentales (relaciones de intensidad de dispersión) es el de esferas alargadas (prolate) por lo que es el que se tomó para el cálculo de los números de agregación tomando como referencia el dato reportado por Nolan *et al.* (1997) donde menciona que a 25 °C el número de agregación para P103 es de 86.

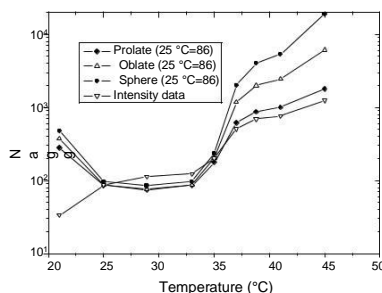


Figura 10.- Números de agregación en función de la temperatura para el sistema P103/Agua al 3 % en peso de concentración, obtenidos por modelado a las geometrías de esferas, micelas alargadas, micelas tipo disco y su comparación con la proporcionalidad a intensidad relativa.

4. Conclusiones

Este capítulo describe la dinámica de la transición micelar de micelas esféricas a micelas cilíndricas en soluciones acuosas de copolímero tri-bloque P103. Experimentos de salto de temperatura monitoreados por dispersión de luz dinámica permiten investigar la cinética de transición de micelas esféricas a micelas cilíndricas. La dinámica de crecimiento presentan un proceso relativamente lento con un tiempos característicos que van desde 700 s a varias horas. Esta cinética se puede cuantificar de forma equivalente por la intensidad de dispersión, el radio hidrodinámico o longitud micelar.

Se demuestra que las micelas crecen en forma de barras largas en todo el proceso de crecimiento. El aumento lineal de la velocidad de relajación al aumentar la concentración de copolímero demuestra que esta transición está dominada por un mecanismo que implica fusión y fragmentación de micelas de tamaño normal. Se demuestra que el crecimiento se produce por fusión-fragmentación al azar de todas las micelas. Los decaimientos de crecimiento no pueden explicarse si el proceso solo implicara la adición sucesiva de micelas esféricas a micelas cilíndricas.

Las constantes de velocidad, la de segundo orden para la fusión (k_{fus}) y de primer orden para fragmentación (k_{fra}) se estiman para el caso de fusión fragmentación aleatoria.

Soluciones acuosas de P103 presentan agregados micelares en forma de esfera a temperaturas por encima de la *tmc* (aproximadamente 18°C para 3 % wt) y por debajo de 32°C, temperatura por encima de la cual se forman micelas cilíndricas teniendo como limite la temperatura de enturbiamiento la cual varía con la concentración. Los radios hidrodinámicos de micelas formadas en soluciones acuosas de P84 y L64 aumentan por encima de 47 y 42°C respectivamente y se sugiere que crecen en forma de cilindros como es reportado por diversos autores (Ganguly *et al.*, 2009; Waton *et al.*, 2001; Mesa *et al.* 2007).

REFERENCIAS

Alexandridis, P. (1996). "Amphiphilic copolymers and their applications". *Curr. Opin. Colloid Interface Sci.*, 1, 490.

- Alexandridis, P., Lindman, B., Eds.** (2000). *Amphiphilic Block Copolymers: Self-Assembly and Applications*. Elsevier: Amsterdam.
- Alexandridis, P.; Holzwarth, J. F.; Hatton, T. A.** (1994). "Micellization of Poly(ethylene oxide)-Poly(propylene oxide)-Poly(ethylene oxide) Triblock Copolymers in Aqueous Solutions: Thermodynamics of Copolymer Association". *Macromolecules*, 27, 2414.
- Aniansson, E. A. G.; Wall, S. N.** (1974). "Kinetics of step-wise micelle association". *J. Phys. Chem.*, 78, 1024.
- Aniansson, E. A. G.; Wall, S. N.; Almgren, M.; Hoffmann, H.; Kielmann, H.; Ulbricht, W.; Zana, R.; Lang, J.; Tondre, C.** (1976). "Theory of the kinetics of micellar equilibria and quantitative interpretation of chemical relaxation studies of micellar solutions of ionic surfactants". *J. Phys. Chem.*, 80, 905.
- Burke, S. E.; Eisenberg, A.** (2001). "Kinetics and Mechanisms of the Sphere-to-Rod and Rod-to-Sphere Transitions in the Ternary System PS310-b-PAA52/Dioxane/Water". *Langmuir*, 17, 6705.
- Denkova A.G., Mendes E., Coppens M.-O.** (2008). "Effects of Salts and Ethanol on the Population and Morphology of Triblock Copolymer Micelles in Solution". *J. Phys. Chem. B*, 112, 793.
- Denkova A.G., Mendes E., Coppens M.-O.** (2009). "Kinetics and Mechanism of the Sphere-to-Rod Transition of Triblock Copolymer Micelles in Aqueous Solutions". *J. Phys. Chem B.*, 113, 989.
- Denkova, A. G.; Bomans, P. H. H.; Coppens, M.-O.; Sommerdijk, N. A. J. M.; Mendes, E.** (2011). "Complex morphologies of self-assembled block copolymer micelles in binary solvent mixtures: the role of solvent-solvent correlations". *Soft Matter*, 7, 6622-6628.
- Denkova, A. G.; Mendes, E.; Coppens, M.-O.** (2010). "Non-equilibrium dynamics of block copolymer micelles in solution: recent insights and open questions". *Soft Matter*, 6, 2351.
- Dormidontova, E. E.** (1999). "Micellization Kinetics in Block Copolymer Solutions: Scaling Model". *Macromolecules*, 32, 7630.
- Foster, B.; Cosgrove, T.; Hammouda, B.** (2009). "Pluronic Triblock Copolymer Systems and Their Interactions with Ibuprofen". *Langmuir*, 25(12), 6760.
- Ganguly, R.; Kumbhakar, M.; Aswal, V. K.** (2009). "Time Dependent Growth of the Block Copolymer P123 Micelles near Cloud Point: Employing Heat Cycling as a Tool to form Kinetically Stable Wormlike Micelles" *J. Phys. Chem. B*, 113, 9441.
- Goldmints, I.; Holzwarth, J. F.; Smith, K. A.; Hatton, T. A.** (1997). "Micellar Dynamics in Aqueous Solutions of PEO-PPO-PEO Block Copolymers†". *Langmuir*, 13, 6130.
- Gormally, J.; Gettins, W. J.; Wyn-Jones, E.,** (1980). *In Molecular Interactions, Vol. 2*, Wiley, New York, 143.
- Halperin, A.; Alexander, S.** (1989). "Polymeric micelles: their relaxation kinetics". *Macromolecules*, 22, 2403.
- Hamley, W.** (2005). *Block Copolymers in Solution*. Hamley, I. W., Ed.; John Wiley & Sons: San Francisco, CA.
- Hecht, E.; Hoffmann, H.** (1995). "Kinetic and calorimetric investigations on micelle formation of block copolymers of the poloxamer type". *Colloids Surf. A*, 96, 181.
- Huibers, P. D. T.; Oh, S. G.; Shah, D. O.** (1995). *In Surfactants in Solution*, Vol. 64, Chattopadhyay, A. K.; Mittal, K. L., Eds., Marcel Dekker, New York, 105.

- Jacquin, M.; Muller, P.; Cottet, H.; Theodoly, O.** (2010). "Self-Assembly of Charged Amphiphilic Diblock Copolymers with Insoluble Blocks of Decreasing Hydrophobicity: From Kinetically Frozen Colloids to Macrosurfactants". *Langmuir*, 26, 18681.
- Johnson, B. K.; Prud'homme, R. K.** (2003). "Mechanism for Rapid Self-Assembly of Block Copolymer Nanoparticles". *Phys. Rev. Lett.*, 91, 118302.
- Kabanov, A. V.; Batrakova, E. V.; Alakhov, V. Y.** (2002). "Pluronic® block copolymers for overcoming drug resistance in cancer". *Adv. Drug Delivery Rev.*, 54, 759.
- Kadam, Y.; Ganguly, R.; Kumbhakar, M.; Aswal, V. K.; Hassan, P. A.; Bahadur, P.** (2009). "Time Dependent Sphere-to-Rod Growth of the Pluronic Micelles: Investigating the Role of Core and Corona Solvation in Determining the Micellar Growth Rate". *J. Phys. Chem. B*, 113, 16296.
- Kahlweit, M.** (1982). "Kinetics of formation of association colloids". *J. Colloid Interface Sci.*, 90, 92.
- Koppel, D.E.**, (1972). "Analysis of Macromolecular Polydispersity in Intensity Correlation Spectroscopy: The Method of Cumulants" *J. Chem Phys.*, 57, 4814.
- Kositza, M. J.; Bohne, C.; Alexandridis, P.; Hatton, T. A.; Holzwarth, J. F.** (1999). "Dynamics of Micro- and Macrophase Separation of Amphiphilic Block-Copolymers in Aqueous Solution". *Macromolecules*, 32, 5539.
- Kositza, M. J.; Bohne, C.; Alexandridis, P.; Hatton, T. A.; Holzwarth, J. F.** (1999). "Micellization Dynamics and Impurity Solubilization of the Block-Copolymer L64 in an Aqueous Solution" *Langmuir*, 15, 322.
- Lang, J.; Zana, R.** (1987). *In Surfactant Solutions: New Methods of Investigation*, Zana, R., Ed., Marcel Dekker, New York, 405.
- LaRue, I.; Adam, M.; Pitsikalis, M.; Hadjichristidis, N.; Rubinstein, M.; Sheiko, S. S.** (2006). "Reversible Morphological Transitions of Polystyrene-b-polyisoprene Micelles" *Macromolecules*, 39, 309.
- Leermakers, F.A.M. and Scheutjens, J.M.H.M.** (1989). "Statistical thermodynamics of association colloids. 2. Lipid vesicles" *J. Phys. Chem.*, 93, 7417.
- Lejeune, E.; Drechsler, M.; Jestin, J.; Muller, A. H. E.; Chassenieux, C.; Colombani, O.** (2010). "Amphiphilic Diblock Copolymers with a Moderately Hydrophobic Block: Toward Dynamic Micelles". *Macromolecules*, 43, 2667.
- Lessner, E.; Teubner, M.; Kahlweit, M.** (1981). "Relaxation experiments in aqueous solutions of ionic micelles. 2. Experiments on the system water-sodium dodecyl sulfate-sodium perchlorate and their theoretical interpretation". *J. Phys. Chem.*, 85, 3167.
- Liang, X.; Guo, C.; Ma, J.; Wang, J.; Chen, S.; Liu, H.** (2007). "Temperature-Dependent Aggregation and Disaggregation of Poly(ethylene oxide)-Poly(propylene oxide)-Poly(ethylene oxide) Block Copolymer in Aqueous Solution" *J Phys. Chem B*, 111, 13217.
- Lin, W.; Zheng, C.; Wan, X.; Liang, D.; Zhou, Q.** (2010). "Chemically induced supramolecular reorganization of triblock copolymer assemblies: Trapping of intermediate states via a shell-crosslinking methodology". *Macromolecules*, 43, 5405.
- Lund, R.; Pipich, V.; Willner, L.; Radulescu, A.; Colmeneroabe, J.; Richter, D.** (2011). "Structural and thermodynamic aspects of the cylinder-to-sphere transition in amphiphilic diblock copolymer micelles". *Soft Matter*, 7, 1491.

- Lund, R.; Willner, L.; Monkenbusch, M.; Panine, P.; Narayanan, T.; Colmenero, J.; Richter, D.** (2009). "Structural Observation and Kinetic Pathway in the Formation of Polymeric Micelles" *Physical Review Letters*, 102, 188301.
- Lund, R.; Willner, L.; Richter, D.** (2006). "Equilibrium Chain Exchange Kinetics of Diblock Copolymer Micelles: Tuning and Logarithmic Relaxation". *Macromolecules*, 39, 4566.
- Lund, R.; Willner, L.; Stellbrink, J.; Lindner, P.; Richter, D.** (2006). "Logarithmic Chain-Exchange Kinetics of Diblock Copolymer Micelles". *Physical Review Letters*, 96, 068302.
- Ma, Q.; Remsen, E. E.; Clark, C. G.; Kowalewski, T.; Wooley, K. L.** (2002). "Chemically induced supramolecular reorganization of triblock copolymer assemblies: Trapping of intermediate states via a shell-crosslinking methodology". *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 99, 5058.
- Mazer, N.; Benedek, G.; Carey, M.** (1976). "An investigation of the micellar phase of sodium dodecyl sulfate in aqueous sodium chloride solutions using quasielastic light scattering spectroscopy". *The Journal of Physical Chemistry*, 80, 10.
- Mesa, M.; Sierra, L.; Guth J. L.** (2008). "Contribution to the study of the formation mechanism of mesoporous SBA-15 and SBA-16 type silica particles in aqueous acid solutions". *Microporous and Mesoporous Materials*, 112, 338.
- Michels, B.; Waton, G.; Zana, R.** (1997). "Dynamics of Micelles of Poly(ethylene oxide)-Poly(propylene oxide)-Poly(ethylene oxide) Block Copolymers in Aqueous Solutions". *Langmuir*, 13, 3111.
- Michels, B.; Waton, G.; Zana, R.** (2001). "Evidence of micelle growth in aqueous solutions of the amphiphilic poly(ethylene oxide)-poly(propylene oxide)-poly(ethylene oxide) triblock copolymers from differential scanning microcalorimetry". *Colloids Surf. A*, 183-185, 55.
- Muller, N.** (1979). *In Solution Chemistry of Surfactants, Vol. I*, Mittal, K. L., Ed. Plenum, New York, 267.
- Nicolai, T.; Colombani, O.; Chassenieux, C.** (2010). "Dynamic polymeric micelles versus frozen nanoparticles formed by block copolymers". *Soft Matter*, 6, 3111.
- Nolan, S.L.; Phillips, R.J.; Cotts, P.M.; Dungan, S.R.** (1997). "Light Scattering Study on the Effect of Polymer Composition on the Structural Properties of PEO-PPO-PEO Micelles" *J Colloid Interface Sci*, 191, 291302.
- Parekh, P.; Ganguly, R.; Aswal V. K.; Bahadur, P.** (2012). "Room temperature sphere-to-rod growth of Pluronic® P85 micelles induced by salicylic acid". *Soft Matter*, 8, 5864.
- Pool, R.; Bolhuis, P. G.** (2006). "Prediction of an Autocatalytic Replication Mechanism for Micelle Formation". *Phys. Rev. Lett.*, 97, 018302.
- Provencher, S.W.**, (1982). "CONTIN: A general purpose constrained regularization program for inverting noisy linear algebraic and integral equations" *Comput. Phys. Commun.*, 27, 229.
- Rager, T.; Meyer, W. H.; Wegner, G.; Winnik, M. A.** (1997). "Influence of Chain Length and Salt Concentration on Block Copolymer Micellization". *Macromolecules*, 30, 4911.
- Rharbi, Y.; Bechthold, N.; Landfester, K.; Salzman, A.; Winnik, M. A.** (2003). "Solute Exchange in Synperonic Surfactant Micelles" *Langmuir*, 19, 10.
- Rharbi, Y.; Chen, L.; Winnik, M.A.** (2004). "Exchange Mechanisms for Sodium Dodecyl Sulfate Micelles: High Salt Concentration". *J Am. Chem Soc.*, 126, 6025.
- Rharbi, Y.; Kitaev, V.; Winnik, M.A. y Hahn, K. G.** (1999). "Characterizing Aqueous Micellar Triton X-100 Solutions of a Fluorescent Model Triglyceride". *Langmuir*, 15, 2259.
- Rharbi, Y.; Li, M.; Winnik, M. A.; Hahn, K. G.** (2000). "Temperature Dependence of Fusion and Fragmentation Kinetics of Triton X-100 Micelles". *J. Am. Chem. Soc.*, 122, 6242.

- Rharbi, Y.; Winnik, M. A.** (2002). "Salt Effects on Solute Exchange in Sodium Dodecyl Sulfate Micelles" *J Am. Chem. Soc.*, 124, 2082.
- Rharbi, Y.; Winnik, M. A.; Hahn, K. G.** (1999). "Kinetics of Fusion and Fragmentation Nonionic Micelles: Triton X-100". *Langmuir*, 15, 4697.
- Schmolka, I. R.** (1991). *Poloxamers in the Pharmaceutical Industry. In Polymers for Controlled Drug Delivery.* Tarcha, P. J., Ed.; CRC Press: Boca Raton, FL.
- Turner, M. E.; Cates, M. E.** (1990). "The relaxation spectrum of polymer length distributions" *J. Phys. (Paris)*, 51, 307.
- Underhill, R. S.; Ding, J.; Birss, V. I.; Liu, G.** (1997). "Chain Exchange Kinetics of Polystyrene-block-poly(2-cinnamoyl ethyl methacrylate) Micelles in THF/Cyclopentane Mixtures". *Macromolecules*, 30, 8298.
- Van Stam, J.; Creutz, S.; De Schryver, F. C.; Jérôme, R.** (2000). "Tuning of the Exchange Dynamics of Unimers between Block Copolymer Micelles with Temperature, Cosolvents, and Cosurfactants". *Macromolecules*, 33, 6388.
- Wall, S. N.; Aniansson, E. A.** (1980). "Numerical calculations on the kinetics of stepwise micelle association". *J. Phys. Chem.*, 84, 727.
- Watson, G.; Michels, B.; Zana, R.** (1999). "Dynamics of Micelles of Polyethyleneoxide-Polypropyleneoxide-Polyethyleneoxide Block Copolymers in Aqueous Solutions" *J. Colloid Interface Sci.*, 212, 593.
- Watson, G.; Michels, B.; Zana, R.** (2001). "Dynamics of Block Copolymer Micelles in Aqueous Solution". *Macromolecules*, 34, 907.
- Watson, G.; Zana, R.** (2007). *Relaxation in wormlike micelle solution. In Surfactant Science Series Giant micelles. Properties and applications.* Zana, R., Kaler, E. W., Eds.; CRC Press: Boca Raton, FL, Vol. 140, pp 397.
- Won, Y. Y.; Davis, H. T.; Bates, F. S.** (2003). "Molecular Exchange in PEO-PB Micelles in Water". *Macromolecules*, 36, 953.
- Zana, R.** (2005). *Dynamics in micellar solutions of surfactants. In Surfactant Science Series Dynamics of surfactant self-assemblies.* Zana, R., Ed.; CRC Press: Boca Raton, FL.; Vol. 125, pp 75.
- Zhang, J.; Xu, J.; Liu, S.** (2008). "Chain-Length Dependence of Diblock Copolymer Micellization Kinetics Studied by Stopped-Flow pH-Jump". *J. Phys. Chem. B*, 112, 11284.

PRODUCING OF THE SUPERHYDROPHOBIC CARBON SOOT FROM POLYETHYLENE WASTE AND ITS USAGE FOR THE PRODUCTION OF HYDROPHOBIC SAND

SULTANBEK YERMEKOV ⁽¹⁾

⁽¹⁾ *Gymnasium "Self-Cognition", Almaty, Kazakhstan e-mail sula-kz@inbox.ru, yermekovsultanbek@gmail.com*

SUMMARY

Objectives: to find optimal conditions for the producing the carbon soot that has super hydrophobic properties from the plastic waste, the usage of it as a cover for the sand, the research of the properties of the received sand

Hypothesis: the sand covered with the carbon soot having superhydrophobic properties will be waterproof.

Results: the process of producing carbon soot from the polyethylene has been optimized; the soot was obtained; from the research, it is proved that it has superhydrophobic characteristics and the sand processed by this soot gets the waterproof properties.

Conclusion: firstly, the global problem of utilization of household waste - polyethylene is partially solved. Secondly, it is possible to make commercially profitable product – the superhydrophobic sand which can be applied in construction as the drainage material keeping a dry surface in the basis of buildings and houses' basements, as well as in agriculture to use this sand as a laying under the soil to save water in the process of watering the various crops.

The novelty of the study: carbon black, obtained from plastic waste has superhydrophobic properties; produced environmentally clean sand, water repellent with a quite cheap way

Results and conclusions: from the plastic waste produced carbon soot; as a result of research has proven that it has the superhydrophobic properties and sand, treated this soot, gets waterproof properties.

Areas of practical use: firstly, the global problem of waste disposal (polyethylene) is partially solved. Secondly, it is possible to produce a commercially viable product - superhydrophobic sand, which can be used in construction as a drainage material retains a dry surface at the base of the basements of buildings and houses, as well as in agriculture, by using the sand as litter under the soil to save water when watering different crops.

KEYWORDS: hydrophobicity, carbon soot, polyethylene utilization

INTRODUCTION

Every year, due to increase of living standard of the world population, also volumes of the thrown-out household waste steadily grow. If such type of packaging as a glass container is in a consumer cycle, and paper is exposed to decomposition under natural conditions, then the

packing from synthetic polymers making 40% of household waste is —almost eternal - it is not exposed to decomposition.

According to statistical data, in the world about 65 million tons of polyethylene and 60 million tons of polypropylene are made per year. From 5 trillion plastic bags which are thrown out in the world only 3% is processed, and other part go on trash dumps. So, it has been counted that on average, 738 thrown-out plastic bags account for one person per year. Therefore the question of utilization of polyethylene waste becomes a global environmental problem.

Polyethylene – the polymer obtained by ethylene polymerization. When bringing naked flame polyethylene burns with the smoking flame and release carbon oxide, unsaturated hydrocarbons, organic acids and aldehydes. Today there are various methods of processing of polyethylene waste allowing receiving a wide range of target products. However, the majority of them are power-intensive processes, and the final product of such productions has high prime cost.

Polyethylene burns with the smoking flame. As a result of reaction soot is formed. Combustion of fuel under certain conditions, allows making soot with the set properties.

In this work the method of receiving the soot that has superhydrophobic properties, produced in a flame of polyethylene waste is offered. Properties of the sand, covered with this soot, have been investigated and it is proved that sand has superhydrophobic properties.

Hydrophilic and Hydrophobic Substances

Hydrophilic substances (from Ancient Greek ὕδωρ, "water", and φιλία, "love"). Those substances are typically charge-polarized and contain electronegative atoms such as oxygen, nitrogen, phosphorus etc. In result, those molecules are capable of hydrogen bonding.

Hydrophobic substances (from Ancient Greek ὕδωρ, "water", and φόβος, "fear"). Hydrophobic molecules tend to be non-polar and do not dissolve in polar solvents such as water, but usually can dissolve in organic solvents. Hydrocarbons (gasoline, kerosene, paraffin), animal fat, vegetable oil can be an example.

Hydrophobicity is the physical property of a molecule (known as a hydrophobe) that is seemingly repelled from a mass of water.

Contact angle

Contact angle is angle between surface of material and the plane, a tangent to a liquid surface. Smaller value of contact angle demonstrates stronger spreading of a drop, and respectively, the bigger area of contact of water with material. The big size of contact angle promotes that the drop seeks to take ideal spherical shape therefore the area of its contact with a hydrophobic surface is minimum, and wetting is practically absent



Figure 1. Contact angle of various surfaces.

Hydrophobic Surface of Lotus Leaves

It is known that lotus leaves aren't moistened with water. Water drops on lotus leaf have a spherical structure and flow down from leaf without having wetted it. After research of a structure of lotus leaf surface by means of a microscope, it has turned out that it differs in hydrophobic properties as it is covered with numerous microscopic ledges.



Figure 2. Superhydrophobic

surface of lotus leaves

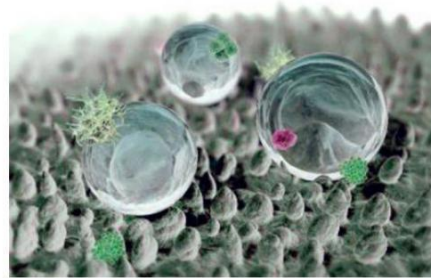


Figure 3. Microscopic

ledges on lotus surfaces

Protective Nano-Covering

Researches show that it is possible to reproduce —lotus effectl on surface of any material.

For this purpose on surface of the processed material nano-relief from hydrophobic substance can be created. The nano-relief consists of ledges or spikes, settling down like the wood on the surface. The space between these elements is occupied by air or any other gas from the atmosphere. Similar surfaces are produced by chemical or ionic etching. Water on such covering, having contact only with tips of ledges or fibers, is fragmented in drops by forces of a superficial tension.



Figure 4.

Protective nano-covering for wood



Figure 5.

Protective nano-covering for fiber

Soot

Soot – relatively cheap raw material which has hydrophobic properties and can be applied as a filler during creation of hydrophobic coverings. The main disadvantage of soot is that its interaction with water initiates mobility of nano-structural components of carbon and the appearing new structural formations lead to loose of hydrophobic properties. But if to produce soot under certain conditions of fuels combustion, then it will be able to keep hydrophobic properties after interaction with water, and such soot can be used further for giving of water resistance and impermeability to various materials.

Soot — amorphous carbon, product of incomplete combustion or thermal decomposition of hydrocarbons.

Usage of soot is known long ago. For the first time it was applied as the painting pigment for production of writing ink. Now soot is applied as an active filler in rubbers on the basis of synthetic rubbers to increase mechanical durability and service life. In the electrotechnical industry soot is applied to production of sockets, switches, cartridges and other products. In paint

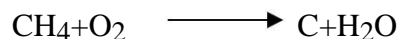
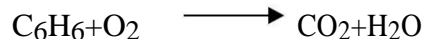
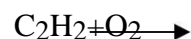
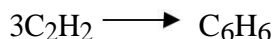
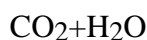
and varnish industry soot is important raw materials for production of high-quality paints and varnishes.

Physicotechnical properties and chemical composition of soot are given in tables in appendices.

Soot consists of spherical particles of black color. Particles of soot are formed of layers of carbon atoms, similar to layers in graphite. These layers consist of hexagons in which tops there are atoms of carbon, but, unlike graphite, layers in soot not flat, but curved, as causes a spherical surface of particles.



Figure 6. Soot



The problem of studying of the soot formation mechanism as a scientific problem was put for the first time, probably, by Faraday more than 150 years ago in his treatise "Candle History". Since then huge advance in interpretation of gas-phase reactions of burning and pyrolysis of hydrocarbons is reached, but still there is no uniform model, which is completely explaining the mechanism of formation of soot particle. Formation of soot in the flames is process of homogeneous condensation when C-atoms from a gaseous state (from molecules of hydrocarbons of a gas phase) pass into C-atoms of substance of soot particles. The chemical structure of gaseous soot predecessors and mechanism of formation soot particles from them is a subject of intensive researches and hot discussions in recent years.

Primary soot particle consists of several thousand crystallites. The structure of crystallite represents the deformed, distorted graphite lattice. [1]

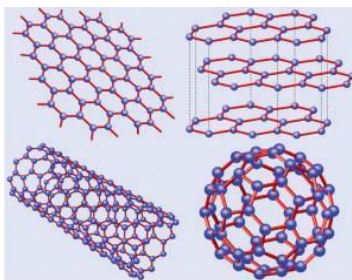


Figure 7. Graphene and its —derivatives

At the upper left – graphene, at the upper right – graphite (the piled graphene), below at the left – a nanotube (the rolled graphene), below at the right – fullerene (a wrapped up graphene).

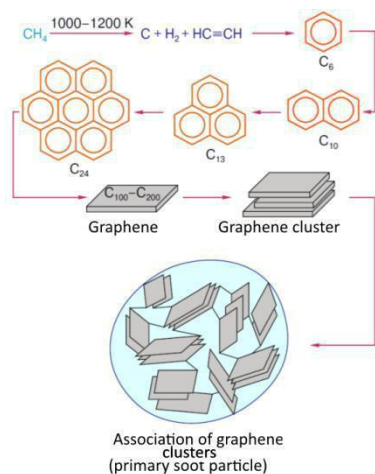


Figure 8. The sequence of gas-phase processes leading to formation of carbon material of soot from methane (appendices)

Graphene — the two-dimensional allotropic modification of carbon formed by a layer of the atoms of carbon thickness in one atom, which are in sp^2 -hybridization and connected by means of σ - and π -connections in a hexagonal two-dimensional crystal lattice. It can be presented as one plane of graphite separated from a volume crystal.

Soot particle represents a set of the separate crystallites consisting usually of 3-5 parallel layers of graphene. The structure of soot crystallites differs from graphite in the fact that parallel layers in it are displaced from each other not regularly, as in graphite, but chaotically, giving to crystallites three-dimensional-ordered structure. Such crystal lattice is called two-dimensional-ordered or turbostratic in which layers are rolled around vertical axis on some angle.

The atoms of carbon, which are at edges of the planes of crystal lattices, have free valences. According to these valences atoms of separate flat lattices of carbon (the single layers that are not entering crystallite) and the chains of carbon atoms, which are not focused in crystal system, join them. These chains fill intervals between crystallites, cementing them in one unit. Besides, atoms of H, O and S join free valences of carbon atoms. The form of soot particles is usually close to spherical, and their surface can be both smooth, and rough. The crystallites

located in the depth of soot particle are focused randomly from each other, and the surfaces, which are close, form a spherical cover. [2]

Soot particles unite in black structures, which represent more or less branched chains. Two types of soot structures can be distinguished: primary, very strong, connected by valence connections, and secondary, connected by sorption forces. The size of soot particles, and also a specific surface and structure degree (branching of soot chains) depend on conditions of their formation. Properties of soot are defined mainly by these characteristics. Soot is polydisperse substance: in a sample of soot of the same type there are particles of various sizes. Most of soot properties, in particular, specific surface and color depend on dispersion degree. The higher soot dispersion, the more black color and a big specific surface it has. Soot with higher structure degree has higher conductivity and the smaller seeming density, than the soot, which doesn't have difficult structures. [3] [4]

MATERIALS AND METHODS

1. Obtaining Of The Superhydrophobic Carbon Soot.

Research was conducted by means of the installation allowing to burn polyethylene with plentiful formation of soot. Installation consists of the following components: heat source, the quartz reactor, for laying of samples, a tube, for the departing combustible gases, which are emitted at decomposition of polyethylene and the soot collector, equipped with draft. The household polyethylene waste, which was previously exposed to primary cleaning, was used as raw materials. Before crushing cleaning procedure was carried out. Cleaning was carried out by washing of the crushed sample by hot water. After washing, samples dried under usual conditions. Upon termination of drying process, the crushed samples had been alloyed in the porcelain tray on an electric tile at 130 °C, for receiving compact samples for more convenient loading in the reactor. The reactor represents the quartz tube placed in heating element working from the source regulated by tension.

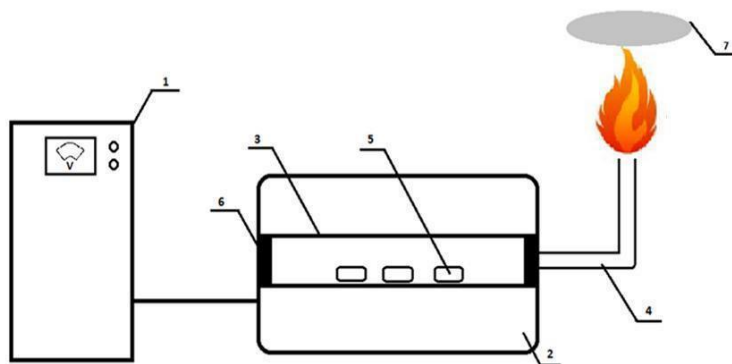


Figure 9. Installation on receiving soot at burning polyethylene waste

1 – the transformer transforming electric energy in thermal, for heating of polyethylene samples, connected to source of alternating current; 2 – tubular reactor; 3 – quartz tube, for laying of samples; 4 – tube, for the departing combustible gases which are emitted at polyethylene decomposition; 5 – polyethylene samples; 6 – cap; 7 – soot collector

Researches on obtaining soot at heating the reactor in intervals of temperatures of 320 - 700 °C have been conducted. Data is provided in table 3 (appendices).

At increase in temperature from 450-600 °C there is an acceleration of process of polyethylene decomposition and increase in soot formation is observed. At temperatures of 600-650 °C there is the maximum soot formation. At further increase in temperatures soot particles are formed, but at the same time the probability of combustion of particles increases and mass of the received soot decreases. Thus, the optimum temperature of receiving soot from polyethylene is 600-650 °C.



Figure 10. Installation for receiving superhydrophobic soot

Further the optimum distance from the burner plane to soot collector at 650 °C in 20 minutes has been investigated.

By results of researches it is visible that optimum distance for collecting the soot, that has superhydrophobic properties, is the distance in 2 cm from the burner plane.

Electronic and microscopic researches of the obtained soot from polyethylene waste for identification of the reasons of appearing its hydrophobic properties, figure 11 have been conducted. Researches were conducted on transmission electronic microscope "Integra Terma" at Institute of Geological Sciences named after K. Satpayev.

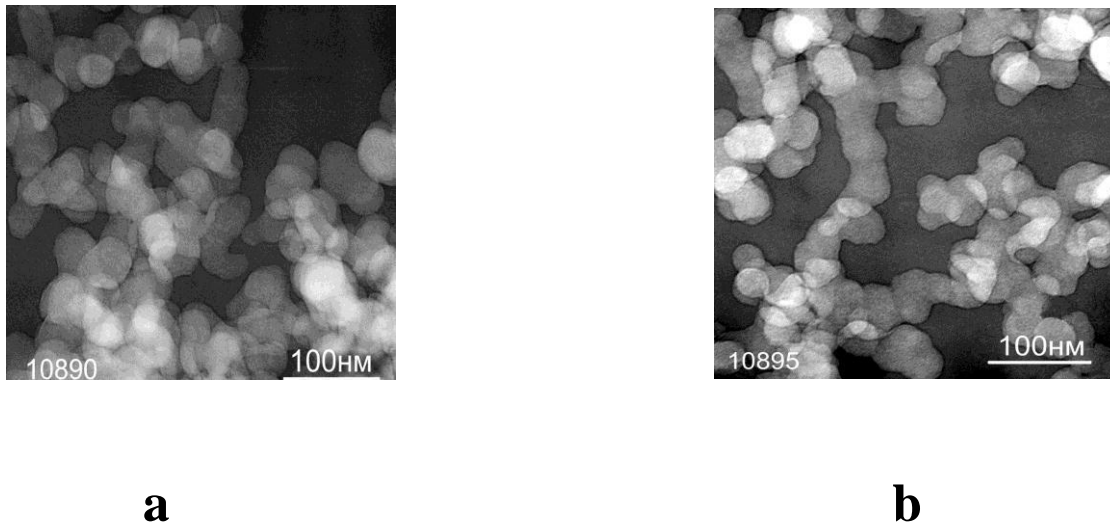


Figure 11. Electronic and microscopic pictures of soot samples at a temperature of 440 °C (figure a) and 620 °C (figure b)

By results of these researches, it has been revealed that in the offered way of synthesis of soot spherical soot particles of 20-50 nanometers in size are formed, which form difficult structures in the form of pearls with various degree of branching.

Researches of the obtained soot on water repellency have been conducted. For this suspension in 70% alcoholic solution from the obtained soot has been prepared, the received suspension, was applied on a substrate surface, dried up, then by the method of drawing a water drop on the received surface the contact angle was measured, figure 12.



Figure 12. Behavior of water drop on a glass surface with layer of the applied hydrophobic soot.

Researches have shown that the contact angle makes 150-160° that characterizes superhydrophobic properties of soot surface.

2. Producing Of Hydrophobic Sand

The production technology of hydrophobic sand consists of creation on sand grains surface of two-component covering. First of all the glue basis is applied on sand grains surface, the following step is fixing of hydrophobic fine material on the glue basis. Further hardening process follows.

At production of hydrophobic sand the usual river sand was used as the main filler, the glue basis was created based on polyurethane. The maintenance of glue mass did not exceed 5% of mass of the made hydrophobic composite; the content of hydrophobic soot was less than 1%. Glue on the polyurethane basis, was previously dissolved in the easily evaporating solvent. Then the received mass and river sand were subjected to intensive hashing before full evaporation of solvent. After the performed operations the soot with superhydrophobic properties was added to sand and was carried out hashing with a certain speed within 30 minutes. During hashing the sand grains were enveloped by a nanometer layer of soot particles. The photo of the received hydrophobic sand with the water drops applied on its surface is given in figures.

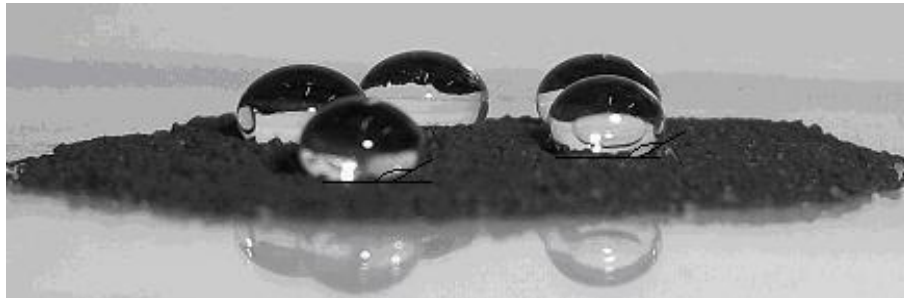


Figure 13. Water drop on the surface of hydrophobic sand (appendices)

In the following figure for comparison is given behavior on water surface: usual sand, sand with a polyurethane film and hydrophobic sand.



Figure 14. Behavior on water surface: usual sand, sand with a polyurethane film and hydrophobic sand

We observe as the received hydrophobic sand in the amount of 10 grams freely floats on water surface, it shows that sand has absolute property of not wetability.

Economy of water is visually shown on experience. Two pots with evenly sowed fennel seeds have been taken, an internal surface of one of them had been covered with hydrophobic sand. Time in ten days the plant was watered by 150 ml of water.



Figure 15. Samples of plants with processed (at the left) and not processed by sand.

DISCUSSION

Thus, the conducted researches have shown that from polyethylene waste it is possible to receive the soot having superhydrophobic properties. Optimum conditions for receiving soot are - decomposition of polyethylene at 600-650 °C and a burner plane arrangement at distance of 2 cm from soot collector. The soot received by this way has superhydrophobic properties – contact angle is 150-160°.

Superhydrophobic soot can be used as a covering for sand. First, at the same time the global problem of utilization of household waste is partially solved. Secondly, it is possible to make commercially profitable product – superhydrophobic sand, which can be applied in construction and in agriculture. The increased humidity — the main reason for destruction of buildings and constructions. Hydrophobic sand of large fraction can be used as the drainage material keeping a dry surface in the basis of basements of buildings and houses. Hydrophobic sand of small fraction can be used for preservation of moisture in the soil on agricultural fields (especially for cultivation of rice which needs a huge amount of water), in gardening of the cities, parks. Sand needs to be spread under a soil cover; the most part of water gets deep into, depriving of food roots of plants. The layer of waterproof sand would create a laying which wouldn't allow water to filter. Thus, the number of watering could be reduced. And it is economy of water which could save lives of the people who are in great need in it.

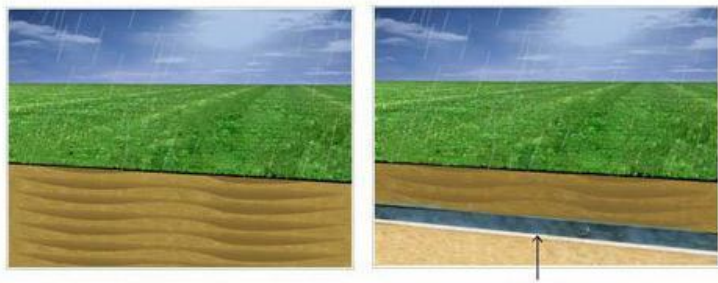


Figure 16. Usage of superhydrophobic sand as the water-retaining agent

The arrow has shown a layer of water-repellent sand which doesn't allow water to leave deep into soils, providing plants with a sufficient reserve of moisture. It should be noted that hydrophobic sand is ecologically safe that is very important presently. This method is convenient for production of superhydrophobic soot and sand in small amounts for laboratory researches, and also is suitable for establishing production in big scales.

REFERENCES

1 -**Krestinin , A. V.** (2000) . "Кинетика образования сажевых частиц при пиролизе углеводородов" (Kinetics of derivation of soot particles at pyrolysis of hydrocarbons) Chernogolovka, Russia.

4 –**Merkulov , A. A., Popov , V. T., Mansurov, Z. A.** (1994) . "Получение ультрадисперсной сажи при горении метана" (Obtaining.of ultradisperce carbon soot at burning of methane)

Горение твёрдого топлива

3 –**Prichodko , N. G.; Lesbaev , B. T.; Mashan, T. T.; Mansurov, Z. A.** (2004) . "Soot obtaining. " Горение и плазмохимия

2 -**Tesner , P. A.** (1972) . "Образование углерода из углеводородов газовой фазы" (Obtaining of carbon from hydrocarbons in gase phase.) М.: Химия.

APPENDICES

Tables

Table 1. Chemical composition of the soot

Chemical composition	Value, %
Carbon, C	89 – 99
Hydrogen, H	0,3 – 0,5
Oxygen, O	0,1 – 10
Mineral substances	0,5

Table 2. Physical-technical properties of the soot

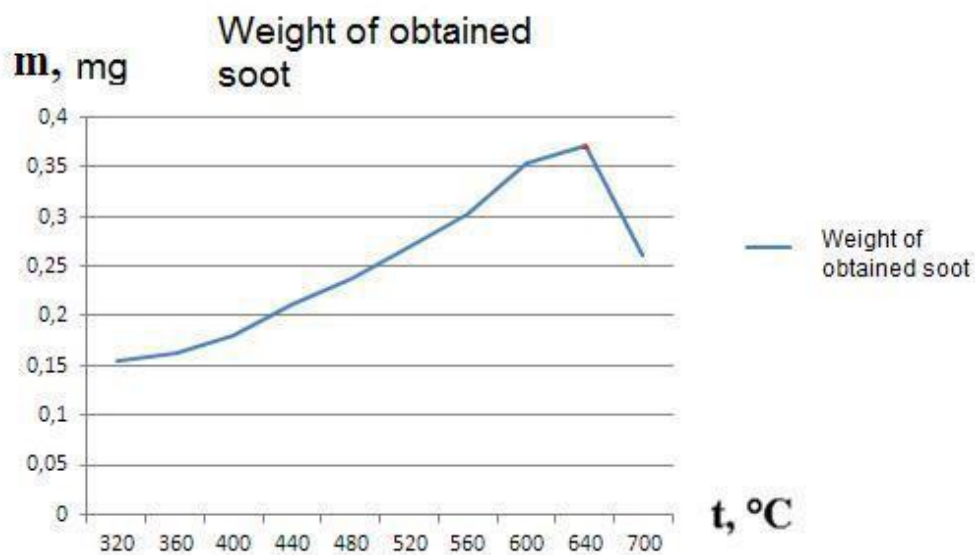
Physical-technical properties	Value
Density, kg/m ³	1800 – 2200
Particle size, μm	9 - 320
Specific surface, m ² /g	250 - 12
Oil absorption, g/100g	50 – 135

Table 3. Dependence of distance of the burner plane to soot collector and the mass of the formed soot.

Distance to soot collector, cm	Mass of the formed soot, mg
1,5	0,3176
2	0,3608
2,5	0,3254
3	0,2598

Table 4. Dependence of polyethylene decomposition temperature and mass of obtained soot.

t, min	t, °C	m, mg
60	320	0,1542
60	360	0,1624
60	400	0,1797
60	440	0,2109
60	480	0,2374
60	520	0,2683
60	560	0,3021
60	600	0,3534
60	640	0,3711
60	700	0,2610



SMART WINDOWS: NEW TEMPLATE SYNTHESIS OF THIN NICKEL HYDROXIDE FILM FOR ELECTROCHROMIC DEVICES

POLINA KOVALENKO⁽¹⁾, VADYM KOVALENKO^(2, 3), VALERII KOTOK^(4, 5)

(1) Vyatka State University, Kirov, Ukraine, kovalenko.winner@gmail.com

(2) Ukrainian State Chemical Technological University, Dnipropetrovsk, Ukraine, vadimchem@gmail.com

(3) Vyatka State University, Kirov, Ukraine, vadimchem@gmail.com

(4) Ukrainian State Chemical Technological University, Dnipropetrovsk, Ukraine, valeriykotok@gmail.com

(5) Vyatka State University, Kirov, Ukraine, valeriykotok@gmail.com

SUMMARY

In today's world people are striving to create comfortable environment of existence, lighting plays a significant role in it. Modern residential and office space, cars must have minimum power consumption. It is known that in summer the sunny side of the building requires significantly more air conditioning energy. Electrochromic devices satisfy optimal conditions they can change light absorption by letting an electric current go through. Electrochromic devices based on electrochemical reactions are most interesting. The reaction should be solid state and one of the form should be dark coloured while the other one should be transparent. For example at one electrode reactions are based on WO_3 while nickel hydroxide which is transparent and its oxidized form $Ni(OH)_2$ is black can be used for another electrode of electrochromic devices. Properties of $Ni(OH)_2$ make it an attractive target for the development in to the thin film electrochromic layers that will respond to the changes in ambient light conditions when used in windows and sun screens.

The main purpose was development of electrochemical deposition method to obtain uniform thin films of $Ni(OH)_2$ with optimized electrochromic properties and to select necessary additives that improve "film-substrate" adhesion.

Nickel hydroxide films were obtained by cathode deposition on polished nickel substrate surface in diaphragm cell electrolyzer under different current density. PVA, CMC and PTFE were used as adhesion-increasing additives.

Structural, morphological, electrochemical and electrochromic properties were studied with XRD, SEM and simultaneous voltammogram with "LED – light-receiving element" system respectively.

It was shown that all $Ni(OH)_2$ films are low crystal alpha-forms. Films obtained without additives were brittle and easy to shed from substrate surface. PTFE addition didn't improve adhesion; CMC obtained films were turbid and optically impure; PVA addition improved adhesion significantly as a result of growing $Ni(OH)_2$ particles by template synthesis: matrix formation on the substrate surface.

Optimum film obtaining parameters: $C= 5-10\% \text{ wt}$, $i=0.31-1.5 \text{ mA/cm}^2$, drying $t=75-90^\circ\text{C}$.

Conclusions: 1) First in the world new template synthesis of 3-5 micron $Ni(OH)_2$ film with PVA additive was developed. 2) Obtained film was characterized by high stable and reversible darkening–lightening ranging from 50%-70%.

KEYWORDS: Nickel Hydroxide, Electrochromic device, Template Synthesis

1. INTRODUCTION

In today's world people are striving to create comfortable environment of existence. Lighting, which shouldn't be very bright or very dim, plays a significant role in it. Natural lighting is optimal in this case. At the same time, modern residential and office space, cars must have a minimum power consumption. It is known that in summer the sunny side of the

building requires significantly more air conditioning energy. Therefore, when there is bright light outside the windows should be darkened and they should let the maximum amount of light go through in the shade. Electrochromic devices satisfy these conditions they can change light absorption by letting an electric current go through. In our days liquid crystal electrochromic devices are most common, but they have many disadvantages among which there is fragility and high cost. Electrochromic devices based on electrochemical reactions are lack of the most of these shortcomings [1, 2]. The reaction should be solid state and one of the form should be dark coloured while the other one should be transparent. For example at one electrode reactions are based on WO_3 [3] while nickel hydroxide which is transparent and its oxidized form $\text{Ni}(\text{OH})_2$ is black can be used for another electrode of electrochromic devices. And whereas the properties and reactions WO_3 are well studied [3], the electrochromic options of nickel hydroxide electrode is poorly studied. Ni oxide and Ni hydroxide films may be formed by different methods: sputter-deposition [4], sol-gel technology [5-7]. Require serious research hypothesis: with the help of cathodic deposition we may obtain a fine well adhesive $\text{Ni}(\text{OH})_2$ film with high electrochromic properties.

2. MAIN PURPOSE, HYPOTHESIS AND PARTICULAR GOALS

The main purpose of this investigation is development of method for thin $\text{Ni}(\text{OH})_2$ film formation with high electrochromic properties.

Our hypothesis is that nickel hydroxide film obtained by electrochemical deposition with same electrolyte additives has high adhesion and electrochromic properties.

Consequently, specific goals were: 1) to obtain nickel hydroxide films by electrochemical deposition 2) to select an additive to improve "film-substrate" adhesion; 3) to investigate electrochemical and electrochromic properties of the films.

3. METHODS AND PROCEDURES

3.1. Methods for electrochemical prepolished of substrate (nickel electrode) surface:

Electrochemical anodic prepolishing was carried out in special solution (800 g/l H_3PO_4 , 120 g/l H_2SO_4 , 40 g/l CrO_3) under current density 60 A/dm² during 5 min.

3.2. Film obtaining method:

Samples of nickel hydroxide films were obtained in specially constructed diaphragm electrolyzer under the following conditions: cathode current density from 0.31 to 20 mA/dm², catholyte – $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$ solution (1 M), anolyte – KNO_3 (1 M). For increasing of film adhesion to substrate, next water soluted high molecular substances were added to catholyte: Carboximethylcellulose (CMC) – from 1% to 5% wt., polyvinilalcohol (PVA) – from 1% to 10% wt., politetrafluorineethylene (PTFE) – from 1% to 3% wt.

3.3. Samples preparation: washing and drying under different temperature.

For investigation of film morphology the prepared film sample on the substrate went to a specialized laboratory for SEM images obtaining. For structural properties investigation, the prepared hydroxide film was removal from substrate and will wet to a specialized laboratory to make XRD.

3.4. Methods for electrochemical and electrochromic properties investigation:

Electrochemical and electrochromic properties have been investigated simultaneously in a specially constructed cell. Electrolyte – 6 M KOH, a counter electrode – nickel net, reference electrode – silver chloride, $V = 1$ mV/s. Electrochemical properties have been investigated by voltammogram. Electrochromic properties have been studied according to light reflection of the working electrode with the deposited film using "LED – light-receiving element". Thus, voltammogram curves and "darkening-bleaching" curves were obtained simultaneously in the potential range of 0-550 mV.

3.5. Evaluation of adhesion

It was made by: 1) visually on the peeling of the film from substrate; 2) by degradation of electrochromic properties.

3.6. Data analysis:

- 1) XRD shows the form of hydroxide and crystallinity;
- 2) SEM image show the morphology of film surface and take the data for film thickness calculation;
- 3) From the voltammograms we may receive the anode peak and cathode peak potentials and currents, and changes of these parameters. Difference of anode peak and cathode peak potentials describes reversibility of electrochemical process. "Darkening-bleaching" curves give the information about electrochromic properties (darkening degree) and its stability and reversibility.

4. RESULTS AND DISCUSSIONS

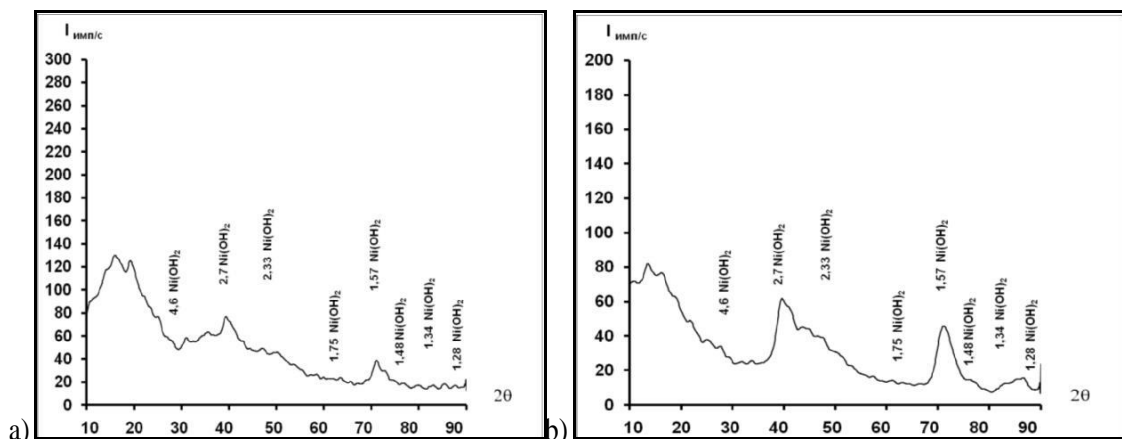
4.1. XRD investigation

Ni(OH)₂, cathodically deposited from a solution of nickel nitrate, showed that they are α -modification with low crystallization (fig1. 1).. However, it was easy to peel a film from the electrode surface. When current density of deposition was increased, internal stress of the hydroxide film was increased too. As a result, film was peeled with larger particle obtaining (fig. 3). Special additions into solution for film stabilization and higher adhesion must be used.

4.2. Investigation of the morphology of film surface

Investigation of the morphology has been carried out for film, deposited with 5% PVA addition (fig. 3). The films were smooth with cracks up to 2/3 of the thickness. Cracks appeared on drying hydrophilic film containing PVA.

According to Fig. 3 the thickness of the film has been determined. Knowing the angle of the electron beam (60 ° to the normal of the film) and the size of the shadow (about 3 mm) from the geometric formula, taking into account the factor of increasing the thickness of 1.5 mm have a thickness of 4.8 μ m.



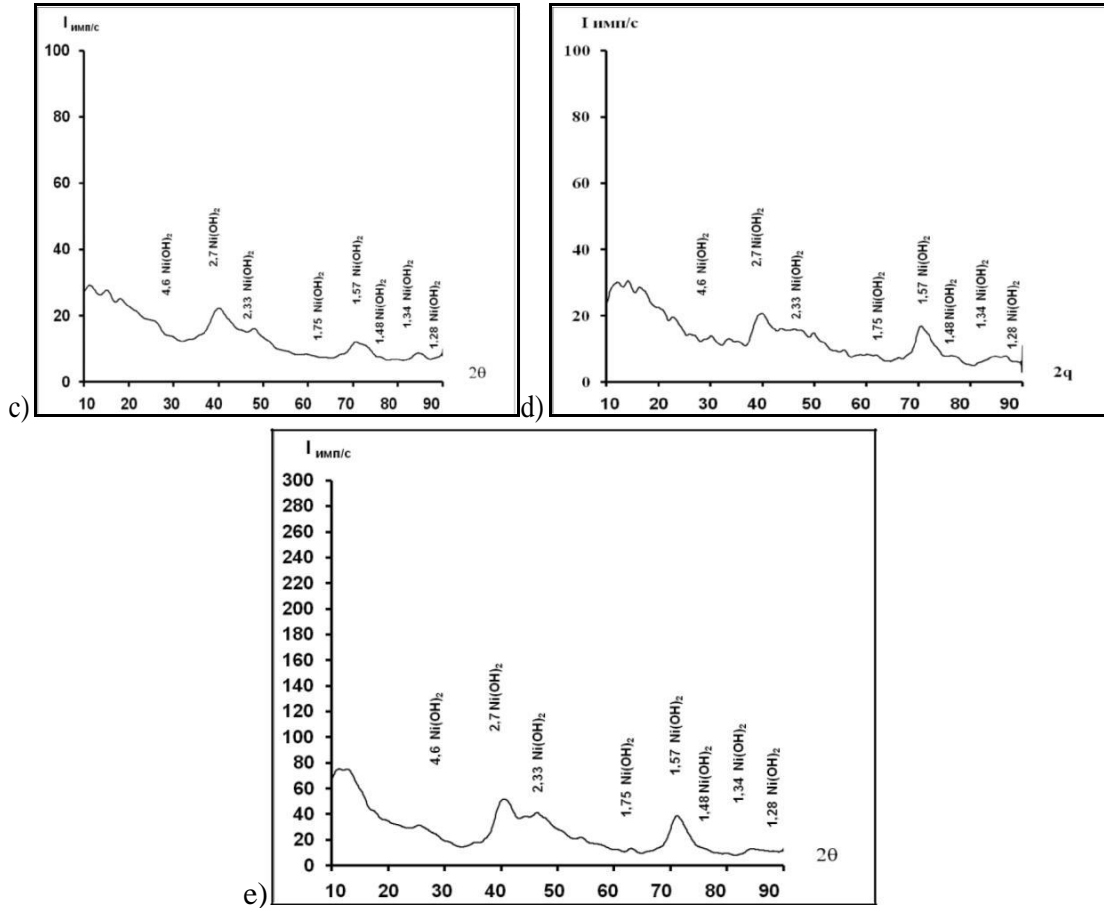
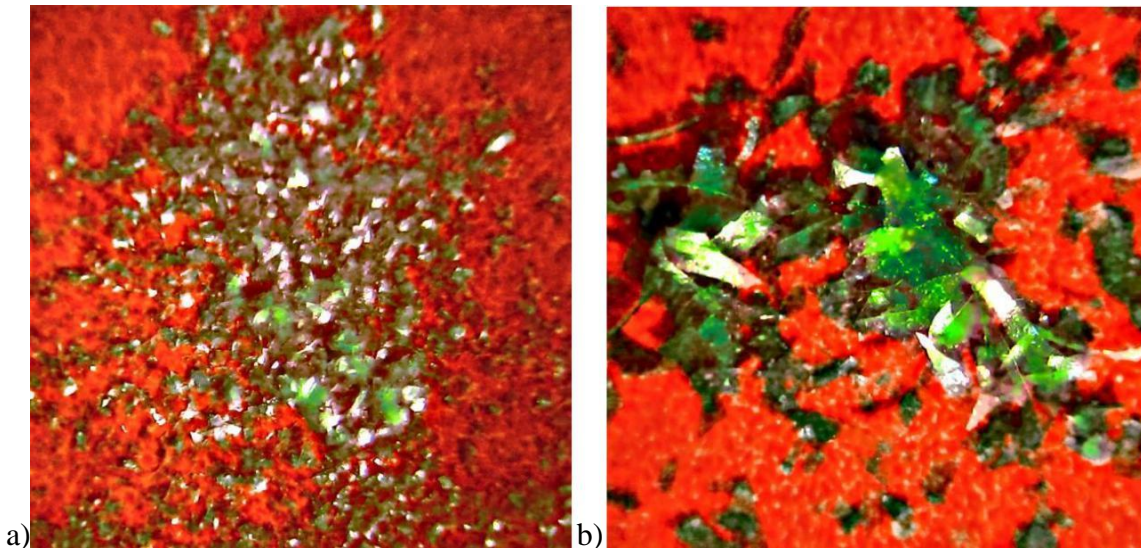
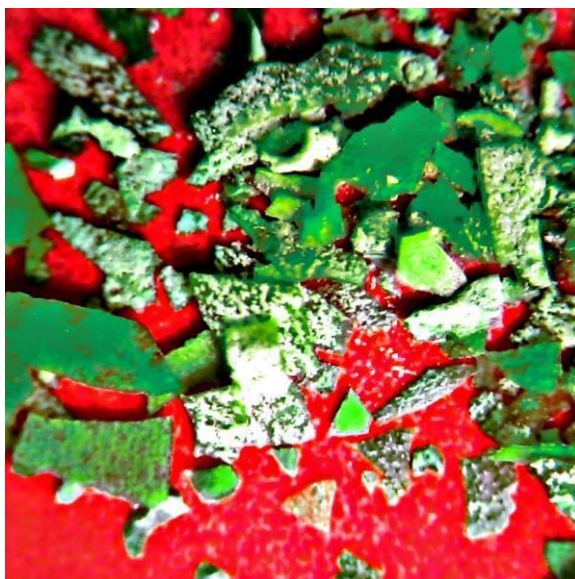


Figure 1. XRD patterns of Ni(OH)₂ film obtained under:

a) $i=0.3125 \text{ mA/sm}^2$; b) $i=0.625 \text{ mA/sm}^2$; c) $i=1.25 \text{ mA/sm}^2$; d) $i=2.5 \text{ mA/sm}^2$; e) $i=5 \text{ mA/sm}^2$;

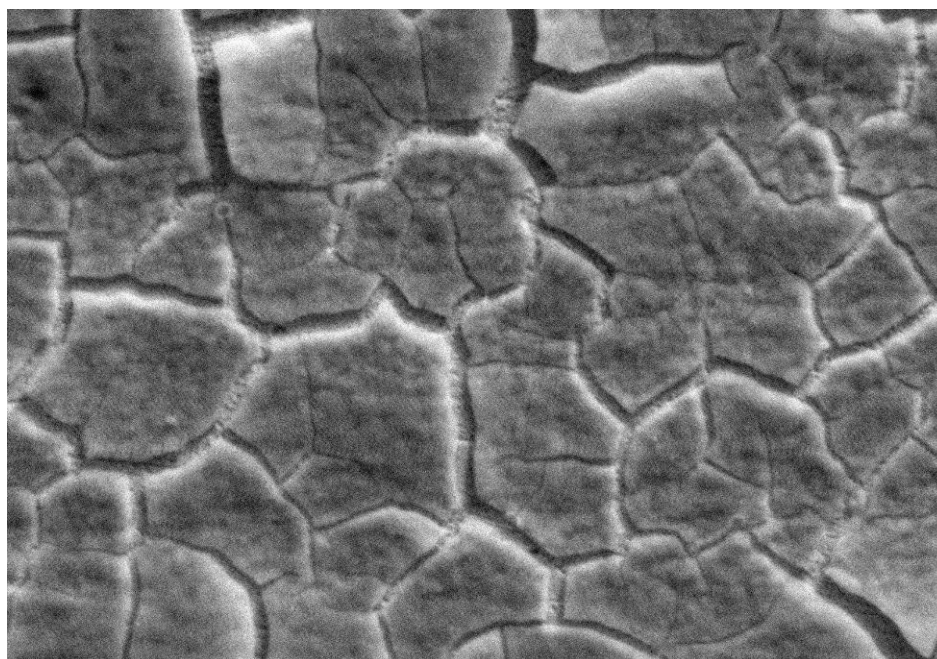




c)

Figure 2. Micro image of particle of nickel hydroxide fim, peeled from substrate (optical microscope MBS-9, x150):

a) $i=0.3125 \text{ mA/sm}^2$; b) $i=2.5 \text{ mA/sm}^2$; c) $i=5 \text{ mA/sm}^2$.



a) WD=19.4mm

20.00kV

x1.00k

50 μ m

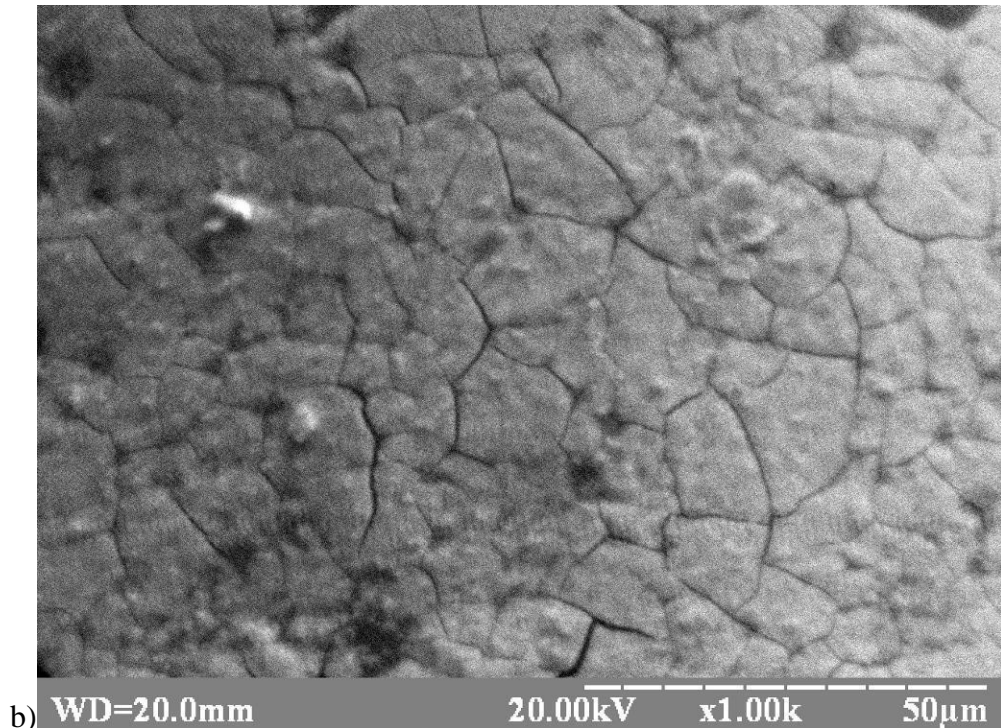


Figure 3. SEM images of nickel hydroxide films, obtained with 5% PVA addition under:

a) $i=0.625 \text{ mA/sm}^2$ $\tau=80 \text{ min}$ b) $i=1.25 \text{ mA/sm}^2$ $\tau=40 \text{ min}$

4.3. Electrochemical and electrochromic properties investigation.

Investigation has been carried out simultaneously as voltammogram curves and “darkening-bleaching” curves. Firstly, electrochemical and electrochromic behavior of pure substrate (Ni electrode) has been investigated. After that examples of film, deposited with different adhesion-increasing additives (PVA, CMC and PTFE).

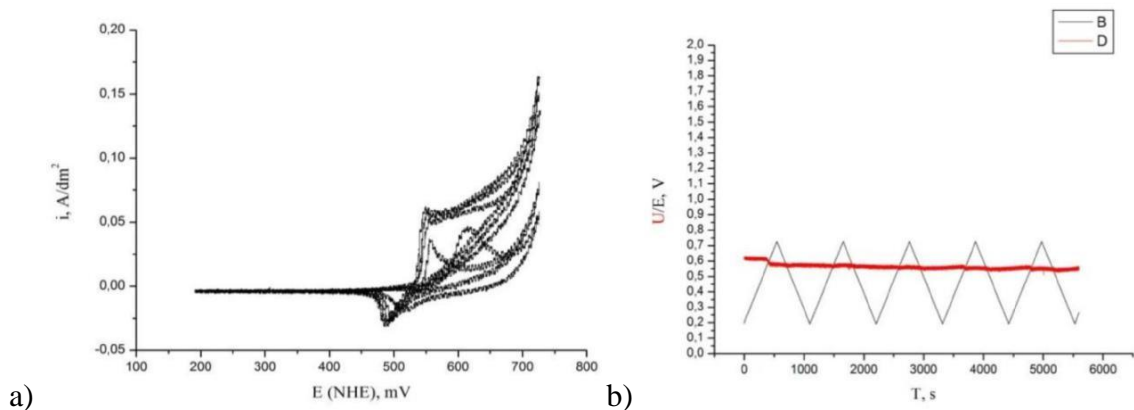


Figure 4. Properties of pure substrate (Ni electrode).

a) voltammogram; b) potential vs time (curve B), “darkening-bleaching” vs time (curve D)

Despite the presence of oxide layer on the surface of nickel, nickel electrode has little electrochromic properties (fig. 4).

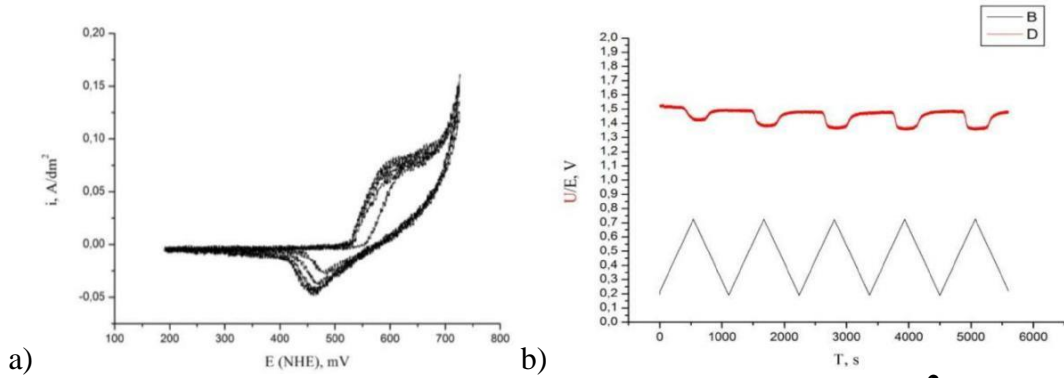


Figure 5. Properties of Ni(OH)₂ film, deposited under $i=0.625 \text{ mA/sm}^2$ with PTFE.
 a) voltammogramm; b) potential vs time (curve B), “darkening-bleaching” vs time (curve D)

PTFE addition didn't improve of film adhesion, and electrochromic properties didn't increase (fig. 5).

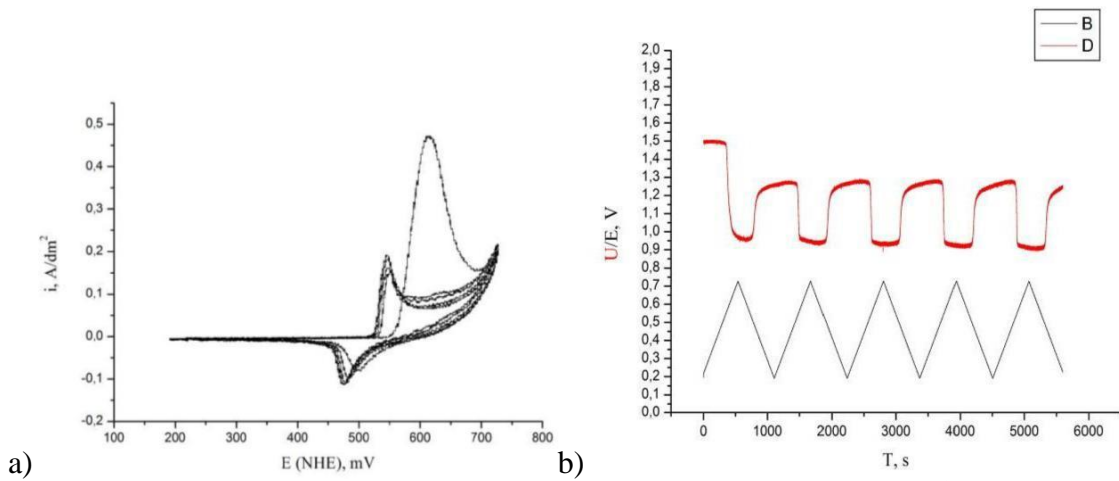


Figure 6. Properties of Ni(OH)₂ film, deposited under $i=0.625 \text{ mA/sm}^2$ with CMC.
 a) voltammogramm; b) potential vs time (curve B), “darkening-bleaching” vs time (curve D)
 CMC addition didn't improve of film adhesion, but obtained films were turbid (fig. 6)

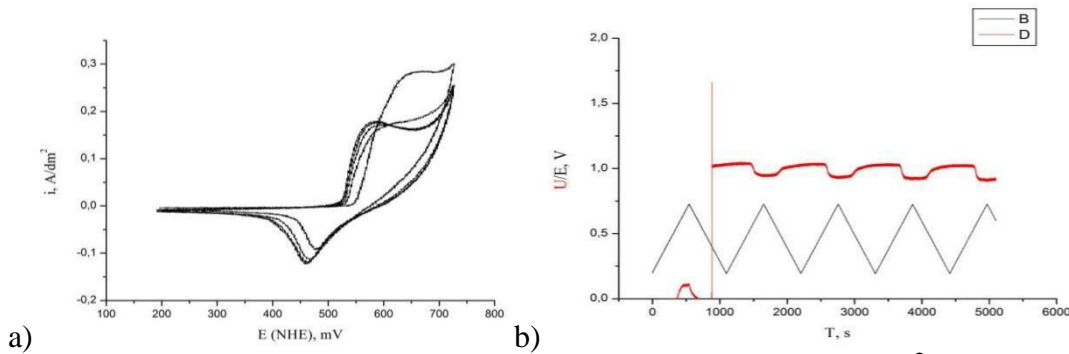


Figure 7. Properties of Ni(OH)₂ film, deposited under $i=0.625 \text{ mA/sm}^2$ with 1% PVA.
 a) voltammogramm; b) potential vs time (curve B), “darkening-bleaching” vs time (curve D)

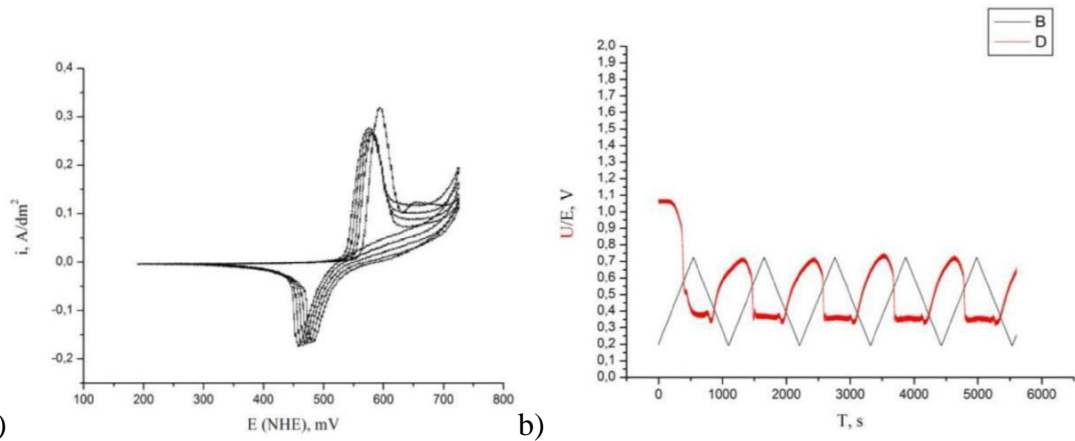


Fig. 8. Properties of Ni(OH)₂ film, deposited under $i=0.625 \text{ mA/sm}^2$ with 5% PVA, drying $t=25^\circ\text{C}$.

a) voltammogramm; b) potential vs time (curve B), “darkening-bleaching” vs time (curve D)

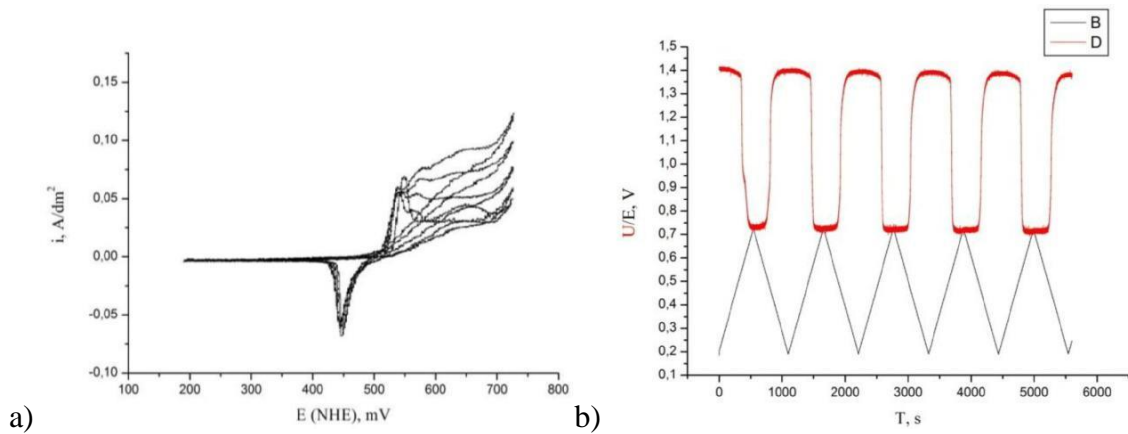


Figure 9. Properties of Ni(OH)₂ film, deposited under $i=0.625 \text{ mA/sm}^2$ with 5% PVA, drying $t=90^\circ\text{C}$.

a) voltammogramm; b) potential vs time (curve B), “darkening-bleaching” vs time (curve D)

Adding a solution of polyvinyl alcohol 1%, gives a slight increase in the adhesion of the film. Electrochromic properties are not improved (fig. 7).

The optimum concentration of PVA (5-10%wt) was determined. The influence of the drying on obtained film was also studied. It is shown that drying at $t^0=65-90^\circ\text{C}$ improves the adhesion of the film as well as electrochromic properties (reversibility of darkening and lightening processes) (fig. 8, 9)

We have the same hypothesis: when PVA is used as addition to electrolyte, water-soluble high molecular polyvinyl alcohol form matrix structure on the substrate surface (fig. 10 a). And nickel hydroxide particles are growing on the cell of this matrix (fig. 10 b).

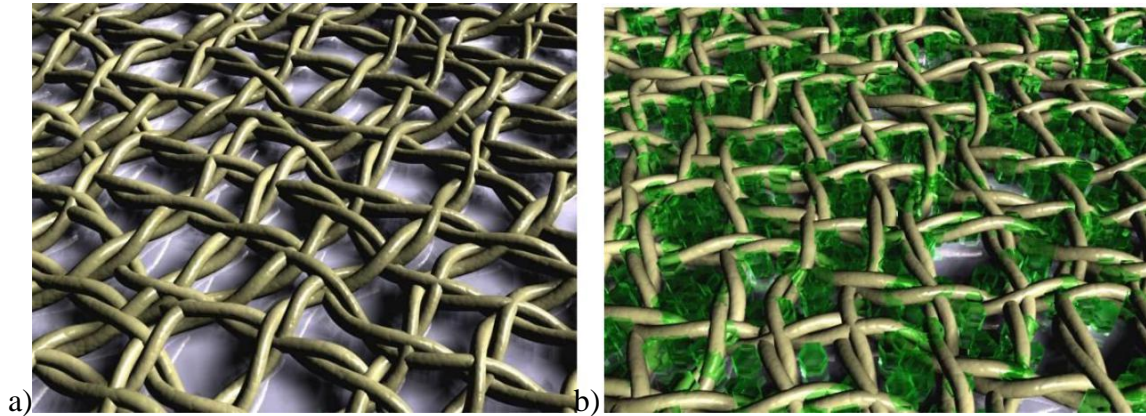


Figure 10. The proposed mechanism for the template synthesis (gray fibers – PVA, green crystals – $\text{Ni}(\text{OH})_2$)
a) template matrix formation; b) electrochromic substances (nickel hydroxide) growing

To confirm this hypothesis, one of the film samples were subjected to rapid aging at high temperature (crystallization of nickel hydroxide). “Snowflakes” of $\text{Ni}(\text{OH})_2$, located in the matrix, was shown in the images of digital microscope (fig. 11).

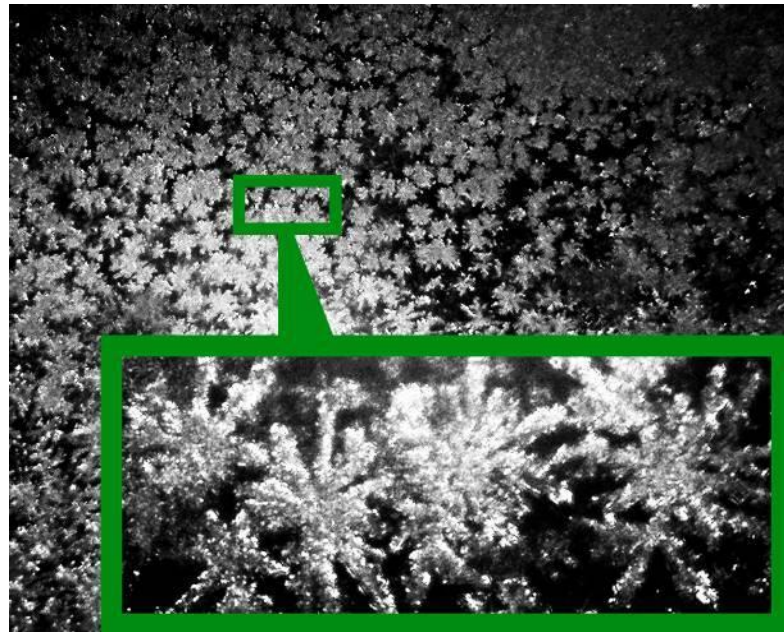


Figure 11. The film of nickel hydroxide (obtained under $i=0.625 \text{ mA/sm}^2$ with 5% PVA) after rapid aging (digital microscope, x600)

5. CONCLUSION

- 1) For the first time new template synthesis of thin (3-5 μm) $\text{Ni}(\text{OH})_2$ film with PVA additive was developed.
- 2) Stable reversible darkening–lightening, with darkening degree 50%-70% of film obtained by proposed method is shown.

6. REFERENCE

- 1) [Purushothaman](#) , K. K.; [Muralidharan](#) , G. (2008) ”[Nanostructured NiO based all solid state electrochromic device](#)”. [J.of Sol-Gel Science and Technology](#), Vol 46, No 2, p. 190-194
- 2) [Azens](#) , A; [Granqvist](#) , C. (2002). “[Electrochromic smart windows: energy efficiency and device aspects](#)”., [J. of Solid State Electrochemistry](#), , Vol 7, No 2, P. 64-68
- 3) Kwang-Soon , Ahn; Yoon-Chae , Nah; Yung-Eun , Sung , Ki-Yun Cho; Seung-Shik Shin, and Park , Jung-Ki. (2002). “All-solid-state electrochromic device composed of WO₃ and Ni(OH)₂ with a Ta₂O₅ protective layer. 2002 Applied Physics Letters Vol.81, No. 21, 3930-3933
- 4) Kwang-Soon, Ahn; Yoon-Chae, Nah, Yung-Eun, Sung (2002). Microstructural and electrochromic properties of sputter-deposited Ni oxide films grown at different working pressures. 2002 J.of Applied Physics Vol. 92, No 3, p. 1268-1273
- 5) Korošec, Romana Cerc; Bukovec Peter (2006). Sol-Gel “Prepared NiO Thin Films for Electrochromic Applications”. Acta Chim. Slov.,Vol. 53, No 53, 136–147
- 6) [Jin-Young , Park](#); [Kwang-Soon , Ahn](#); [Yoon-Chae , Nah](#); [Hee-Sang , Shim](#); [Yung-Eun Sung](#) (2004). “[Electrochemical and Electrochromic Properties of Ni Oxide Thin Films Prepared by a Sol–Gel Method](#), , 2004 [J. of Sol-Gel Science and Technology](#), Vol 31, No 1-3, 323-328
- 7) [X. C. Lou](#) , [Zhao](#) , X. J., [Y. L. Xiong](#) , and [X. T. Sui](#) (2010). “[The influence of annealing on electrochromic properties of Al–B–NiO thin films prepared by sol–gel](#) [J. of Sol-Gel Science and Technology](#), , Vol 54, No 1, 43-48

INSTRUMENTAL AND TECHNOLOGICAL DEVELOPMENT OF EPOXIDATION PROCESS THE WASTE OF NATURAL RUBBER (SCRAP)

D.O. SHAPOVALOV ⁽¹⁾, V.V. VED ⁽²⁾ & S.N. ZYBAYLO ⁽³⁾

⁽¹⁾ Ukrainian State University of Chemical Technology, Dnepropetrovsk, Ukraine, e-mail: shapovalov.do@gmail.com

⁽²⁾ Ukrainian State University of Chemical Technology, Dnepropetrovsk, Ukraine, e-mail: vvved@mail.ru

⁽³⁾ Ukrainian State University of Chemical Technology, Dnepropetrovsk, Ukraine, e-mail: szybaylo@rambler.ru

SUMMARY: Epoxidation of rubber scrap was carried out in xylene-water medium with “*in situ*” formed peracetic acid. The presence of the epoxy groups in obtained ENR was confirmed by infrared spectroscopy. In addition to the qualitative analysis was conducted quantitative measurement of unsaturation rubbers and the concentration of epoxy groups in the ENR by titration methods. The loop reactor for recycling of scrap NR by epoxidation was designed. The reactor allows to work with viscous solutions of rubber and provides the necessary heating and mixing with the epoxidizing agent.

KEYWORDS: Epoxidation, rubber scrap.

1. INTRODUCTION

Currently, one of the types of the waste natural rubber production (NR) is a scrap. This scrap does not correspond to standards (ISO 2000:2008), and cannot be used in industrial production.

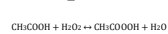
Chemical modification of scrap allows to create new kinds of synthetic rubbers having valuable physical chemical (Pichugin, 2008) and technological properties (Ermolchuk, 2008).

The following methods for the modification of natural rubbers are known: modification without the accession of new atoms (hydrogenation, cyclization, depolymerization (Pichugin, 2008)), the accession of new chemical groups (ozonation, epoxidation (Razumovskiy, 1974), chlorination, hydrochlorination (Doncov, 1979)), introducing other polymers to macromolecule (Tutorskiy, 1993).

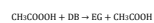
One of the most common ways to modify NR is epoxidation (Derouet, 2005). Quite a number of processes directed to the epoxidization of rubber are known (Gregorio, 2000), although the greatest part of them are methods which either did not find a practical industrial application or are now of no interest because not possessing, to a sufficient extent, all of the requisites of an applicable and economical character and also of ecological acceptability, etc., necessary for rendering them entirely acceptable for industrial use. Some of these methods include processing of rubber with chlorine water and alkalis, polymerization of monomers containing oxirane groups, processing of rubber with organic or inorganic peracids in presence of various catalysts prepared in advance or *in situ*, etc (Fan, 1998).

Partially epoxidized natural rubber (ENR) is potentially useful material, which has such unique properties as: a high oil resistance, enhanced adhesive properties, glass transition temperature, wear resistance, and viscoelastic damping properties, low rolling resistance, high "wet" friction, improved compatibility with polar polymers and reduced gas permeation (Grishin, 2010). It means that ENR could not be oxidized easily in the presence of air and thus prolongs its shelf life. These characteristics allow to use modified rubber as an ingredient for rubber products with improved properties, such as adhesives, sealants, special products, coating to protect equipment from corrosion during transportation or conservation (Kwo Han Kiu, 2007).

There are various ways of epoxidation NR at the latex stage in a suspension containing significant amount of gel particles with peracetic acid (Luca, 2004), with glacial acetic acid and hydrogen peroxide *in situ*. This is a well known commercial method for producing ENR (Derouet, 2005). The epoxidation rate increases with increasing concentration of rubber. *In situ* epoxidation reaction generally takes place in two steps: formation of peracetic acid [1], and reaction of peracetic acid with the unsaturated double bond [2]:



[1]



[2]

where DB is double bond and EG is epoxy group. The first reaction is a rate-determining step (Kwo Han Kiu, 2007).

In the paper (Zybajlo, 2015) was proposed to use ENR as protective plating for metals, considering that the epoxy groups of the polymers can react with the hydrated metal surface to form strong chemical bonds (Niazashvili, 1991).

Solutions of ENR obtained from scrap may be used for creating protective plantings with reduced consumption when they apply to the metal surfaces (steel A570-36). In addition, a multi-purpose solution ENR may be used to protect equipment from corrosion during its conservation.

Based on the above, epoxidation is the promising method for scrap recycling and requires further studies.

2. RESEARCH OBJECTIVES

The objective of this work was to develop and study of the epoxidation process of scrap NR for giving to it improved mechanical and technological properties. Possibility of carrying out the combined physical and chemical processes in one reaction chamber in the two-phase environment liquid-gas while reducing the total energy costs was studied.

Another objective of this study was to develop of energy-efficient ways to recycle scrap NR using low-tonnage equipment for carrying out the modification process. The main technical objective was to improve the design of the reactor for the purpose of implementation of the controlled process, while maintaining the required temperature of the reaction medium.

3. MATERIALS AND METHODS

Research of epoxidation process was carried out using a low-molecular NR (Made in Vietnam) with viscosity average molecular weight of 300 thousand. Natural rubber was crushed and dissolved in xylene to a rubber concentration of 13 wt. %. As reagents for epoxidation mix of 3% aqueous solution of hydrogen peroxide and 65% aqueous solution of formic acid was used (Shapovalov, 2015). The number of components in the mixture was taken for the 5 mole% and 15 mole% epoxidation (with an excess of formic acid). Theoretical levels of epoxidized units were calculated according to the relation: $r_t = [H_2O_2]/[Polyisoprene\ units]$. The mass composition of mixes is given in tab. 1.

Table 1. The composition of mixes for modification

Substance	The concentration of components in solution [wt. %]	
	Composition No.1 5 mol % epoxide content	Composition No. 2 15 mol % epoxide content
NR	11,58	8,17
Xylene	78,17	69,96
Hydrogen peroxide	0,29	0,59
Formic acid	0,39	1,38
Water	9,57	19,90
Total	100,00	100,00

Qualitative analysis of the initial scrap NR and received ENR was carried out by IR spectroscopy of 40-50 microns films on a quartz glass in a wide range of wavelengths. The special attention was paid to absorption bands of epoxy, hydroxyl and carboxyl groups. For the quantitative analysis back titration was used, the content of epoxy groups were determined using the method (Toropceva, 1972), the change in the total unsaturation were determined using the iodine value method (Shapiro, 1976).

In order to ensure the necessary conditions for processing and modification was used a laboratory reactor for mass transfer.

4. EXPERIMENTAL

In (Zybyjlo, 2015), the authors proposed the scheme for processing and epoxidation of the scrap NR in xylene-water medium with “*in situ*” formed peracid in insulated reactor (Fig. 1).

The following scheme of the modification of natural rubber with simultaneous phase transitions of reagents and buffer system was proposed fig. 1.

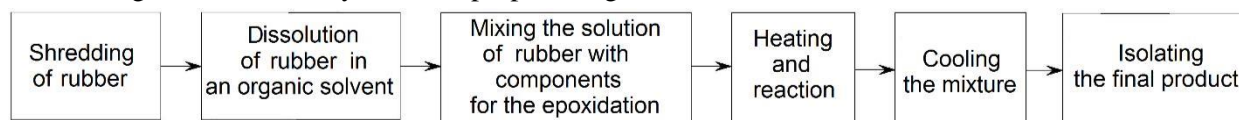


Figure 1. The epoxidation process scheme of waste natural rubber.

The epoxidation reaction was carried out in a 500-ml three-necked round-bottom flask equipped with a thermometer and a reflux condenser. Solutions of rubber and epoxidizing agent were placed in the reactor before heating. The flask was heated by sand oven.

The mixture of aqueous solutions of formic acid and hydrogen peroxide in low concentrations allows to obtain oxidizing agent - performic acid (Petrovic, 2002). Low concentrations of the reagents increase the overall safety of the process, minimizes side reactions and eliminates the need for feeders and gradually adding substances.

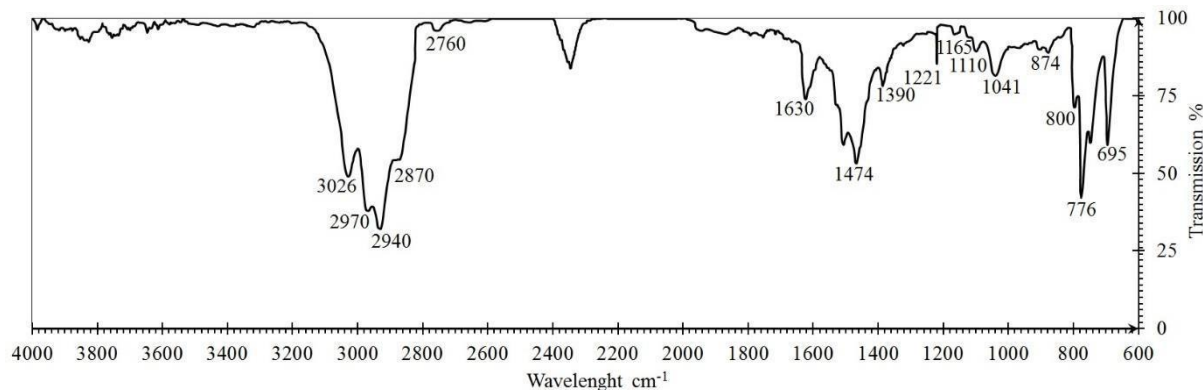
The formation of acid in the aqueous solution of reagents proceeds with a faster rate than it's consumed in the reaction. Evaporation of water results in intensive mixing of rubber solution and foam formation. Anticipated that the epoxidation reaction and other side reactions proceeded at the interface between the liquid and gas phases in the foam.

The time course of the process, excluding the heating and cooling was three hours. At the end of the process the solution changed its color to a yellowish white that indicates chemical reactions in the rubber solution; pH value for the first composition was 7, for the second - 6.4 due to an excess of formic acid.

5. RESULTS AND DISCUSSION

Decrease of rubber unsaturation in first composition was 5.80 mol%. instead of theoretical 5.0 mol%, that indicates a relatively low extent of side reactions, such as of destruction, polymerization, ring-opening etc. For the second composition decrease of rubber unsaturation was 10.28 mol% instead of theoretical 15.0 mol%, that indicates incomplete epoxidation process. Thus, increasing the concentration of the reactants decreases the epoxy yield.

IR spectrum of scrap, which was used in research is shown in (Fig. 2a), the IR spectra of the products with theoretical epoxy yield equal to 5 mol% and 15 mol% are shown in (Fig. 2b-c), respectively.



a)

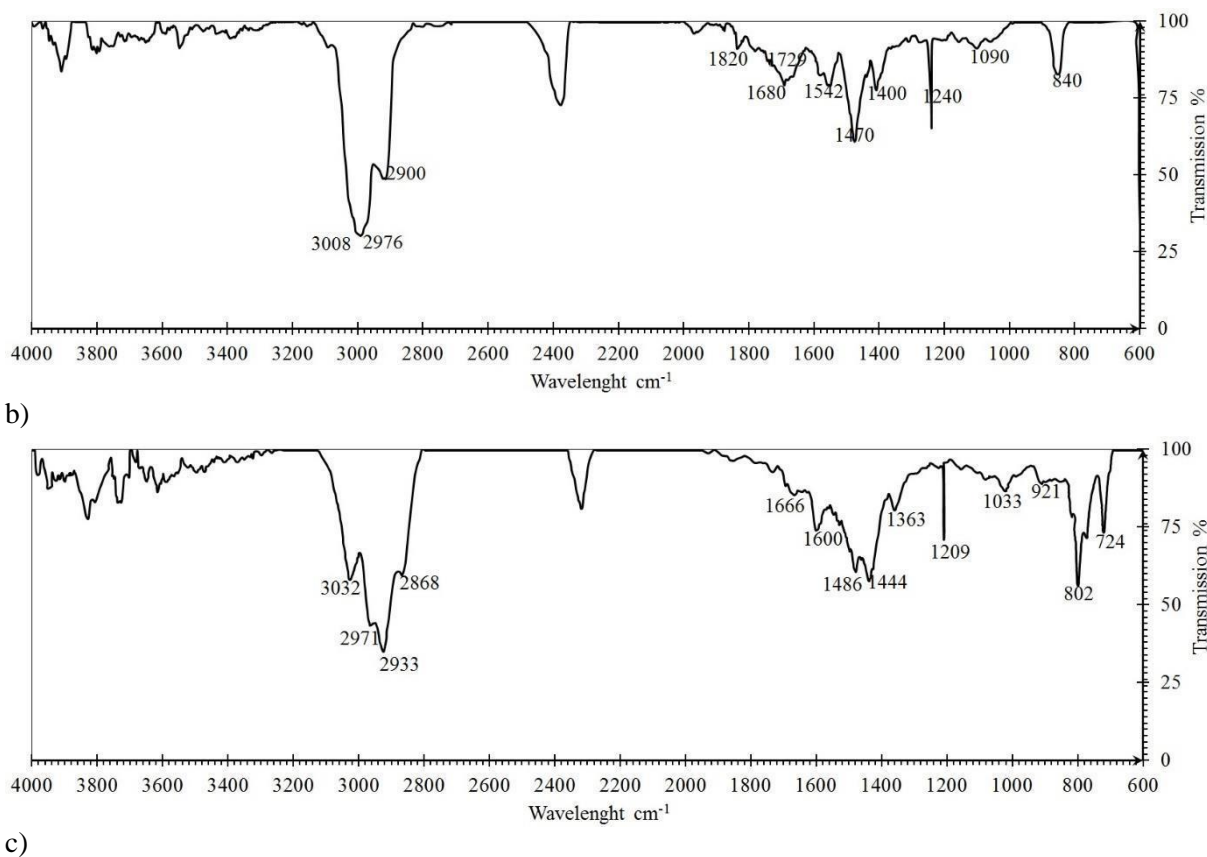


Figure 2. IR spectra of:

- a) –scrap NR;
- b) - sample with the calculated epoxy yield about 5 mol%;
- c) - sample with the calculated epoxy yield about 15 mol%.

During the epoxidation IR spectroscopy was used to follow the changing of chemical composition of the obtained product. Disappearance of the absorption bands in the $1680\text{--}1620\text{ cm}^{-1}$ corresponds to the stretching vibrations of the double bonds $\text{C}=\text{C}$ (Bellamy, 1980) in the 1,4cis polyisoprene backbone of scrap indicates decrease in unsaturation (Kupcov, 2001). A peak at 1729 cm^{-1} corresponds to the stretching vibrations of the acidic carbonyl groups of the ketone or aldehyde type in the first composition (Bellamy, 1980). In addition, the presence of peaks at 1542 cm^{-1} and 1400 cm^{-1} corresponds to the symmetric and asymmetric stretching vibrations of the acidic terminal groups (Avvakumova, 1990).

This indicates the break of the polymer chain and the occurrence of side reactions with formic acid during epoxidation. Absorption peaks in the range of $950\text{--}840\text{ cm}^{-1}$ corresponds to the stretching vibrations of the epoxy ring (Ermolchuk, 2008). The presence of the peak at 921 cm^{-1} indicates the presence of the epoxy groups in the second composition. Small peak at 1650 cm^{-1} corresponds to deformation vibrations of OH groups, that indicates ring-opening of the epoxy groups with the accession of hydrogen (Kupcov, 2001) in the second composition. Partial hydration of the epoxy groups, catalyzed by an excess of the formic acid in aqueous solution, occurs in the presence of water (Shapovalov, 2014).

6. CALCULATIONS

The reaction mixture is boiling at the equilibrium temperature, which can be analytically determined from the vapor pressure curves of components at different temperatures (Kasatkin, 1961).

Graphically, the equilibrium temperature is the intersection of pressure-temperature curve of solvent $P_s(T_s)$ and inverted pressure-temperature curve of water $P_w(T_w)$ (Figure 3.). The pressure-temperature curve of water is drawn from the atmospheric pressure point.

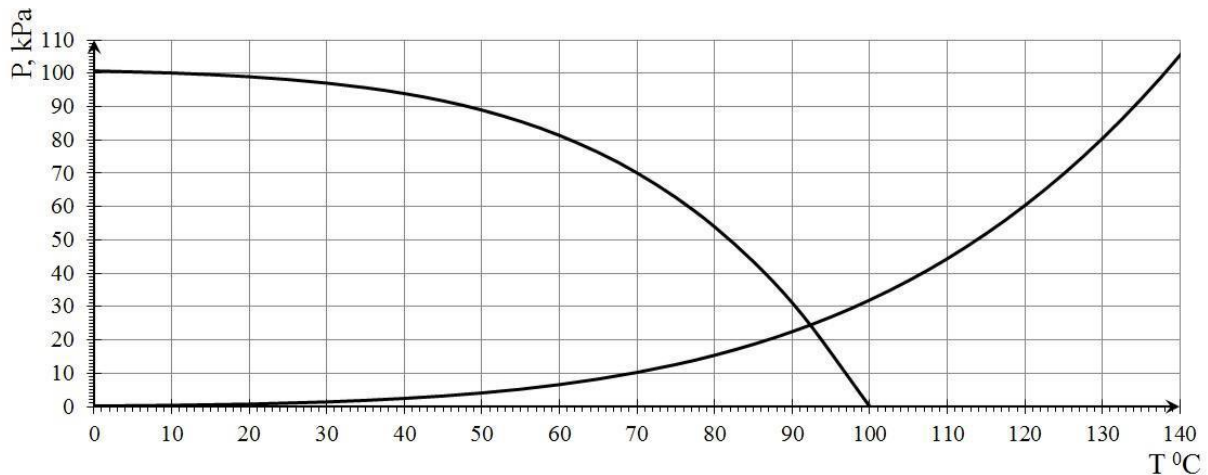


Figure 3. The graph of vapor pressure of xylene at its steam distillation.

The numerical value of the equilibrium temperature was calculated from the system of equations for vapor pressure dependence on temperature for a mixture water-xylene. System of Antoine equations for a mixture water-xylene is (Kasatkin, 1961):

$$\ln(P_s) = 18,3036 - \left[\frac{46,13 + (T_s + 273,15)}{46,13 + (T_s + 273,15)} \right]$$

[3]

$$\ln(P_w) = 8,7729 - \left[\frac{46,13 + (T_w + 273,15)}{46,13 + (T_w + 273,15)} \right]$$

The process occurs at atmospheric pressure, therefore the partial pressure of solvent vapor may be expressed as the difference between the atmospheric pressure and the partial pressure of water vapor. The design temperature from system of Antoine equations is 92,4 °C.

The average temperature during the epoxidation of scrap solution corresponded to the calculated temperature (92,4 °C) in a laboratory reactor.

Conducting the epoxidation of rubber in biphasic mixtures with aqueous phase provides natural mixing by steam bubbling and prevents hydration of the epoxy groups.

The authors suggested use of reactors with circulation for carrying out the epoxidation of scrap. The proposed reactor for epoxidation of scrap NR schematically shown in Fig. 4. The reactor consists of: an U-shaped vertical vessel with input section 1 and output section 2; overflow pipe 3; a three-tiered stirrer 4 mounted on a shaft 5 and disposed in the input section 1 between the grid plates 6, 7 mounted above and below the stirrer; a reaction chamber 8; flanged fittings 9,10,12; a shaft hole 11 with end face mechanical seal; a heat exchanger 13 mounted under the flange cover 15 by use of vertical rods 14, also vertical rods are used to supply heat medium to the heat exchanger; drop eliminators 16, 17 mounted on rods and shaft; flanged fittings 18,19 for removal of the vapor phase and for emptying the reactor when it is stopped.

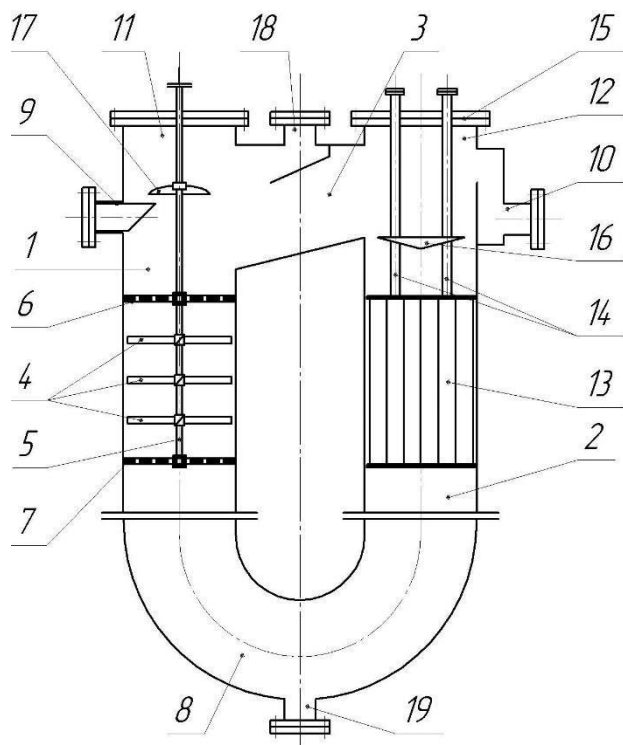


Figure 4. Reactor.

The reactor design provides for the convenience of assembly and dismantling due to sectional packet structure (Jushko, 2015). In addition, such a reactor design provides: hydrodynamic conditions necessary for working with a viscous reaction mixture, the absence of a stagnant zones; high degree of emulsification, which significantly intensifies the epoxidation.

7. CONCLUSIONS

It was found that the use of the epoxidation for modification of scrap NR allows to solve problem of the safe recycling of waste rubber production in the most efficient way. As a result of this research, ENR with regulated epoxy yield and without a significant amount of side reactions was obtained.

The proposed method for the epoxidation NR in the U-shaped reactor allows to carry out the controlled reaction with high conversion rate of scrap NR to ENR due to the possibility of regulating the temperature in the reaction zone of the reactor.

Industrial use of the developed method for the epoxidation of NR in reactor with circulation is planned for 2016 for the production of protective platings and adhesives based on ENR solution.

The work was performed as part of research direction of "Equipment of Chemical Productions" Department: "Creation of an effective resource saving and energy saving, environmentally friendly technologies for the chemical, petrochemical and related industries."

REFERENCES:

- Avvakumova, N.I. and L.A. Budarina** (304). "Workshop on physics and chemistry of polymers: Study Edition". Khimiya Publ., Moscow, USSR, 1990. (in Russian).
- Bellamy, L.J.** (1980). "The infrared spectra of complex molecules: volume 2, 2nd ed.". Chapman and Hall, London, UK.
- Derouet, D., S Mulder-Houdayer and J.C. Brosse** (2005). "Chemical Modification of Polydienes in Latex Medium: Study of Epoxidation and Ring Opening of Oxiranes". Journal of Applied Polymer Science, Vol. 95, No. 1, January 2005, pp.39–52.
- Doncov, A.A., G.J. Lozovik and S.P. Novickaya** (1979). "Chlorinated polymers". Himija Publ., Moscow, Russia. (in Russian).
- Ermolchuk, L.V., V.P. Boyko, V.K. Grischenko and E.V. Lebedev** (2008). "Epoxidation of liquid rubbers with peracids *in situ*". Journal: Questions of chemistry and chemical technology, No. 5, July, pp. 53-58. (in Russian).
- Fan, M., G.W. Ceska, J. Horgan** (1998). "Method for the epoxidation of unsaturated polymers". Patent USA, No. 5789512 IPC C08C 19/00, C08C 19/06, C08F 8/00, C08F 8/08, C08F 008/08.
- Gregorio, J.R. et al.** (2000). "Very efficient epoxidation of 1,4-polybutadiene with the biphasic system methyltrioxorhenium (MTO)-CH₂Cl₂/H₂O₂". Journal: Macromolecular Rapid Communications, Vol. 21, No 7, May 2000, pp. 401-403.
- Grishin, B.S.** (2010). "Materials of rubber industry: information-analytical database: Handbook". Kazan National Research Technological University Publ., Kazan, Russia. (in Russian).
- Jushko, V.L., D.O. Shapovalov and S.N. Zybajlo** (2014). "Combined process of separation and epoxidation waste production of natural rubber" Modern innovative technologies of training engineers for the mining industry and transport: Collection of scientific papers, Dnepropetrovsk, Ukraine, pp 324-327. (in Russian).
- Jushko, V.L., D.O. Shapovalov** (2015). "Reaktor". Patent UA, No. 109511, IPC C2. (in Ukrainian)
- Kasatkin, A.G.** (1961). "The basic processes and apparatuses of chemical technology 7th ed.". Goshimizdat Publ., Moscow, USSR, 1961. (in Russian)
- Kupcov, A.X. and G.N. Zhizhin** (2001). "The Fourier spectra Raman scattering and IR absorption of polymers: Handbook". FIZMATLIT Publ., Moscow, Russia 2001. (in Russian).
- Kwo Han Kiu** (2007). "Study of adhesion properties of natural rubber, epoxidized natural rubber, and ethylene-propylene diene terpolymer-based adhesives: thesis for the degree of Master of Science". Universiti Sains, Malaysia.
- Luca, M.A., T.E. Machado, R.B. Notti and M.M. Jacobi** (2004). "Synthesis and Characterization of Epoxidized Styrene–Butadiene Rubber/Silicon Dioxide Hybrid Materials". Journal of Applied Polymer Science, Vol. 92, No. 2, February 2004, pp. 798–803.
- Niazashvili, G.A.** (1991). "The adhesives and adhesive compositions for fastening elastomers to metals during vulcanization". CNITJneftehim Publ., Moscow, Russia. (in Russian).
- Petrovic, Z.S., A. Zlatanic, C.C. Lava and S. Sinadinovic-Fiser** (2002). "Epoxidation of soybean oil in toluene with peroxyacetic and peroxyformic acids – kinetics and side reactions". European Journal of Lipid Science and Technology, Vol. 104, May 2002, No. 5, pp. 293 – 299.
- Pichugin, A.M.** (2008). "Materials science aspects of creation tire rubber: Scientific edition". NTTs «NIIShP» Publ., Moscow, Russia. (in Russian).
- Razumovskiy, S.D. and G.E. Zaikov** (1974). "Ozone and its reaction with organic compounds" Nauka Publ., Moscow, USSR. (in Russian).
- Shapiro, D.K.** (1976). "Workshop on Biological Chemistry". Vyisheysh shkola Publ., Minsk, BSSR. (in Russian).

- Shapovalov, D.O., S.N. Zybajlo, V.L. Jushko and V.V. Ved'** (2014). "Epoxidation of natural rubber in the environment of water – xylene". Journal: Questions of chemistry and chemical technology, Vol. 7, May 2014, No. 3, pp. 102–106. (in Ukrainian).
- Shapovalov, D.O., S.N. Zybajlo, V.L. Jushko and V.V. Ved'** (2015). "Method for preparing epoxidized polydiene". Patent Application №a2014.09.104, IPC C08 C19/06, Ukraine. (in Ukrainian).
- Toropceva, A.M., K.V. Belogorodskaja and V.M. Bondarenko** (1972) "Laboratory workshop on chemistry and technology of high-molecular compounds". Himija Publ., Leningrad, USSR. (in Russian).
- Tutorskiy, I.A., E.E. Potapov and A.G. Shvarts** (1993). "Chemical modification of elastomers: Monograph". Himiya Publ., Moscow, Russia, 1993. (in Russian).
- Zybajlo, S.N., Shapovalov, D.O. and V.V. Ved'** (2015). "Application of an epoxidized natural rubber obtained from waste materials of its manufacture". Modern innovative technologies of training engineers for the mining industry and transport: Collection of scientific papers, Dnepropetrovsk, Ukraine, pp 218-221. (in Russian).

ELECTROCHEMICAL DEPOSITION OF MULTILAYERED ELECTROCHROMIC THIN FILMS FOR SMART WINDOWS

KoTOK V.A.^(1,2), kovalenko v. L.^(1,2), ZEMLIANYI v. K.⁽³⁾

⁽¹⁾ *Ukrainian State University of Chemical Technology, Dnipropetrovsak, Ukraine*

e-mail: Valeriy_e-ch@ukr.net

⁽²⁾ *Vyatka State University, Kirov, Russian Federation*

e-mail: vadimchem@gmail.com

⁽³⁾ *Chemical Ecological Lyceum*

e-mail: layaua@gmail.com

SUMMARY: In order to improve physicochemical and especially electrochromic properties, several multilayer films with Ni - Co hydroxides in polyvinyl alcohol presence were precipitated. For films comparison, XRD analysis and electrochemical characterization simultaneously with the recording of optical characteristic were performed. It was shown that the long deposition time of cobalt hydroxide film decreases optical reversibility. It was found that the best optical properties had film with Ni-Co hydroxide with the next sequence of deposition: (1) cobalt nitrate solution - 2 minutes, (2) nickel nitrate solution - 78 minutes. Also for film that had the best optical properties the possible mechanism of optical properties improvement was proposed.

KEYWORDS: nickel hydroxide, electrochromic device, thin film

1. INTRODUCTION

1.1 Electrochromic devices

Electrochromic devices are capable of changing their transparency under applied voltage, thus controlling heat and light transmittance. The state can be changed between bleached, colored or semi-colored. Color can vary from intense to barely noticeable. The voltage supply is only necessary for adjusting the degree of transparency, and after that, the power supply is almost unnecessary for maintenance of required state.

The electrochromic devices are based on redox reactions occurring in an electrochemical cell.

Two processes occur:

- reduction of an oxidized form (the reduced form is colored): oxidized form + electron(s) → reduced form,
- oxidation of a reduced form (the oxidized form is colored): reduced form – electron(s) → oxidized form.

The described reactions are responsible for changes in optical properties. When voltage is turned off the system maintains its altered state. This is called “memory effect”.

The design is composed of two glasses covered with conducting films, that also act as a frame, electrochromic film and an electrolyte. A polyethylene terephthalate (PET) can be used instead of glass, to design flexible devices. In most cases, the tin-doped indium oxide is used as a transparent conducting film. For modulation of incident radiation, at least one electrochromic film must be utilized in the devices' design. A second electrochromic film can be employed to improve color intensity.

1.2 Electrochromic material based on nickel oxide(hydroxide)

Ni(OH)₂ is one of the studied electrochromic materials. In order to employ nickel hydroxide as an electrochromic material, it's deposited on a glass substrate covered with a conductive support.

When current is applied the following reversible topochemical reaction occurs:



Thin films of Ni(OH)₂ change their color from transparent to dark-brown and backwards. The mechanism of electrochromic process depends on structure, presence of water in material's pores and impurities.

Nickel hydroxide is an inexpensive and promising material for electrochromic devices. Its coloration efficiency is about 36 cm²C⁻¹, and is close to coloration efficiency of WO₃ (~42 cm²C⁻¹), that also shows good electrochromic properties; however, it is a cathodic electrochrome.

1.3 Performance-enhancing additives

In order to improve properties of electrochromic films based on Ni(OH)₂ various additives are employed. In most cases, the introduction of additives is aimed at improvement of reversibility of coloring-bleaching process, increase of working current density. The additives can be introduced either into the structure of electrochromic Ni(OH)₂ film or into electrolyte. Various dopants are proposed for coprecipitation with nickel hydroxide for film formation. These are cobalt, aluminum, magnesium, vanadium, zirconium, niobium, silver, tantalum, tungsten, gold, copper, silicon. Common technique for deposition of electrochromic nickel oxide(hydroxide) films are: electrochemical deposition, vapor deposition, chemical bath. Most additives can be introduced to nickel precursor prior to film formation. Additives such as potassium ferro-ferricyanide are added to the device's electrolyte.

It should be noted, that all mentioned additive affect electrochemical and optical properties of the film, but do not affect such important parameter as film adhesion to conducting support. The adhesion is strongly dependant on deposition method and post treatment and can change over time.

In our laboratory we have demonstrated that adhesion of electrodeposited nickel hydroxide films can be improved by adding small amounts of polyvinyl alcohol to deposition solution.

2. OBJECTIVES

It has been demonstrated that cobalt is used as an additive for electrochromic films of Ni(OH)₂.

After coprecipitation from mixed salt solution a Ni-Co double hydroxide is formed, that possesses better properties than pure Ni(OH)₂ film. It is also known that in battery industry the cobalt in hydroxide form is used as an activator for positive nickel oxide electrode. Cobalt hydroxide additive increases the coefficient of active material utilization by 10 – 15 %. It is stated in literature that cobalt hydroxide is a surface activator i.e. the increase of electrode capacity is attributed to surface contact of cobalt compounds with nickel hydroxide.

Taking into account these statements we've attempted to improve specific characteristics of electrochemically deposited electrochromic films by forming multilayered nickel-cobalt hydroxide film. Three films of following compositions were prepared:

1) Ni(OH)₂ → Co(OH)₂; 2) Co(OH)₂ → Ni(OH)₂; 3) Ni(OH)₂ → Co(OH)₂ → Ni(OH)₂.

The electrochemical performance, optical properties and structure of these films have been compared.

3. EXPERIMENTAL

3.1 Solutions preparation

Electrolyte preparation for nickel hydroxide film deposition. Nickel nitrate concentration $C = 1$ M.

The solution is used in a cathodic space of electrolyzer for nickel hydroxide film deposition. $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ and polyvinyl alcohol (PVA) were weighted using analytical scales. 5 g of PVA were dissolved in hot distilled water. After complete dissolution of PVA, 29.07 g of nickel nitrate were added and solution's volume was adjusted to 100 ml with distilled water.

Electrolyte preparation for cobalt hydroxide film deposition. Cobalt nitrate concentration $C = 1$ M.

The solution is used in a cathodic space of electrolyzer for cobalt hydroxide film deposition. $\text{Co}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ and polyvinyl alcohol (PVA) were weighted using analytical scales. 5 g of PVA were dissolved in hot distilled water. After complete dissolution of PVA, 29.1 g of cobalt nitrate were added and solution's volume was adjusted to 100 ml with distilled water.

Preparation of KNO_3 solution.

Concentration $C = 1$ M. The solution is used in an anodic space of electrolyzer for hydroxide film deposition.

191 g of KNO_3 were dissolved in distilled water and solution's volume was adjusted to 1 L.

Preparation of KOH solution.

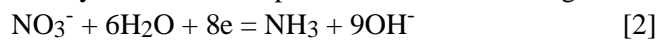
Concentration $C = 0.1$ M. The solution is used as an electrolyte for electrochromic measurements. 5.6 g of KOH were dissolved in distilled water and solution's volume was adjusted to 1 L.

3.2 Film deposition

The hydroxide films were cathodically electrodeposited from nitrate solutions of nickel or cobalt with 5% wt. PVA. Electropolished nickel plates with working area of $S=4 \text{ cm}^2$ was used as a substrate.

The deposition was conducted galvanostatically at current density of 0.625 mA/cm^2 .

The hydroxide film deposition occurs according to following reactions:



where $\text{Me}^{2+} = \text{Ni}^{2+}, \text{Co}^{2+}$.

Electrolyzer for film deposition.

The electrolyzer is constituted by Plexiglas frame, cathodic and anodic chambers, rubber gaskets and diaphragm (Figure 1).

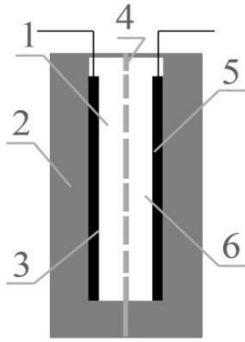


Figure 1. Electrolyzer for film deposition.

1 – Cathodic chamber with $\text{Me}(\text{NO}_3)_2$ and 5% wt. PVA solution; 2 – electrolyzer walls; 3 - cathode – electropolished nickel plate; 4 - diaphragm with low permeability coefficient and rubber Π -shaped gaskets; 5 - anode - nickel plate 6 – anodic chamber with KNO_3 solution.

3.3 Film characterization

Electrochromic and electrochemical characterization.

Electrochemical measurements were performed using Elins P – 8 Potentiostat.

The cell for electrochromic characterization is presented on figure 2.

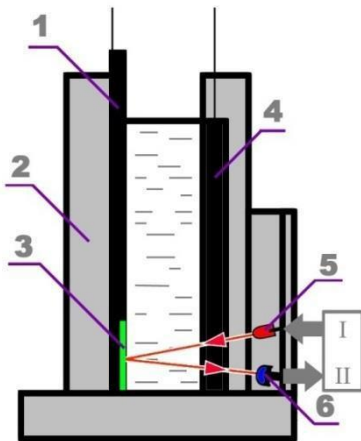


Figure 2. Electrochemical cell

1 – working electrode; 2 – cell frame; 3 – electrochromic film; 4 – Π -shaped counter electrode; 5 – LED; 6 – photoresistor; I – DC power supply; II – analog-to-digital converter.

Nickel foil was employed as counter electrode. Ag/AgCl (KCl sat.) was used as a reference electrode.

The films were cycled in range 0–550 mV (201–751 vs. NHE) at 1mV/s in 0.1 M KOH electrolyte.

The change of film transparency was measured as a change in conductivity of photoresistor that was recorded with help of analog-to-digital converter.

X-ray diffraction analysis.

The X-ray diffraction (XRD) patterns were recorded on Dron 3 diffractometer ($\text{Cu K}\alpha$ radiation) in range $5\text{--}85^\circ 2\theta$.

Synthesis procedure.

The multilayered films have been prepared by consecutive deposition from nickel nitrate and cobalt nitrate solutions, according to reactions 1 and 2.

In order to adequately compare the characteristic of the deposited films, such as optical, electrochemical and structural properties, it is important the all deposited film had same amount of active material. In order to prepare films of comparable thickness the deposition rate of cobalt and nickel hydroxides is assumed to be equal and total deposition time for all film was the same. The deposition times for each layer are listed in table. 1.

Table 1. Deposition time for preliminary experiments.

Layer composition	Deposition time of 1-st layer [min]	Deposition time of 2-st layer [min]	Deposition time of 3-st layer [min]	Total deposition time [min]
Ni(OH) ₂	-----	-----	-----	80
Ni(OH) ₂ - Co(OH) ₂	64	16	-----	80
Co(OH) ₂ - Ni(OH) ₂	16	64	-----	80
Ni(OH) ₂ - Co(OH) ₂ - Ni(OH) ₂	32	16	32	80

However, the deposited films with such high cobalt content had dissatisfactory performance. Thus, the deposition time for cobalt hydroxide layer was reduced. The film deposition times and their labels are listed in table 2.

Table 2. Deposition time for main experiments.

Layer composition / lable	Deposition time of 1-st layer [min]	Deposition time of 2-st layer [min]	Deposition time of 3-st layer [min]	Total deposition time [min]
Ni(OH) ₂ / Ni80	-----	-----	-----	80
Ni(OH) ₂ - Co(OH) ₂ / Ni78Co2	78	2	-----	80
Co(OH) ₂ - Ni(OH) ₂ / Co2Ni78	12	78	-----	80
Ni(OH) ₂ -Co(OH) ₂ -Ni(OH) ₂ / Ni39Co2Ni39	39	2	39	80

4. RESULTS AND DISCUSSION

Based on preliminary experiments the optimal deposition time for $\text{Co}(\text{OH})_2$ layer – 2 min. (Tables 1 and 2). Such deposition time was chosen based on film color after electrochromic tests. Film with such cobalt layer had good transparency and yellow color was not observed.

In addition to XRD and electrochromic tests the films were visually examined for uniformity and absence of defect in bleached and colored states. Each film was rated on a scale from 1 to 5, where 5 is the best score.

4.1 XRD

Because of good adhesion to substrate of obtained films, scraping them for XRD analysis proved to be problematic. Thus a separate set of films, same as listed in table 2 were deposited onto a nickel foil and were sent for analysis. The XRD patterns of deposited films are shown on figures 3 – 5.

It can be concluded that all obtained films are X-ray amorphous with high amount of structural disorder, which is, probably, due to high amount of structural water. The later is related to the fact that disordered crystals tend to accumulate foreign substances, which in case hydroxides are usually water that was present in electrolyte. Based on a series of peaks at $5\text{-}10^\circ 2\theta$ it can be assumed that obtained multilayered films are similar to $\alpha\text{-Ni}(\text{OH})_2$. Absence of peak characteristic to cobalt hydroxide is, probably, related to its low content. Three high-intensity peak are attributed to nickel substrate.



Figure 3. XRD pattern for Ni78Co2 film



Figure 4. XRD pattern for Co2Ni78 film

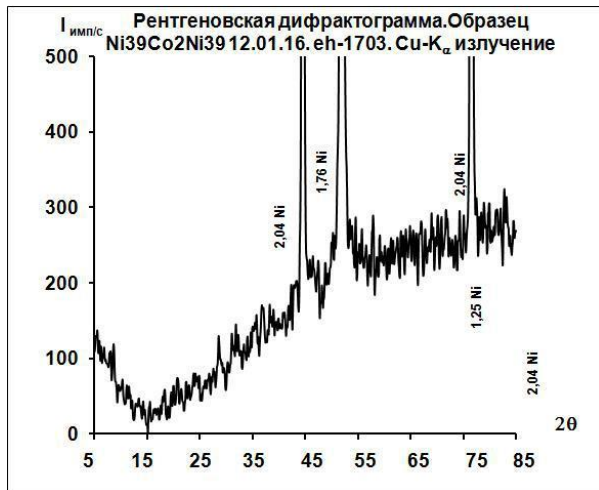


Figure 5. XRD pattern for Ni₃₉Co₂Ni₃₉

4.2 Electrochromic and electrochemical tests

In order to examine electrochemical and optical properties of obtained films, they were characterized were cycled potentiodynamically from 201 — 751 mV vs. NHE (0 — 550 mV vs. Ag/AgCl (KCl sat.)) at 1 mV/s for 5 cycles, and simultaneously their transparency changes were recorded. Cyclic voltammograms (CV) are shown on figures 6 — 9.

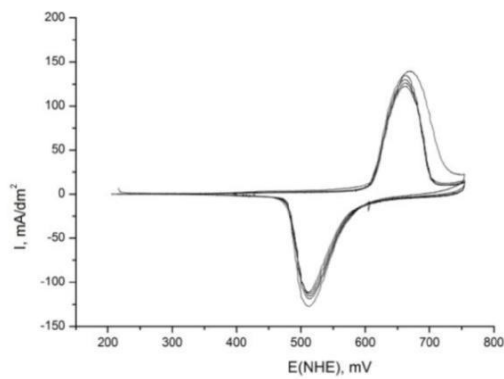


Figure 6. CVs of Ni₈₀ film in 0.1 KOH

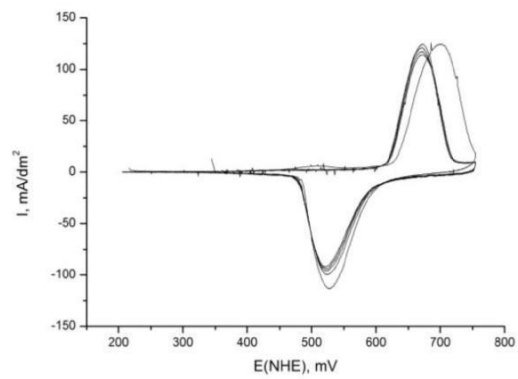


Figure 7. CVs of Co₂Ni₇₈ film in 0.1 KOH

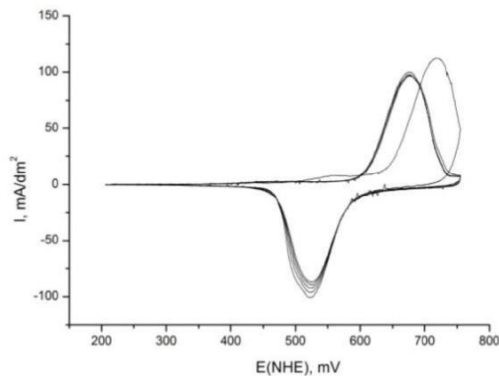


Figure 8. CVs of Ni78Co2 film in 0.1 KOH

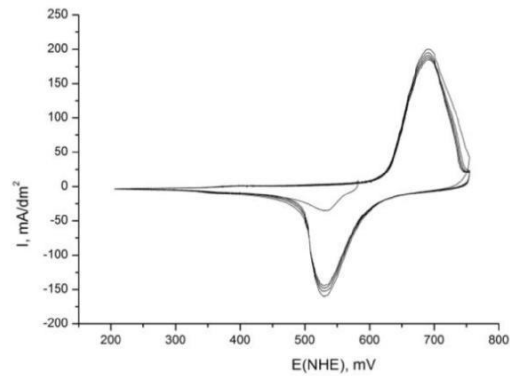


Figure 9. CVs of Ni39Co2Ni39 film in 0.1 KOH

Upon comparison CVs of prepared film few conclusions can be made. First, all film have high activation rate, which is indicated by insignificant position change of oxidation and reduction peak upon consecutive cycling. Second, the reduction peaks of all films have similar potential values, while oxidation peak potential do differ noticeably. For films Ni80, Co2Ni78 and Ni78Co2 the oxidation peak potential is around 650 mV, while for film Ni39Co2Ni39, the oxidation peak is close to 690 mV. The oxidation and reduction peak current densities of deposited films increases in order: Ni78Co2 (97 and -82 mA/dm^2), Co2Ni78 (112 and -89 mA/dm^2), Ni80 (125 and -110 mA/dm^2) and Ni39Co2Ni39 (182 and -145 mA/dm^2). By dividing cathodic peak current by anodic peak current an approximate value for electrode reversibility can be obtained. This value increases in order: Co2Ni78 (0.79), Ni39Co2Ni39 (0.8), Ni78Co2 (0.85) and Ni80 (0.88). Based in this data, it can be concluded that the obtained film have similar electrochemical properties, and the slight differences in parameters are within margin of error.

Let's take a look at optical data of the obtained films. Unlike their electrochemical properties, their electrochromic parameters are quite different. Transparency-time dependencies during potentiodynamic cycling are shown on figures 10 – 13.

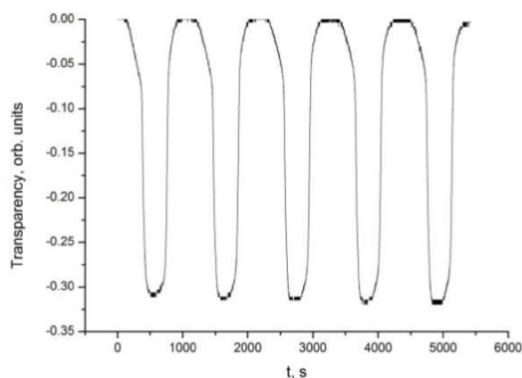


Figure 10. Transparency-time dependency during potentiodynamic cycling for Ni80 film

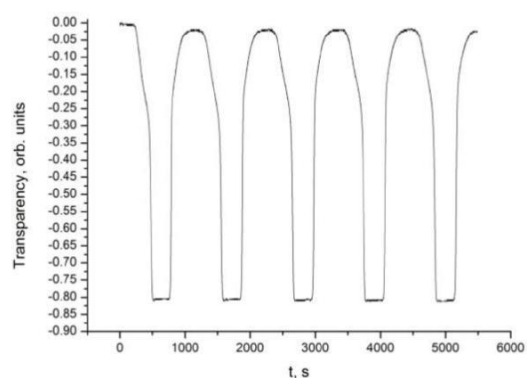


Figure 11. Transparency-time dependency during potentiodynamic cycling for Co2 Ni78 film

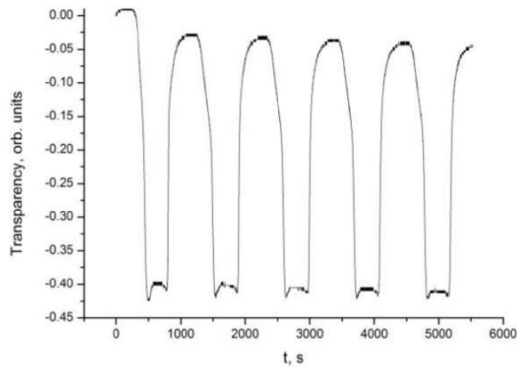


Figure 12. Transparency-time dependency during potentiodynamic cycling for **Ni78Co2** film

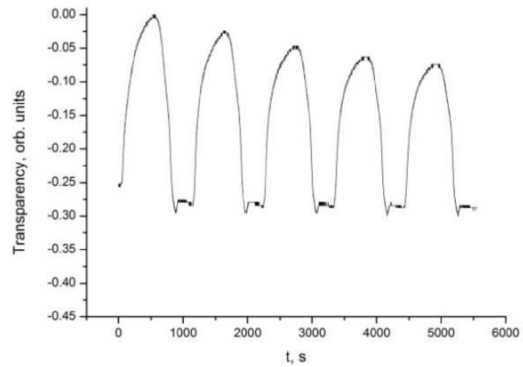


Figure 13. Transparency-time dependency during potentiodynamic cycling for **Ni39Co2Ni39** film

Values along y axis represent transparency relative to initial state. Negative values represent transparency decrease.

The presented graphs show significant difference between film in terms of coloration intensity and cycling stability. Film Ni39Co2Ni39 exhibits the lowest difference between bleached and colored states, followed by Ni80 and Ni78Co2. The highest coloration intensity, and thus the highest coloration effectiveness, is exhibited by Co2Ni78. The rectangular form of bleaching-coloration curve is considered to be an ideal.

The curve for Co2Ni78 film is the closest to that. Based on transparency values of bleached and colored state during consecutive cycles the films Ni80 and Co2Ni78 show the best stability, while Ni39Co2Ni39 and Ni78Co2 are the least stable. Based on visual examination of films in bleached and colored state, the films were given the following scores: Co2Ni78 – 5, Ni80 – 4, Ni78Co2 – 3, Ni39Co2Ni39 – 2. The film Co2Ni78 has exhibited the best electrochromic behavior which. The reason for presumably lies in the fact that during first cycle, the cobalt hydroxide is irreversibly oxidized to semiconductive CoOOH, which is a known behavior for cobalt hydroxide additive in nickel-based alkaline batteries. Thus cobalt layer improves the electrical contact between electrochromic nickel hydroxide film and substrate).

5. CONCLUSIONS

1. The multilayered electrochromic films based on Ni(OH)₂ and Co(OH)₂ have been prepared and their properties have been studied;
2. High optical and qualitative characteristics have been demonstrated for film deposited from cobalt nitrate and nickel nitrate for 2 and 78 min respectively. Such improvement is attributed to formation of CoOOH that improves electrical contact of electrochromic film with substrate.
3. It has been demonstrated that long deposition time for Co(OH)₂ layer formation leads negative impact on optical properties. The optimal time for deposition of cobalt hydroxide layer is 2 min with total film deposition time of 80 min. Such deposition time leads to significant improvement of optical and qualitative characteristics.
4. All prepared film have structure similar to α -Ni(OH)₂.

6. REFERENCES

- **Husev, A. L.** (2015). Flexible electrochromic panels for using in medicine, information systems, to ensure the energy efficiency of buildings and vehicles salons. Materials of project. Saratov, Russian Federation. Direct link <http://www.hydrogen.ru/files/tata/Electrochromic-panels.pdf> (in Russian).
- **Granqvist, C.G.** (2000). "Electrochromic tungsten oxide films: Review of progress 1993-1998". Solar Ener. Mater. Solar Cells., 2000., Vol.60., pp. 201-262.
- **Filonova, O.** (2013). Optimization of the electrolyte composition and mode of preparation of Ni(OH)₂ thin films deposition of for electrochromic devices. Materials of student scientific diploma, 2013, Dnipropetrovsk, Ukraine (in Ukrainian).
- **Rest, A.** (1982). Polyene and linearly conjugated dyes. In Coyle, J. D., Hill, R. R. and Roberts, D. R. (eds.), Light, Chemical Change and Life: A Source Book in Photochemistry, Milton Keynes, Open University, 1982.
- **Crandall, R. S and Faughnan, B. W.** (1980). Electrochromic devices based on WO₃. In Pankove J. L. (ed.), Display Devices, Berlin, Springer-Verlag, 1980, pp. 181–211.
- **Alkahlou, A.** (2006). Electrochromic properties and coloration mechanisms of sol-gel NiO-TiO₂ layers and devices built with them. PhD thesis Germany, Saarbrücken, 2006., P.173.
- **Michaelis, L.; Hill, E. S.** (1933) "The Viologen Indicators" J. Gen. Physiol. 1933, 16, 859-873.
- **Monk, P.M. S., Mortimer, R. J. and Rosseinsky, D. R.** (1995). Electrochromism: Fundamentals and Applications, Weinheim, VCH, 1995.
- **Monk, P.M.S., Fairweather, R. D., Duffy, J. A. and Ingram, M. D.** (1992) "Evidence for the product of viologen comproportionation being a spin-paired radical cation dimer". J. Chem. Soc., Perkin Trans. II, 1992, 2039–41, by permission of The Royal Society of Chemistry.
- **Robin, M.B.** (1962). "The color and electronic configuration of prussian blue". Inorg. Chem. 1962., V.1, № 1, P.337 - 342. G.K. Wertheim, A. Rosencwaig. Characterization.
- **Wertheim, G.K. Rosencwaig, A.** (1971). "Characterization of Inequivalent Iron Sites in Prussian Blue by Photoelectron Spectroscopy". J. Chem. Phys., 1971., V.54, № 7. , P. 3235 -3237.
- **Barsukov, V.Z.** (1985). Theory multilevel macrokinetics in dynamical systems with solid-phase reactant and its application in the development of chemical power sources. Dissertation of Doc. Chem. Sciences., Dnipropetrovsk, Ukraine, 1985., P. 495 (in Russian).
- **Guliamov, Y. M.** (1975). Some aspects of the theory of oxide nickel electrode of alkaline battery. Dissertation of Doc. Chem. Sciences., Dnipropetrovsk, Ukraine, 1975, P. 214 (in Russian).
- **Tisyachniy, V.P.** (1971). Electrochemical behavior of nickel electrode in alkaline solutions. Dissertation of Cand. Tech. Sciences. Dnipropetrovsk, Ukraine, 1971, P. 182 (in Russian).
- **Venkat, S., John, W. W., Ralph, E. W.** (2000). Mathematical models of the nickel hydroxide active material. J. Solid State Electrochem (2000) 4: 367±382.
- **Claes, G. G.** (2014). Electrochromics for smart windows: Oxide-based thin films and devices. Thin Solid Films 564 (2014) 1–38.
- **Tenkovtsev, V.V., Center B.I.** (1985). Fundamentals of the theory and operation of sealed nickel-cadmium batteries, Leningrad, USSR, Energoatomisdat 1985, P. 93 (in Russian).
- **Debajyoti, M. and Gilles, V.** (2012). "Improved reversibility of color changes in electrochromic Ni–Al layered double hydroxide films in presence of electroactive anions". Journal of Electroanalytical Chemistry, 687, (2012), 58–63.
- **Liu, B., Wang, X.Y., Yuan, H.T., Zhang, Y.S., Song, D.Y. and Zhou, Z.X.** (1999). "Physical and electrochemical characteristics of aluminium-substituted nickel hydroxide". Journal of Applied Electrochemistry 29: 855±860, 1999.

SMART WINDOWS: CATHION INSIDE AND ANION OUTSIDE ACTIVATION OF ELECTROCHROMIC FILM OF NICKEL HYDROXIDE

MIKHAIL BARAMSIN⁽¹⁾, VADYM KOVALENKO^(2, 3), VALERII KOTOK^(4, 5),
POLINA KOVALENKO⁽⁶⁾

⁽¹⁾ Lyceum of Innovation Education, Vyatka State University, Kirov, Ukraine, mbaramzin@inbox.ru

⁽²⁾ Ukrainian State Chemical Technological University, Dnipropetrovsk, Ukraine, vadimchem@gmail.com

⁽³⁾ Vyatka State University, Kirov, Ukraine, vadimchem@gmail.com

⁽⁴⁾ Ukrainian State Chemical Technological University, Dnipropetrovsk, Ukraine, valeriykotok@gmail.com

⁽⁵⁾ Vyatka State University, Kirov, Ukraine, valeriykotok@gmail.com

⁽⁶⁾ Vyatka State University, Kirov, Ukraine, kovalenko.winner@gmail.com

SUMMARY

Electrochromic devices, named Smart Windows, are capable of changing a light transmission under effect of electric current. Smart windows play an important role in creating of comfortable environment of existence. Modern residential and office space, cars must have minimum power consumption, and this could be realized by electrochromic device. In our days liquid crystal electrochromic devices are most common, but they have many disadvantages. Electrochromic devices based on electrochemical reactions are lack of the most of these shortcomings. Nickel hydroxide which is transparent and its oxidized form Ni(OH)₂ is black can be used for electrode of electrochromic devices. It was hypothesized that electrochromic properties of nickel hydroxide could be improved by activation: inside (to change film structure) or outside (change electrolyte composition).

The aim of investigation is to detect the possibility of improving of nickel hydroxide film electrochromic properties by activation. To achieve this aim it is necessary to solve several goals: To achieve this aim it is necessary to solve several goals: To achieve this aim it is necessary to solve several goals: 1) to carry out inside activation of nickel hydroxide by incorporation Al³⁺ to the film structure; 2) to carry out outside activation by adding [Fe(CN)₆]³⁻ to cycling electrolyte; 3) to investigate the electrochemical and electrochromic properties.

Nickel hydroxide film was obtained by cathode template synthesis in special diaphragm cell under 40°C and current density 0,625 mA/cm² during 80 minute from 1 M Ni(NO₃)₂ solution with 5% PVA. Method of inside activation – coprecipitation Ni-Al LDH from solution 1 M Ni(NO₃)₂, 0,25 M Al(NO₃)₃, 5% PVA. In outside activation method, potassium hexacyanoferrate (III) (1.6 mg/l and 3.2 mg/l) was added to cycling electrolyte. Electrochemical and electrochromic properties have been investigated simultaneously by cycling voltammogram and system “light diode - photoresistor” respectively.

Conclusion. 1) Inside cathion (Al) and outside anion ([Fe(CN)₆]³⁻) activation of Ni(OH)₂ film have been carried out; 2) Al activation resulted to loss electrochemical and electrochromic properties due to poisoning; 3) Outside hexacyanoferrate activation (C=1,6 mg/l) hasn't given effect. But under C=3,2 mg/l i_{kpeak} are increased on 147% (anode) and 78,6% (cathode), transparency change degree was increased on 44,4%.

KEYWORDS: Nickel Hydroxide, Electrochromism, Activation

7. INTRODUCTION

The creation and application of materials with controllable optical, magnetic, electrochemical and catalytic properties is one of the urgent problems of modern era. A great deal of interest is paid to oxide and cyanoferrates of transition metal. Under influence of

external factors, the valence of transition metal in these compounds can change, leading to alteration of physicochemical properties. In some cases this is accompanied by change of compound's stoichiometry. The reversibility of such changes are important for application purposes. An example of such valence change is an electrochromic effect — color change under applied electrical current of iron hexacyanoferrate (Prussian blue) and tungsten trioxide thin films. The transition metal oxides and cyanoferrates are can have variable structure and chemical composition based on synthesis procedure, post treatment and operating conditions. This opens possibility to tailor the properties of these compounds. However, at the same time, a number of uncontrollable factors prevent the achievement of reproducible results.

Despite the growing number of publications, numerous questions about the influence of structure and chemical composition on optical and electrochemical properties are yet to be answered properties. The complexity of research subject requires for combined application of methods from of solid-state physics, surface chemistry and physics, physicochemistry and electrochemistry. Thus, the research of structure and properties of transition metal compounds and factors that affect them, is a relevant problem from scientific and applied points of view.

Electrochromic devices (greek Ἠλεκτρον - amber, chromos - color, greek) change transparency of active material under applied voltage, thus controlling amounts of incident light and heat. The state can be changed between bleached, colored or semi-colored. Color can vary from intense to barely noticeable. The voltage supply is only necessary for adjusting the degree of transparency, and after that, the power supply is almost unnecessary for maintenance of required state. The color appears at the edges and slowly spread to the middle. The process is rather slow, and can take from seconds to few minutes, based on window size (the “rainbow effect” [7, 8].

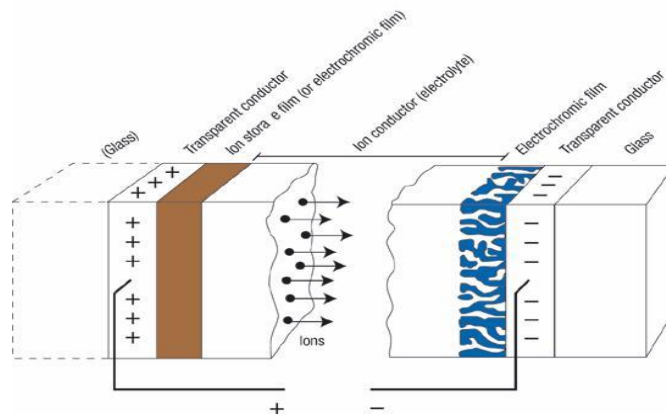


Figure 1. Design of an electrochromic devise

The electrochromic devices are usually built with inorganic electrochromic materials. Such devices consists of two optically transparent electrodes, with a layer of electrochromic material deposited on one of them and ion-generated layer is deposited on the other, with ion-conductor(electrolyte) in-between. Under applied voltage, the appositively-charged ions are generated at an anode, which are injected into electrochromic layer. As a result of cathodic reaction the coloring of electrochromic layer occurs. When polarity is switched the process is reversed and electrochromic layer is bleached. For a typical electrochromic device the transmittance in visible region for bleached state is around 70-50%, and — 25-10% for colored state. Darkening coefficient (SC), characteristic for electrochromic devices is about 0,67-0,60 for bleached state and 0,30-0,18 for colored state [2, 7, 8].

Electrochromic properties of nickel hydroxide, tungsten and niobium oxides find their application in electrochromic displays, optical modulators, Smart windows, rear-view car

mirrors [1, 3-6]. In most cases these devices employ thin electrochromic films, that can be deposited using various methods, such as vacuum vapor deposition. However, one of the simplest and economically viable method for deposition of stable electrochromic films, with good optical properties is cathodic electrodeposition [9, 11-13]. By varying deposition condition structure and electrochromic properties of electrochromic films can be varied. Ni(OH)₂ is an anodic electrochrome and thus can be paired with cathodic electrochrome based on WO₃. Work [10] presents spectroscopic absorbance spectra of cathodically electrodeposited WO₃, NiO and Nb₂O₅ films.

The correlation between current density and change of optical transmittance during potentiostatic cycling and relation of these parameters to nanostructure of these films. Cathodically deposited WO₃ films are characterized by high porosity and large surface area leading to higher operation speeds of devices utilizing them, compared to those based on polycrystalline films. However, there has not been much research to establish correlation between structural and electrochromic properties of WO₃ films. The coloring-bleaching process of electrochromic oxide electrode is realized through ion-electron injection and extraction [14, 15]. The coloring of such WO₃ electrode under flow of cathodic current is based on capture of electrons, injected into oxide film onto vacant d-orbitals of W (VI)-centers, with their reduction to W (V) centers, which are coloration center of WO₃. The excessive charge introduced by injected electrons is compensated by such cations as H⁺, and Li⁺, that enter into film from electrolyte and reside near oxygen atoms [15-17]. It has been established that propagation of injected cations electrons from films surface to the substrate occurs in agreement with diffusion mechanism.

The effective diffusion coefficient for these charge carriers is potential dependent and reaches its maximum value ($D_{ef} = \sim 0,9 \cdot 10^{-8} \text{ cm}^2/\text{s}$) at $E = \sim 0,1 \text{ V vs. Ag/AgCl(KCl sat.)}$ [17]. The electrochromic properties of nickel hydroxide and Nb₂O₅ based films have been studied to a lesser extent than those of WO₃, they are promising material of electrochromic devices.

8. MAIN PURPOSE, HYPOTHESIS AND PARTICULAR GOALS

Aim of the work is to determine the possibility for improvement of electrochromic properties of nickel(II) hydroxide film by cationic(internal) or anionic(external) activation.

Goals:

- 1) conduct cationic activation of nickel hydroxide film by introduction of aluminum into film, with formation of LDH;
- 2) conduct anionic activation by introduction of electroactive hexacyanoferrate(III) ion into electrolyte;
- 3) study the electrochemical and electrochromic properties of activated films and compare them with non activated one.

9. METHODS AND PROCEDURES

3.1. Deposition of nickel hydroxide films.

The electrochromic nickel hydroxide film prepared by cathodic templating synthesis in a custom-built cell, at constant temperature of 40°C, at current density 0,625 mA/cm during 80 min. The templating synthesis was conducted using 1 M Ni(NO₃)₂ solution, with 5% wt. of polyvinyl alcohol(PVA) as templating.

Electrolyzer for Ni(OH)₂ film deposition consists of Plexiglas frame, cathodic and anodic chambers, rubber gaskets and diaphragm (Fig.2.). The diaphragm is made of Doramic material, and is necessary for separation of anodic cathodic chamber. The 1M Ni(NO₃)₂

solution was used as a catholyte and 1M KNO₃ was used as an anolyte. The nickel plate electropolished in H₃PO₄, H₂SO₄ and CrO₃ solution was used as a cathode.

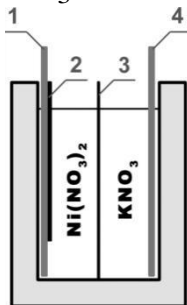
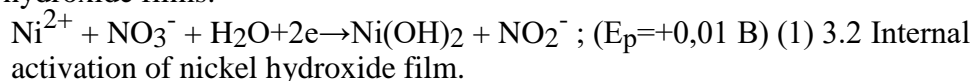


Figure 2. Electrolyzer for Ni(OH)₂ film deposition:

1 – Substrate(cathode); 2 – black dielectric; 3 – diaphragm; 4 – nickel anode.

During deposition of nickel hydroxide film, we assume that nitrate ions are reduced with simultaneous formation of OH⁻ ions that react with nickel ions, leading to deposition of nickel hydroxide films:



For internal activation experiment the catholyte of following composition was used: 1 M Ni(NO₃)₂, 0,25 M Al(NO₃)₃ and 5% wt. PVA. The deposition parameters were the same as for pure nickel hydroxide films.

3.3 External activation of nickel hydroxide film.

For external activation the potassium hexacyanoferrate (III) was added to the electrolyte solution for electrochromic measurements. The concentrations of potassium hexacyanoferrate (III) were 1,6 mg/L and 3,2 mg/L.

3.4 Film characterization.

The electrochemical and electrochromic properties were studied using custom built cell (Fig. 3). Electrolyte – 0.1 M KOH (except of external activation experiment), counter electrode – Π-shaped nickel foil, Ag/AgCl(KCl sat.) reference electrode. The electrochromic properties were studied as a reflectance change of working electrode using “LED—photoresistor” junction. The potentiodynamic voltamperograms and “coloration-bleaching” curves were recorded simultaneously. The films were cycled in potential range of 0-550 mV at 1mV/s using EllinsP-8 potentiostat. The “coloration-bleaching” curves were recorded using analog-to-digital(ATD) converter.

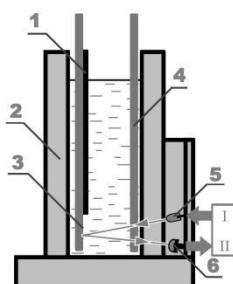


Figure 3. Cell for electrochromic characterization of Ni(OH)₂ films.

1 – black dielectric layer on working electrode; 2 – transparent cell frame; 3 – electrochromic film on working electrode; 4 – Π-shaped counter electrode; 5 - LED; 6 – photoresistor; I – DC input; II – output to ATD converter, connected to computer. The reference electrode is now shown.

10. RESULTS AND DISCUSSIONS

4.1 Electrochemical and electrochromic properties of pure nickel hydroxide films.

Fig. 4 and 5 shows the electrochemically active nickel hydroxide films, with good electrochromic properties were prepared using cathodic templant synthesis.

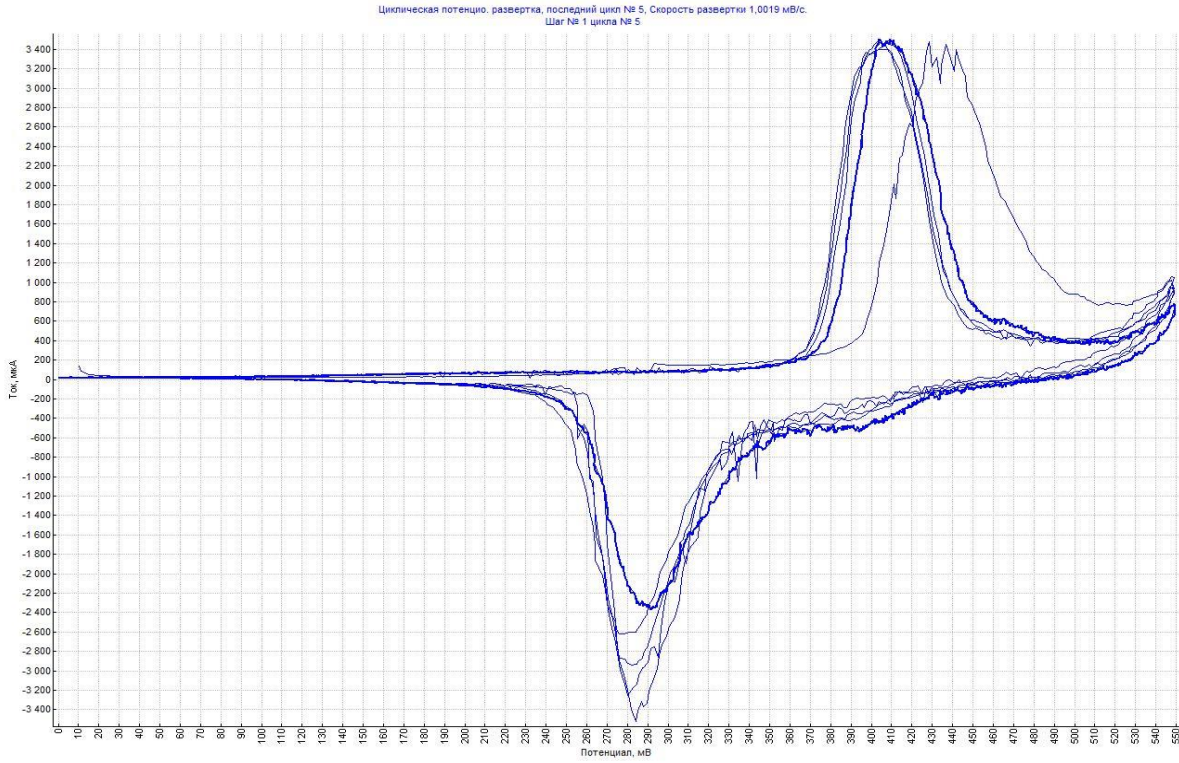


Figure 4. Electrochemical properties of pure Ni(OH)₂ film

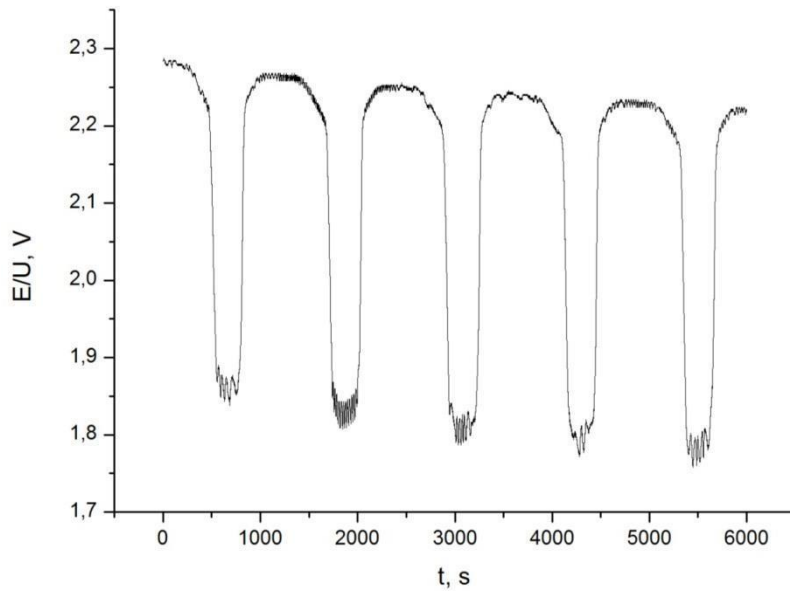


Figure 5. Electrochromic properties of pure Ni(OH)₂ film

4.2 Results of internal activation.

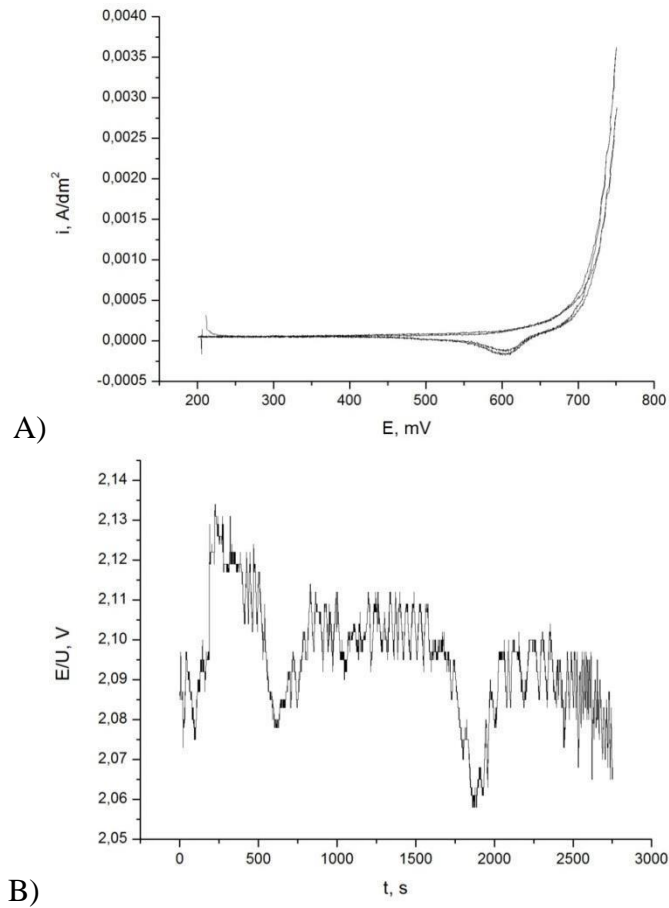


Figure 6. Electrochemical (A) and electrochromic (B) properties of Ni-Al hydroxide (molar ratio Ni:Al 4:1)

The internal activation by introduction of aluminum nitrate to deposition solution (25 mole % relative to Ni), lead to formation of hydroxide with low electrochemical activity: the anodic peak on cyclic voltammograms is absent and cathodic peak is very small. In addition the electrochromic properties of film are almost absent. This is contradictory to literature data on Ni-AL LDH with such cation ration have good electrochromic properties. This fact can be explained that during electrodeposition pH near cathode was high enough for redissolution of aluminum with formation of aluminate ion, which was then incorporated into nickel hydroxide film. The aluminate ion is a known inhibitor of electrochemical activity of nickel hydroxide.

The attempt to deposit a nickel-aluminum hydroxide film with higher aluminum content (33 mole % relative to nickel) lead to further decrease of electrochemical and electrochromic properties (Fig. 7)

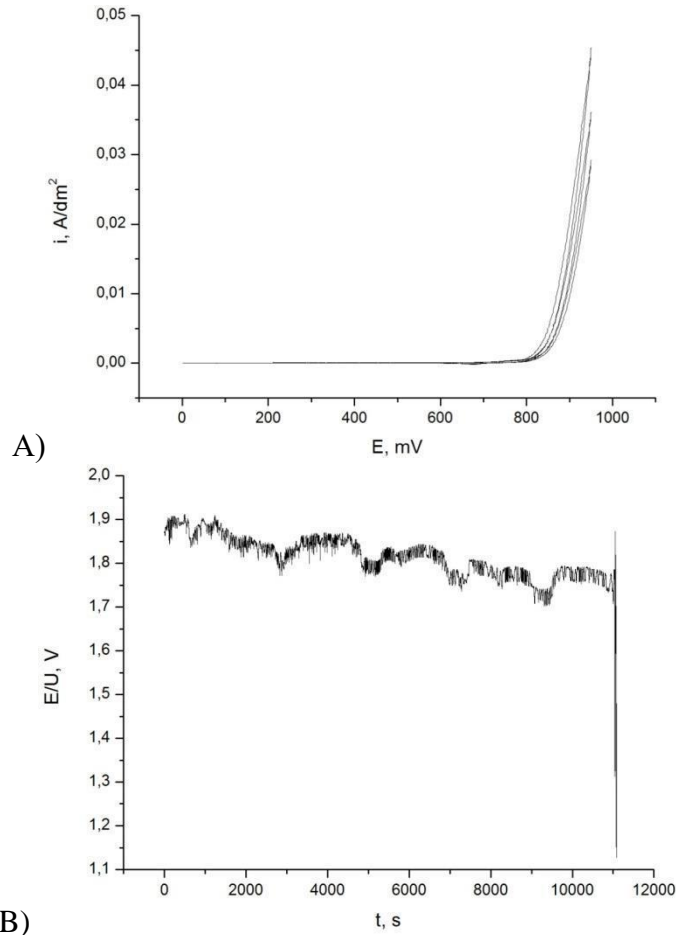


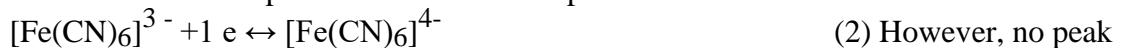
Fig. 7. Electrochemical (A) and electrochromic (B) properties of Ni-Al hydroxide (moalr ratio Ni:Al 4:1)

4.3 Results of external activation.

Fig. 8 shows the results of external activation of nickel hydroxide film by addition of 1,6 mg/L of $K_3[Fe(CN)_6]$ to the electrolyte. Upon comparison of these results with those of pure nickel hydroxide firm (Fig. 4 and 5), it can be seen that very minor improvement were achieved: slight improvement of cycling stability and coloration intensity increased from c 0,4 to 0,45 units.

However, when concentration of $K_3[Fe(CN)_6]$ was increased to 3,2 mg/L significant improvements of film properties (Fig. 9) were obtained. The increase of electroactive ion concentration lead to increase of coloration intensity — from 0,45 to 0,65 units. (44,4% increase). The electrochemical properties were also improved significantly: anodic preak current density increased from $0,85 \text{ mA/cm}^2$ to $2,1 \text{ mA/cm}^2$ (147% increase), cathodic preak current density increased from $0,7 \text{ mA/cm}^2$ до $1,25 \text{ mA/cm}^2$ (78,6% increase).

We assume that hexacyanoferrate ion can form a layer of nickel hexacaynoferrate(III) on the film surface and take part in electrochemical process:



However, no peak characteristic to hyxacyanoferrate anion could be found. This lead us to another assumption that hyxacyanoferrate anion acts as a mediator of electron transfer process:



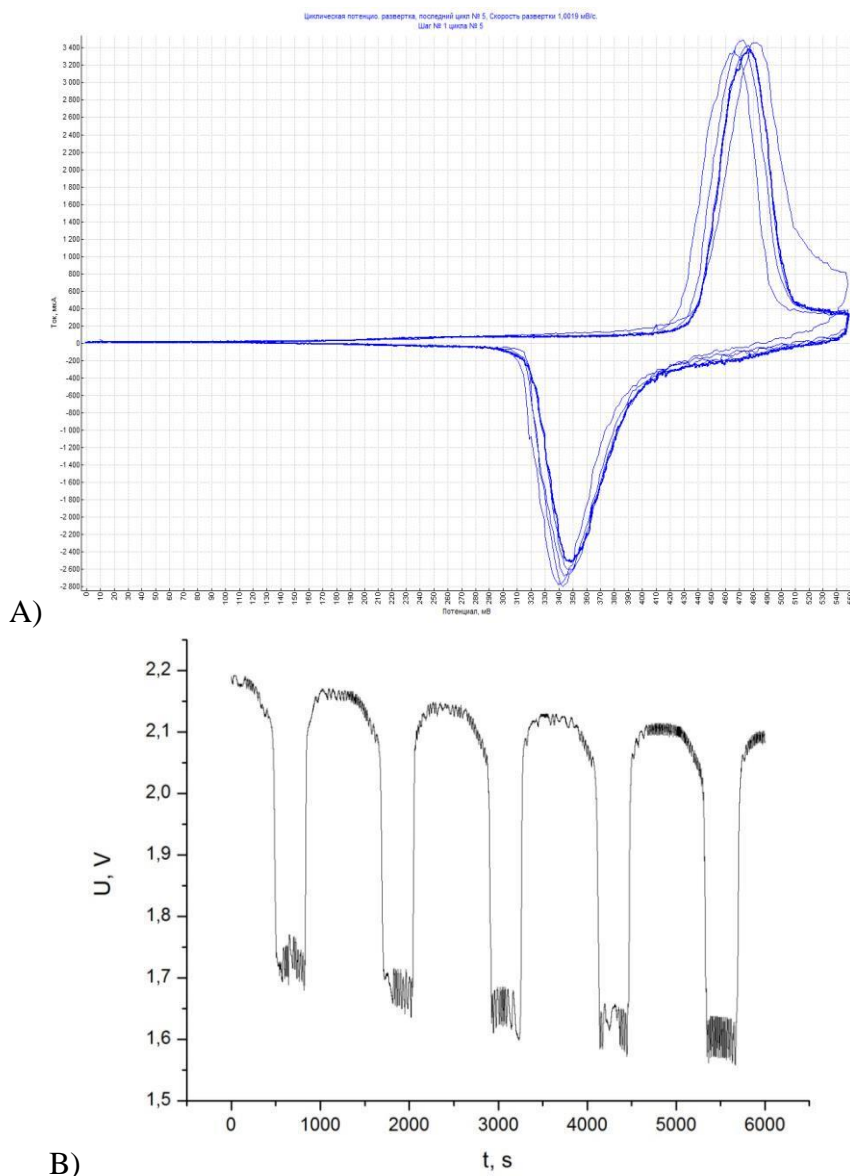


Figure 8. Electrochemical (A) and electrochromic (B) of Ni(OH)₂ film upon addition of K₃[Fe(CN)₆] (1.6 mg/L)

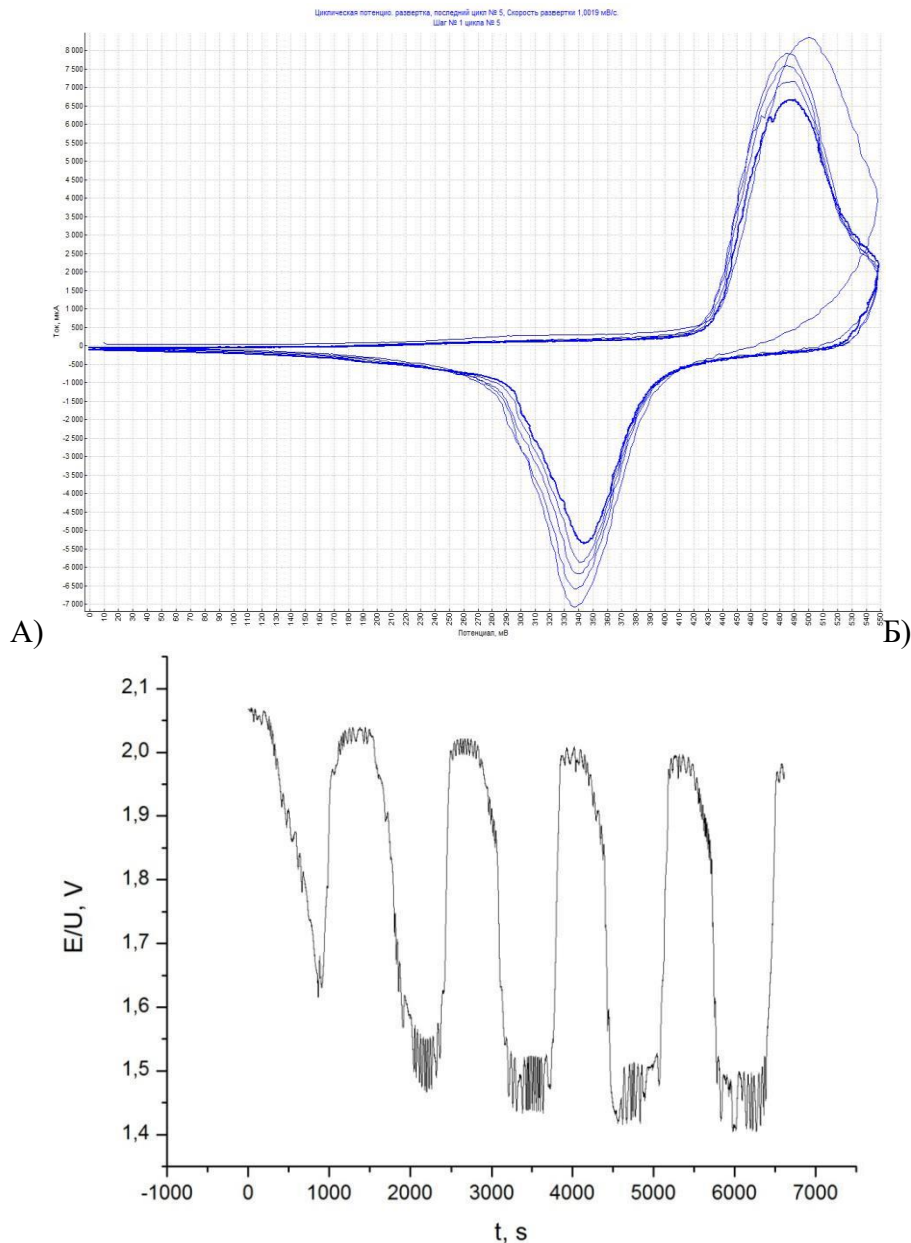


Figure 9. Electrochemical (A) and electrochromic (B) of Ni(OH)₂ film upon addition of K₃[Fe(CN)₆] (3.2 mg/L)

11. CONCLUSION

1) The internal cationic (Al) and external anionic ([Fe(CN)₆]³⁺) activation of nickel hydroxide films were conducted.

2) Activation of Ni(OH)₂ film with aluminum lead to complete loss of electrochemical and electrochromic activity due to poisoning.

3) The external activation trough addition of K₃[Fe(CN)₆] to cycling electrolyte at C=1,6 mg/L did not produce notable results. At C=3,2.mg/L the electrochemical and electrochemical properties were greatly enhanced : peak current density increase by 147% (anodic) and 78,6% (cathodic),coloration intensity increased by 44,4%. This is attributed to participation of [Fe(CN)₆]³⁻ in electrochemical process.

12. REFERENCE

1. **Granqvist , CG** (2000) “Electrochromic tungsten oxide films: Review of progress 1993-1998” *Solar Ener. Mater. Solar Cells*. Vol.60. p.201-262.
2. **Avendaño , E.; Azens , A.; Niklasson , GA; Granqvist , CG.** (2005) “Proton diffusion and electrochromism in hydrated NiO_y and Ni_{1-x}V_xO_y thin films” *J. Electrochem. Soc.* Vol.152. - p. F203- F212.
3. **Lee , S.-H.; Cheong , H.M.; EdvinTracy , S.; Mascarenhas , A.; Pitts , R.; Jorgensen , G.; Deb , S.K.** (2001) *Electrochim. Acta* V.46. p.3415.
4. **Ovshinsky , Stanford K.; Aladjov , Boyko; Joung , Rosa T.; Venkatesan , Srinivasan; Dhar , Subhash K.** (2013) “Structurally modified nickel hydroxide material and method forming same”: Patent. 6086843, USA IPK⁷ 01.13.13/36. Ovonic BatteryCo. Inc., , № 09/153692;
5. **Ho , K.** (1987) “Electrochemical precipitation of nickel hydroxide” *J. Electrochem. Soc.* 134, № 2, p. 520 – 550
6. **Hayashi , Kiyoshi; Morishita , Nobuyasu** (1999) “Method for producing nickel hydroxide”. 069076 IPK⁷ C01G53/04 Matsushita Electric Ind. Co. Ltd., № 00114662.0; 16.07.1999, №20380599 (Japan).
7. **Granqvist , C.G.** (1995), *Handbook of Inorganic Electrochromic Materials*. Elsevier, Amsterdam 1995. 452p.
8. **Monk , P.M.S.K., Mortimer, R.J., Rosseinsky , D.R.** (1995) *Electrochromism Fundamentals and Applications*, VCH, Weinheim
9. **Shiyonovskaya , MI.; Hepel , M., Tewksburry , E.** (2000) *J. NewMat. Electrochem. System* V.4. P.241.
10. **Habazaki , H., Hayashi , Y., Konno , H.** (2002) *Electrochim. Acta* V.47., P.4181.
11. **Faughnan , B.W.; Crandall , R.S.; and Pancove , J.I.(Ed).** (1980) “Display Devices”, vol.40, Springer,Berlin, p.181.
12. **Lee , S.-H.; Cheong , H.M.; Tracy , S. Edvin; Mascarenhas , A.; Pitts , R.; Jorgensen , G., Deb , S.K.** (2001). *Electrochim. Acta* V.46. P.3415.
13. **Lee , S.-H.; Cheong , H.M.; Tracy , S. Edvin; Mascarenhas , A.; Czanderna , A.W.; Deb , S.K.** (1999) *Appl. Phys. Lett.* V.75. p.1541.
14. **Noh , W.; Shin , Y.; Kim , J., Lee , W., Hong K., Akbar , S.A., Park J.** (2002) *Solid State Ionics* V.152-153. p.827.
15. **Ta , K.P., Newman , J. J.** (1998) *Electrochem. Soc.* V.145, N11. p.3860.
16. **Krasnov , Yu.S.; Kolbasov , G.Ya.** (2004) *Electrochim. Acta.* V.49. p.2425.
17. **Niklasson , G.A., Klasson , J., Olsson , E.** (2000) *Electrochim. Acta* V.46. p.1967.

CAPÍTULO 7

-Ciencias Químicas-

COMPARISON OF CHARACTERISTICS OF Ni(II)-Ti(IV) LAYERED DOUBLE HYDROXIDES SYNTHESIZED BY DIFFERENT COPRECIPITATION TECHNIQUES

Vitalii Solovov^(1*), Nikolai Nikolenko⁽¹⁾, Vadym Kovalenko^(1,2**), Valerii Kotok^(1,2).

⁽¹⁾ Ukrainian State University of Chemical Technology, Dnipropetrovsk, Ukraine
e-mail sva-92@mail.ru

⁽²⁾ Vyatka State University, Kirov, Russian Federation
** e-mail vadimchem@gmail.com

SUMMARY

Ni(II)-Ti(IV) layered double hydroxides were synthesized from a solution of Ni²⁺ and Ti⁴⁺ with cationic ratio of Ni²⁺/Ti⁴⁺=5 by using three coprecipitation techniques: titration, coprecipitation at high supersaturation and homogeneous coprecipitation. The prepared samples were characterized by means of X-ray diffraction (XRD), Thermogravimetric analysis (TGA) and Differential scanning calorimetry (DSC).

By means of XRD it was established that all prepared samples consist of mixture of Ni-Ti LDH and β -Ni(OH)₂. Elevated temperature during sample preparation using titration and coprecipitation at high supersaturation did not have significant effect on phase composition, but affected the crystallinity. Higher temperature during homogeneous precipitation lead to higher nickel content in precipitate and reduced the content of β -Ni(OH)₂.

By means of TGA and DSC it was established that titration method leads to formation of samples with higher thermal stability than those prepared by high supersaturation. Elevated temperature and hydrothermal treatment leads to higher thermal stability of said samples. Samples prepared by homogeneous coprecipitation show complicated behavior during thermal decomposition, related to the presence of cyanate in the interlayer gallery.

KEYWORDS: NICKEL, TITANIUM, COPRECIPITATION.

1. INTRODUCTION

Layered double hydroxides (LDH) are hydrotalcite-like compounds — are a class of natural and synthetic compounds with general formula $[M_{1-x}^{2+}M_x^{3+}(\text{OH})_2]^{x+}[A_{x/m}]^{m-} \cdot n\text{H}_2\text{O}$, where: M^{2+} — a divalent metal cation (Ni^{2+} , Mg^{2+} , Zn^{2+} , Ca^{2+} , Fe^{2+} etc.); M^{3+} — a trivalent metal cation (Al^{3+} , Fe^{3+} , Cr^{3+} etc.); A — an anion (CO_3^{2-} , Cl^- , OH^- etc.). They have a layered structure, similar to the brucite ($\text{Mg}(\text{OH})_2$), composed of $\text{M}(\text{II})\text{O}_6$ octahedra partially substituted by $\text{M}(\text{III})\text{O}_6$ octahedra. Such substitution leads to excessive positive charge which leads to incorporation of anions into the interlayer gallery to preserve electroneutrality. Water is also resides in the interlayer gallery (Cavani, 1991). There have been reports on synthesis of LDHs composed of di- and tetravalent cations Ti^{4+} (Shu, 2006), (Zhang, 2008), Zr^{4+} (Saber, 2007), V^{4+} (Saber, 2005).

Ni-Ti LDH can be characterized as titanium-stabilized α -Ni(OH)₂, thus it has same range of potential applications as Ni(OH)₂: electrode material for batteries (Kim, 1997), (Jayashree, 2000), (Min, 2014), (Gu, 2013), electrochromic films (Carpenter, 1987), (Mondal, 2012), (Bendert, 1989), electrooxidation catalyst (Fleischmann, 1971), (Wang, 2011), (Huang, 2005), etc.

However, the presence of titanium in the structure also allows for potential applications of Ni-Ti LDH as a photocatalyst (Lee, 20011), (Zhao, 20114), electrode material for photoelectrochemical cells (Azuma, 2014), anionic sorbent (Gao, 2011), precursor to oxide systems (Shu, 2008), (Shu, 2008)

In addition, the incorporation of functional anion into the LDH structure (Ciocan, 2012), (He, 2010), (Sels, 1999), (Hu, 1998), further broadens range of applications. For instance, incorporations of hexacyanoferrates ($\text{Fe}(\text{CN})_6^{3-/4-}$) (Hansen, 1994), enable Ni-Ti LDH to be used as sorbent for removal of ^{137}Cs (Kulyukhin, 2015).

The most common method for preparation of LDHs described in literature, is coprecipitation of hydroxide using mixed solution of metal salts. The most common types of coprecipitation are: titration or increasing pH method, coprecipitation at high supersaturation and homogeneous precipitation (Cavani, 1991), (He, 2006).

Titration method. Titration method involves the addition of a basic solution (usually NaOH or KOH), to solution containing mixed metal salts (usually nitrates of M^{2+} and M^{3+}).

Coprecipitation at high supersaturation. Coprecipitation at high supersaturation involves addition of mixed metal salts solution to the solution containing base.

Homogeneous precipitation. Homogeneous precipitation is achieved by adding an ammonia releasing agent (urea being the most common) to a mixed metal salts solution and heating the solution to the hydrolysis temperature of chosen agent Hydrolysis leads to slow increases of solution's pH causing precipitation. However presence of ammonia can lead to formation of ammine complexes which can complicate LDH formation.

Even though number of publications about synthesis of LDH with various cation compositions is large, the number of publication on synthesis of Ni-Ti LDH is relatively low. In literature describing synthesis of Ni-Ti LDH, homogeneous coprecipitation is the most common method (Shu, 2006), (Lee, 2011), (Zhao, 2012). There is also a report on synthesis using a titration method (Zhang, 2008).

2. OBJECTIVES:

1) Synthesis of Ni-Ti LDH from a mixed salt solution with cationic ratio $\text{Ni}^{2+}/\text{Ti}^{4+}=5$ using flowing coprecipitation techniques: titration, high supersaturation and homogeneous coprecipitation.

2) Conduct the analysis of prepared samples and compare their characteristics.

3) Establish the influence of temperature during synthesis and hydrothermal treatment on characteristics of prepared samples.

3. MATERIALS AND METHODS

3.1 Regents

$\text{Ni}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, TiCl_4 , NaOH , Na_2CO_3 , and HCl were analytical grade and were used without further purification.

3.2 Sample preparation

Titration method. An aqueous solution containing 0,078 mol of NaOH and 0,0163 mol of Na_2CO_3 , was added drop-wise to a stirred aqueous solution containing 0,037 mol of $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ and 1,62 ml of $\text{TiCl}_4 \cdot \text{HCl}$ mixture (volume ratio 1:1, amount of Ti^{4+} is 0,81 mol). Synthesis was carried out in two variants:

1) During coprecipitation the mixed metal salts solution was held at 65°C . After both solutions were mixed, the obtained precipitate was aged under same conditions during 17h. The obtained sample was marked as Ni-Ti-THT(T — titration, HT—hydrothermal treatments).

2) During addition both solution were held at room temperature and sample was collected right after precipitation. The obtained sample was marked as Ni-Ti-T

Coprecipitation at high supersaturation. An aqueous solution containing 0,037 mol of $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ and 1,62 ml of $\text{TiCl}_4 \cdot \text{HCl}$ mixture (volume ratio 1:1, amount of Ti^{4+} is 0,81 mol) was added drop-wise to a stirred aqueous solution containing 0,078 mol of NaOH and 0,0163 mol of Na_2CO_3 . Synthesis was carried out in two variants:

1) During coprecipitation the basic solution was held at 65°C . After both solutions were mixed, the obtained precipitate was aged under same conditions during 17h. The obtained sample was marked as Ni-Ti-HSHT(HS — high supersaturation, HT—hydrothermal treatments).

2) During addition both solution were held at room temperature and sample was collected right after precipitation. The obtained sample was marked as Ni-Ti-T

Homogeneous coprecipitation. 24,05 g of urea was added to solution containing 0,037 mol of $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ and 1,62 ml of $\text{TiCl}_4 \cdot \text{HCl}$ mixture (volume ratio 1:1, amount of Ti^{4+} is 0,81 mol). The solution was then heated to 70°C and 80°C during 5 h. The samples obtained were marked as Ni-Ti-HP70(HP—homogeneous precipitation) and Ni-Ti-HP80 correspondingly .

In all cases, the samples were filtered, dried at 65°C , ground in a mortar, sifted through nickel grate, washed and dried again.

3.3. Sample characterization

The prepared samples were characterized by means of X-ray diffraction(XRD), Thermogravimetric analysis (TGA) and Differential scanning calorimetry(DSC).

X-ray diffraction(XRD) patterns were recorded on Dron 3 diffractometer (Cu K α radiation) in range 5-85 $^{\circ}$ 2 θ .

Thermogravimetric analysis (TGA) was performed using Shimadzu DTG-60 under air atmosphere heating 5 $^{\circ}$ C/min.

Differential scanning calorimetry(DSC) was performed using Shimadzu DSC-60 under air atmosphere heating 5 $^{\circ}$ C/min.

4. RESULTS AND DISCUSSIONS

4.1 XRD

Figures 1-6 show XRD patterns for synthesized samples. For comparison, they also show characteristic peaks for α -Ni(OH) $_2$, β -Ni(OH) $_2$, and XRD pattern (peak intensities are not presented), taken from literature (Shu, 2006), for Ni-Ti LDH (Ni/Ti=5) prepared by homogeneous precipitation.

It can be seen that all samples show peaks characteristic for LDH structure and α -Ni(OH) $_2$, and are in good agreement with literature data. However all samples also show peaks characteristic for β -Ni(OH) $_2$, meaning there was not enough titanium in precursor solution for formation of pure LDH structure (Cavani, 1991). Pure LDH structure can be achieved by lowering the Ni:Ti ratio in precursor solution.

It should be mentioned, that XRD pattern of sample Ni-Ti-HP80 (Fig. 6) is quite similar XRD patterns for samples Ni-Ti-THT (Fig.1) and Ni-Ti-T (Fig.2). The reason for this in that during urea hydrolysis (1-4) (Chen, 2010), the pH of solution slowly increases, similar to the titration process.



Sample Ni-Ti-HP70 (Fig. 5) shows the highest intensity of peak characteristic for β -Ni(OH) $_2$, implying highest content of β -Ni(OH) $_2$. It can be explained by the involvement of ammonia in precipitation process. The ammonia produced during reaction (3) reacts with nickel forming soluble complex:



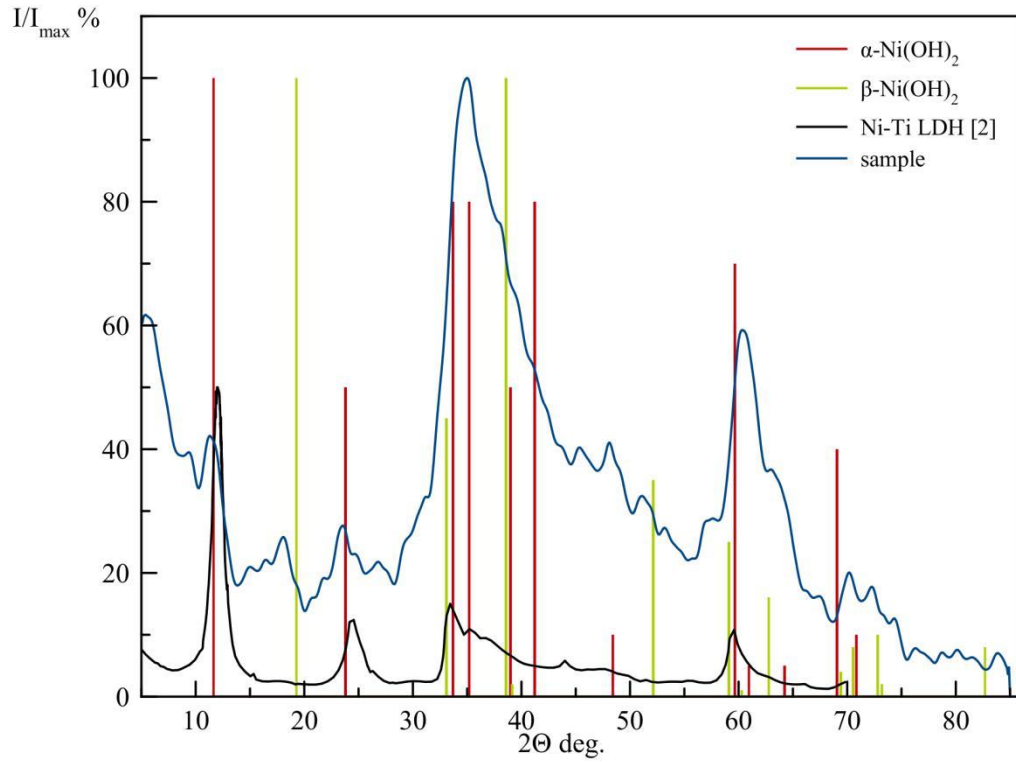


Figure 1. XRD pattern for Ni-Ti-THT.

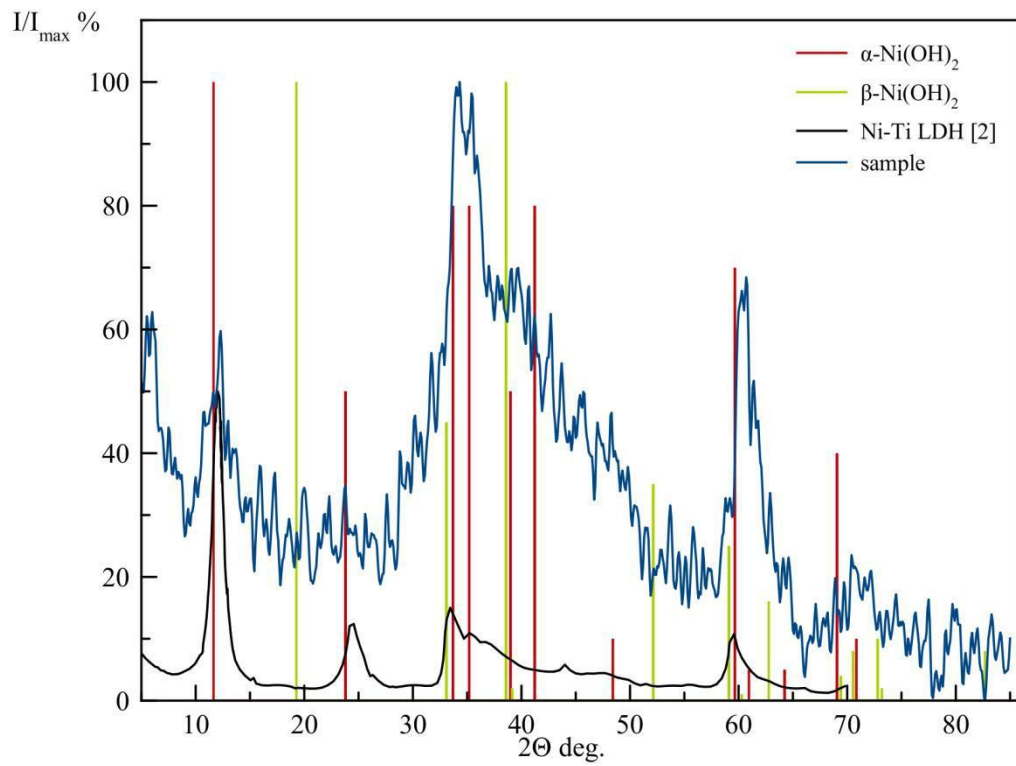


Figure 2. XRD pattern for Ni-Ti-T.

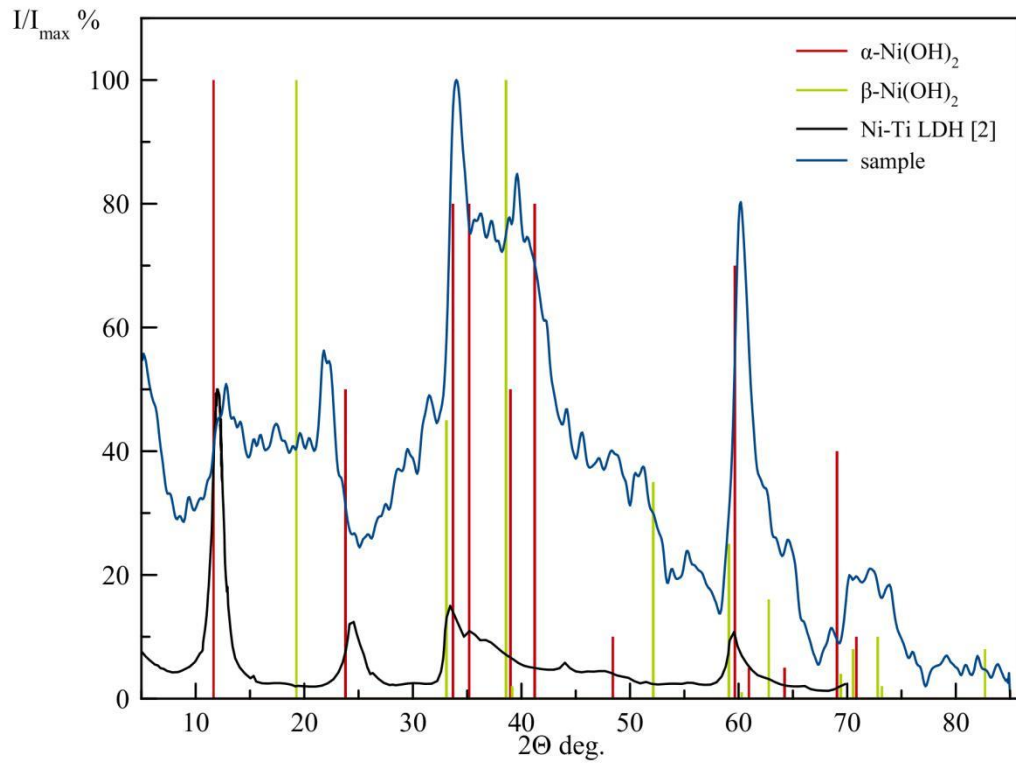


Figure 3. XRD pattern for Ni-Ti-HSHT.

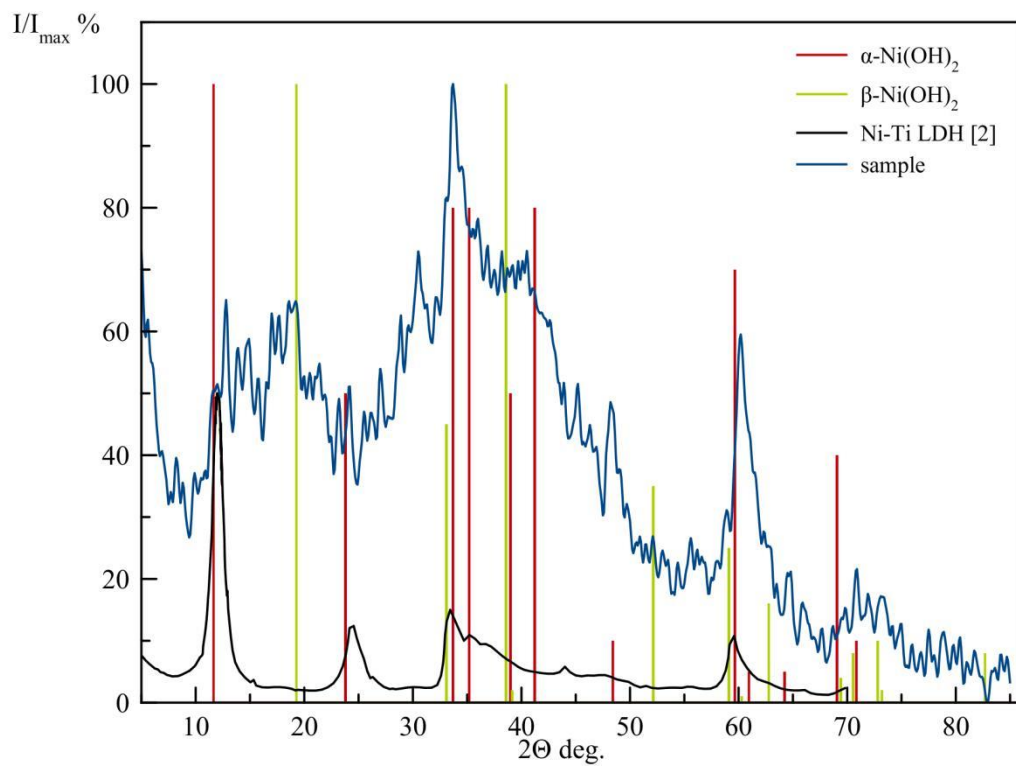


Figure 4. XRD pattern for Ni-Ti-HS.

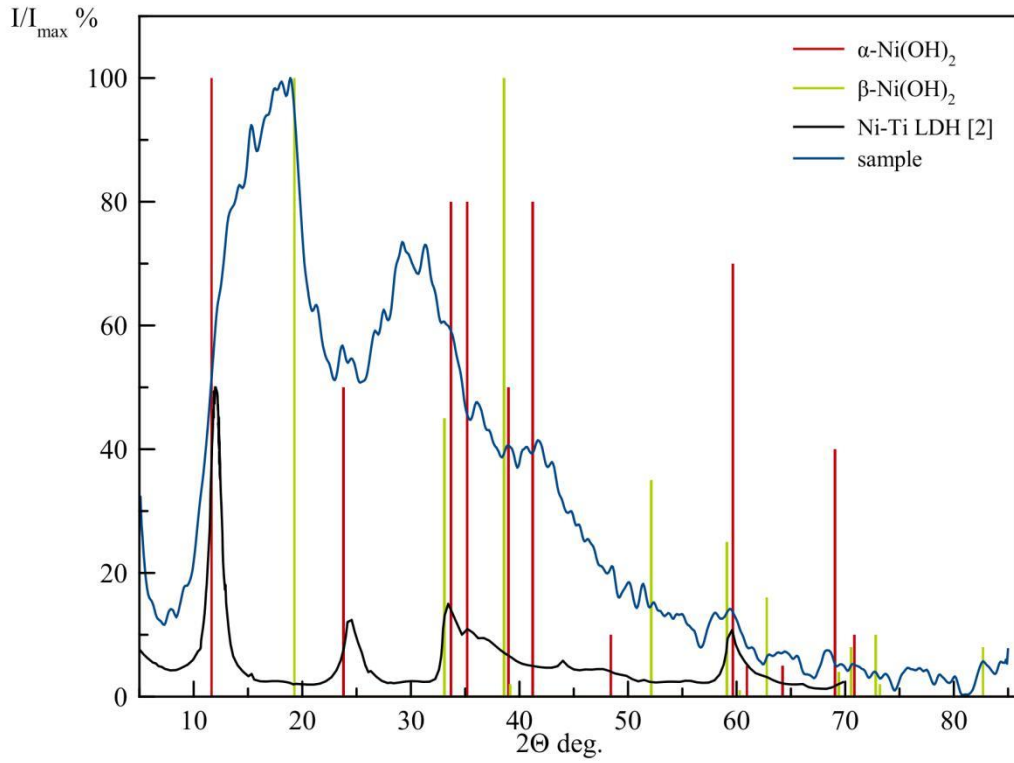


Figure 5. XRD pattern for Ni-Ti-HP70.

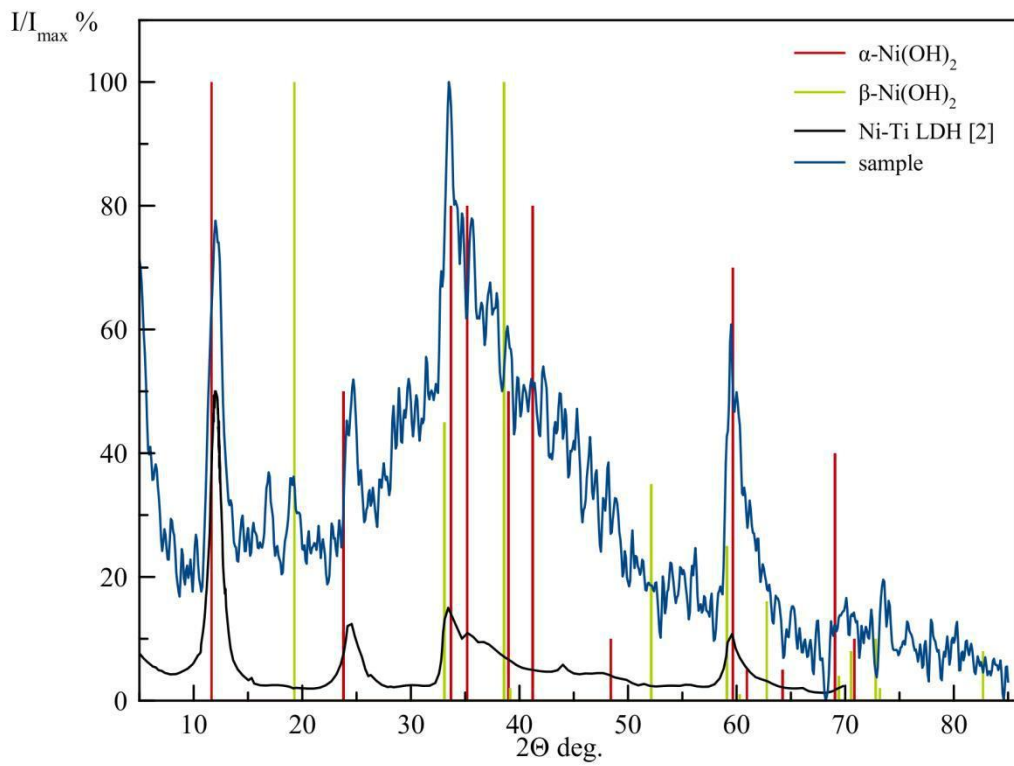


Figure 6. XRD pattern for Ni-Ti-HP80.

Formation of this complex reduces the precipitation rate of Ni^{2+} from solution, thus interfering with the formation of LDH structure and leading to precipitation of $\beta\text{-Ni(OH)}_2$, as a separate phase:



Sample Ni-Ti-HP80, in comparison to Ni-Ti-HP70, shows less intense peaks of $\beta\text{-Ni(OH)}_2$ phase, implying lesser content of it. This can be explained by higher rate of urea hydrolysis at elevated temperatures. Higher hydrolysis rate leads to more rapid pH increase, leading to higher rate of precipitation, reducing effect of ammonia on precipitation process.

In both cases of homogeneous coprecipitation the full precipitation of nickel was not achieved. This was concluded based on blue-green color of filtered solution. This indicates that temperatures employed (70 and 80°C) and or time (5h.) were not sufficient for complete precipitation.

For samples prepared by titration and at high supersaturation (Fig. 1-4), the synthesis temperature and hydrothermal treatment do not show significant effect on phase composition. However hydrothermally treated samples (Fig. 1 and 3) show better crystallinity than untreated (Fig. 2 and 4) ones.

4.2 TGA and DSC

Figures 7-12 show TG-DSC curves for prepared samples. It can be seen that for samples prepared by titration and at high supersaturation the thermal decomposition occurs in two stages: 1) endothermic (50-200°C, slow weight loss) – loss of adsorbed and interlayer water; 2 – endothermic (260-350°C, rapid weight loss) – loss of interlayer anions and transformation of layered double hydroxide into layered double oxide (LDO).

It should be noted that samples Ni-Ti-THT and Ni-Ti-T, start their transformation into LDO at higher temperatures (280,43 and 270,78°C), than samples Ni-Ti-HSHT and Ni-Ti-HS(267,12 and 261,4°C). This can be explained by difference in morphology.

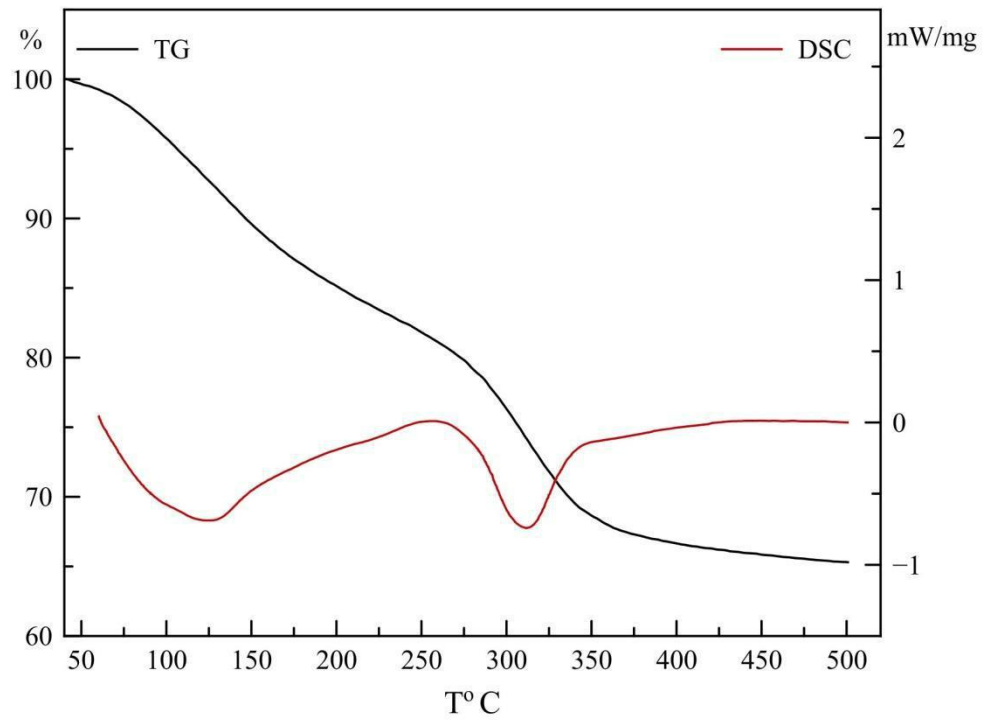


Figure 7. TG-DSC curves for Ni-Ti-THT.

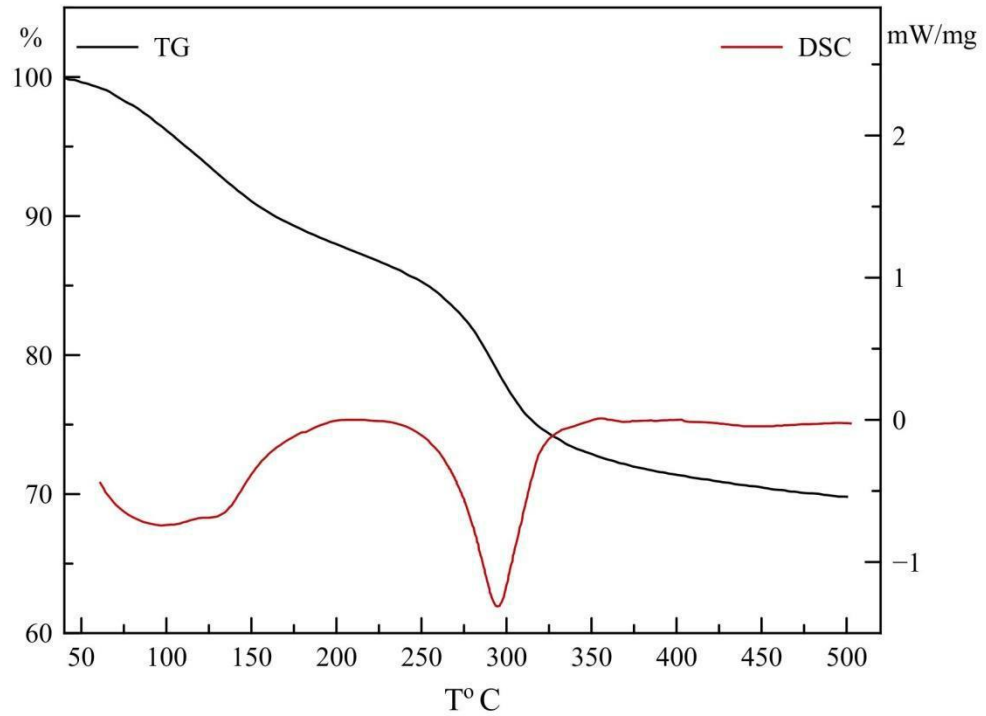


Figure 8. TG-DSC curves for Ni-Ti-T.

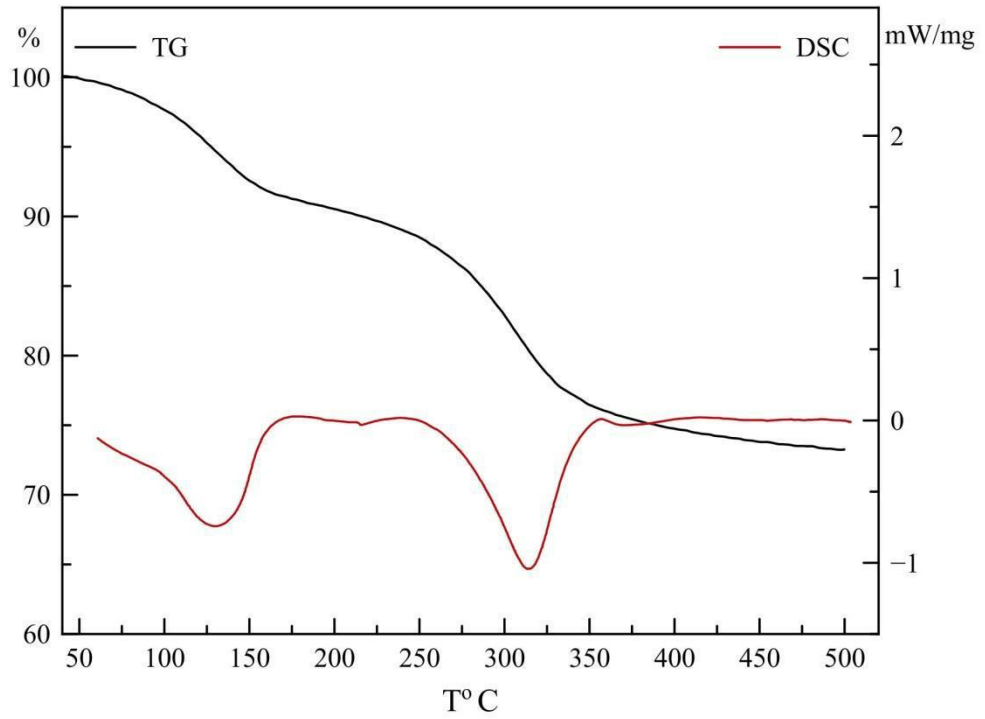


Figure 9. TG-DSC curves for Ni-Ti-HSHT.

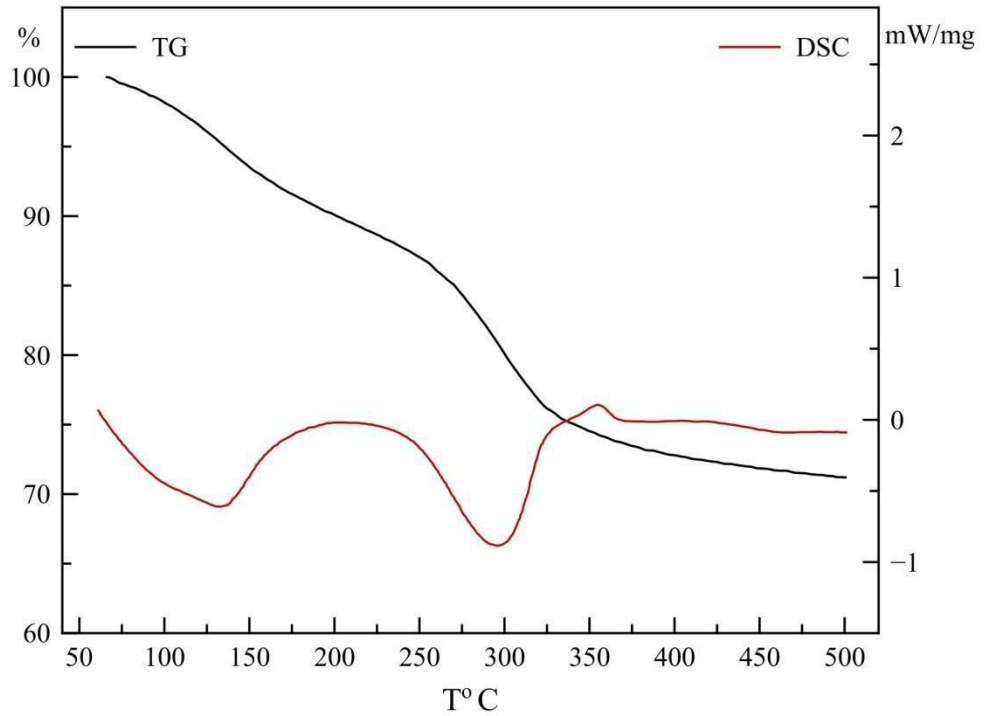


Figure 10. TG-DSC curves for Ni-Ti-HS.

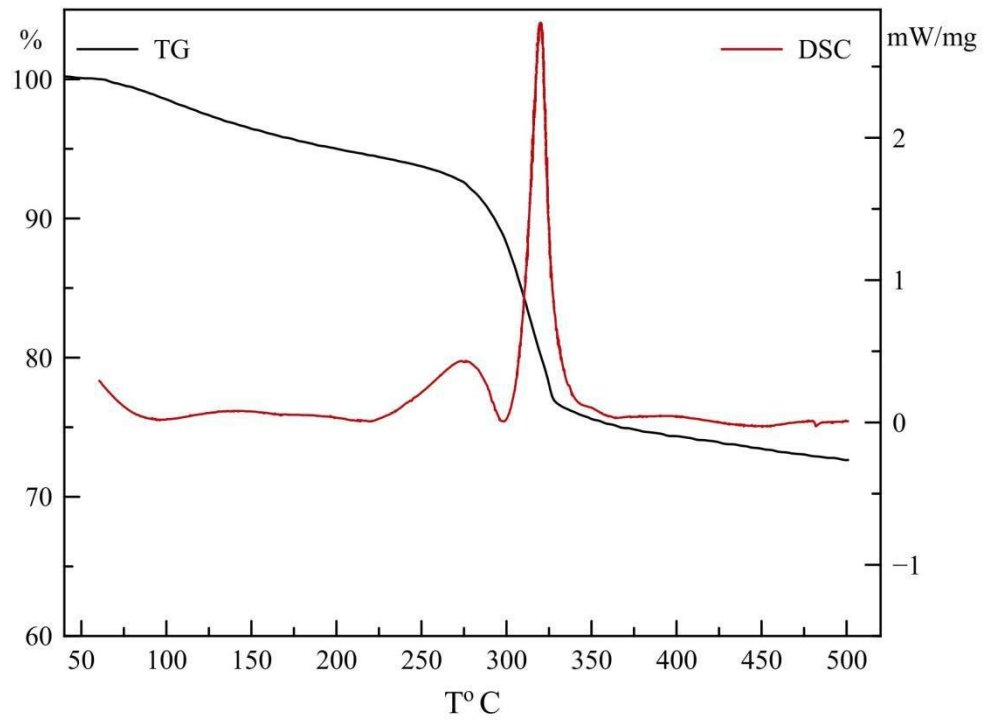


Figure 11. TG-DSC curves for Ni-Ti-HP70.

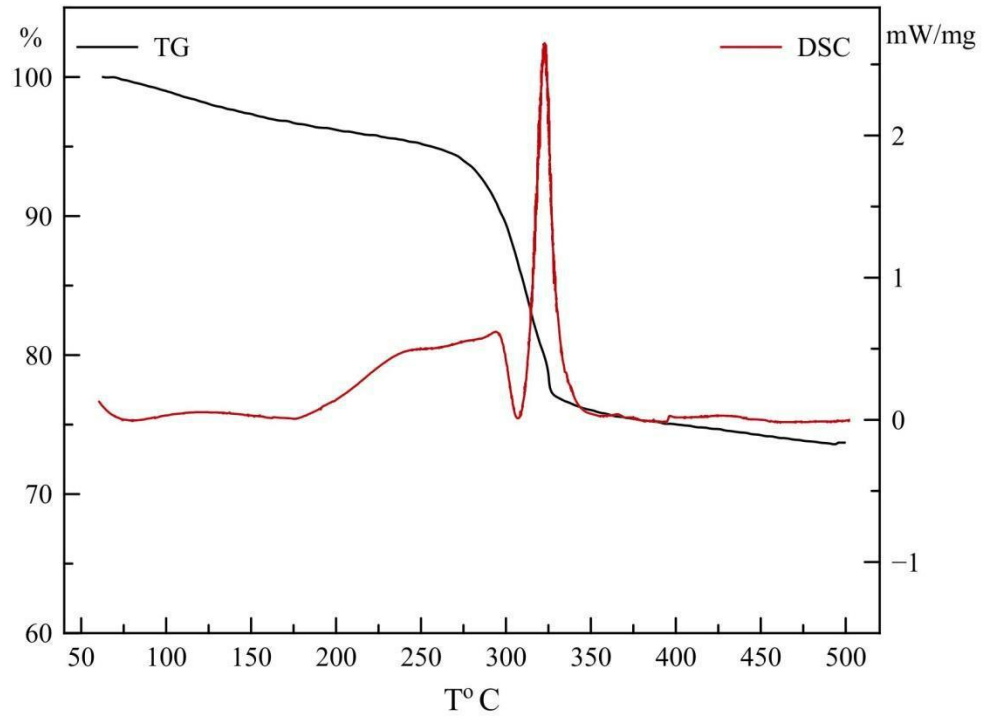


Figure 12. TG-DSC curves for Ni-Ti-HP80.

DSC curves for samples Ni-Ti-HP70 and Ni-Ti-HP80 (Fig. 11, 12), do not show any endothermic effects that correspond to loss of water. These samples also show two strong exothermic effects in 180-350°C range. According TG curve, a rapid weight loss occurs in this region, indicating transformation of LDH into LDO, in same manner as for other samples. As can be seen from DSC curves of other samples, the transformation of LDH into LDO is an endothermic process, indicating that for HP samples in this temperature region an endothermic effect competes with an exothermic one.

In literature(Shu, 2006), such behavior was described as a combustion of cyanate, that formed during urea hydrolysis (2) and was incorporated into the LDH structure. However it is rather doubtful that a simple combustion would have affected both endothermic process. If cyanate just combusted it most likely have affected either one of two peaks or causes a separate exothermic peak to appear.

Based on data for urea pyrolysis (Shaber, 2004), in the temperature of 80-280°C there are some exothermic transformation of cyanate occur, obscuring endothermic effect from water loss, followed by their combustion of formed products during transformation of LDH into LDO at temperature above 290°C.

5. CONCLUSIONS

1. Six samples were obtained by precipitation from solution containing Ni²⁺ and Ti⁴⁺ with Ni:Ti=5 ratio, using three types of coprecipitation methods.

2. Based on results from XRD analysis, it was established that all prepared samples consist of two phases: Ni-Ti LDH and β-Ni(OH)₂.

3. For samples prepared by titration and coprecipitation at high supersaturation, the elevated temperature and hydrothermal treatment do not have significant effect on phase composition and formation of LDH structure, but they do affect crystallinity and thermal stability.

4. Full precipitation of Ni²⁺ from solution was not achieved at employed temperatures and synthesis time during homogeneous coprecipitation.

5. Increasing temperature from 70 to 80°C for homogeneous coprecipitation lead to formation of precipitate with lesser content of β-Ni(OH)₂.

6. REFERENCES

Azuma S. et al. (2014) "Preparation of layered double hydroxide and its graphene composite films as electrodes for photoelectrochemical cells". Key Engineering Materials, Vol. 616 129-133.

Bendert R. M.; D. A. Corrign (1989) "Effect of Coprecipitated Metal Ions on the Electrochromic Properties of Nickel Hydroxide "J. Electrochem. Soc., Vol. 136, No. 5, 1369-1374.

Carpenter M.K. et al. (1987) "THE ELECTROCHROMIC PROPERTIES OF HYDROUS NICKEL OXIDE". Solar Energy Materials 16 333-346.

Cavani F.; F.Trifiro, A. Vaccari (1991) "HYDROTALCITE-TYPE ANIONIC CLAYS: PREPARATION, PROPERTIES AND APPLICATIONS". Catalysis Today,11 173-301.

Chen et al. (2010) "HNCO hydrolysis performance in urea-water solution thermolysis process with and without catalysts". J Zhejiang Univ-Sci A (Appl Phys & Eng), 11(11):849-856.

- Ciocan C.E. et al.** (2012) "Visible-Light-Induced Photocatalyst Based on Nickel Titanate Nanoparticles". *Catalysis Today*, 198 239–245.
- Fleischmann M., K.; Korinek, D. Pletcher** (1971) "THE OXIDATION OF ORGANIC COMPOUNDS AT A NICKEL ANODE IN ALKALINE SOLUTION". *J. Electroanal. Chem.*, 31 39-49.
- Gao Z. et al.**(2011) "Adsorption of Pentachlorophenol from Aqueous Solution on Dodecylbenzenesulfonate Modified Nickel-Titanium Layered Double Hydroxide nanocomposites". *Ind. Eng. Chem. Res.*, 50, 5334 – 5345.
- Gu Y. et al.**(2013) "NiTi layered double hydroxide thin films for advanced pseudocapacitor electrodes" *J. Mater. Chem. A*, 1, 10655-10661.
- Hansen H. C.; B., C. B. Koch** (1994) "SYNTHESIS AND PROPERTIES OF HEXACYANOFERRATE INTERLAYERED IN HYDROTALCITE. I. HEXACYANOFERRATE(II)". *Clays and Clay Minerals*, Vol. 42, No. 2, 170-179.
- He J. et al.** (2006) "Preparation of Layered Double Hydroxides". *Struct Bond*, 119: 89–119.
- He J. et al.** (2010) "On the Nature of Ti(IV)-Pillared Layered Metal Hydroxides Prepared from Green, Water-Soluble Ti-Peroxide". *AIChE Journal*, Vol. 56, No. 5, May 1352-1362.
- Hu C. et.al** (1998) "Oxidative catalysis of Keggin anion $[XW_{11}O_{39}Z(H_2O)]^{12-}$ pillared clays in reaction of acetaldehyde with H_2O_2 ". *Applied Clay Science*, 13 495–511.
- Huang W. et al.** (2005) "Oscillatory electrocatalytic oxidation of methanol on an Ni(OH)₂ film electrode". *J Solid State Electrochem*, 9: 284–289.
- Jayashree R. S.; P. Vishnu Kamath, G. N. Subbanna** "The Effect of Crystallinity on the Reversible Discharge Capacity of Nickel Hydroxide". (2000) *Journal of The Electrochemical Society*, 147 (6) 2029-2032.
- Kim M.S.; T.S Hwang, K.B. Kim** (1997) "A Study of the Electrochemical Redox Behavior of Electrochemically Precipitated Using Electrochemical Quartz Crystal Microbalance". *J. Electrochem. Soc.*, Vol. 144, No. 5, 1537-1542.
- Kulyukhin S.A.; E.P. Krasavina, I.A. Rumer** (2015) "Sorption of Solutions onto Layered Double Hydroxides Containing the $Fe(CN)_6^{4-}$ Space" *Radiochemistry*, Vol. 57, No. 1, 69–72.
- Lee Y. et al. (2011) "Titanium-embedded layered double hydroxides as highly efficient water oxidation photocatalysts under visible light" *Energy Environ. Sci.*, 4, 914–920.
- Min S. et al. (2014) "One-pot hydrothermal synthesis of reduced graphene oxide/Ni(OH)₂ film on nickel foam for high performance supercapacitors" *Electrochimica Acta* 115 155–164.
- Mondal D., G. Villemure (2012) "Improved reversibility of color changes in electrochromic Ni–Al layered double hydroxide films in presence of electroactive anions" *Journal of Electroanalytical Chemistry* 687 58–63.
- Saber O. (2007) "Preparation and characterization of a new nano layered material, Co-Zr LDH" *J. Mater. Sci.* 42:9905–9912.
- Saber O., H.Tagaya (2005) "PREPARATION OF NEW LAYERED DOUBLE HYDROXIDE, Co-V Ldh" *Rev. Adv. Mater. Sci.* 10 59-63.
- Schaber P.M. et al. (2004) "Thermal decomposition (pyrolysis) of urea in an open reaction vessel" *Thermochemica Acta* 424 131–142.
- Sels B. et al. (1999) "Layered double hydroxides exchanged with tungstate as biomimetic catalysts for mild oxidative bromination" *NATURE* Vol 400, 26, AUGUST 856-857.

- Shu X. et al. (2006) "Formation of Ni-Ti-layered double hydroxides using homogeneous precipitation method" *Solid State Sciences* 8 634-639.
- Shu X., J. He, D. Chen (2008) "Tailoring of Phase Composition and Photoresponsive Properties of Ti-Containing Nanocomposites from Layered Precursor" *J. Phys. Chem. C*, 112, 4151-4158.
- Shu X., J. He, D. Chen (2008) "Visible-Light-Induced Photocatalyst Based on Nickel Titanate Nanoparticles" *Ind. Eng. Chem. Res.*, 47, 4750–4753.
- Wang Y. et al. (2011) "Electrocatalytic oxidation of methanol at Ni–Al layered double hydroxide film modified electrode in alkaline medium" *Electrochimica Acta* 56 5754–5758.
- Zhang W.H. et al. (2008) "Preparation of Ni(II)/Ti(IV) layered double hydroxide at high supersaturation" *Journal of the European Ceramic Society* 28 1623–1629.
- Zhao Y. et al. (2014) "Highly Dispersed TiO₆ Units in a Layered Double Hydroxide for Water Splitting" *Chem. Sci.*, 5, 951-958.
- Zhao Y. et al. (2012) "NiTi-Layered double hydroxides nanosheets as efficient photocatalysts for oxygen evolution from water using visible light" *Chem. Eur. J.*, 18, 11949–11958.

Amplificación de señales de piridina a través de la técnica SERS con un soporte Sílica-Titania-plata.

Héctor Andrés Martínez Máñez⁽¹⁾ y Dr. Simón Yobanny Reyes López⁽¹⁾

(1) Universidad Autónoma de ciudad Juárez, Ciudad Juárez, Chihuahua, México

Resumen

En la actualidad la técnica de SERS continúa siendo un campo en desarrollo, enfocado principalmente al desarrollo de soportes para la detección de analitos en concentraciones traza. Por lo que se propone el desarrollo de un soporte cerámico a partir del acoplamiento de la técnica sol-gel a la técnica de electrohilado dopado con plata a través de un tratamiento electrolítico para ser evaluado como amplificador de señales. Mediante espectroscopia infrarroja fue posible seguir la evolución del proceso sol-gel dentro material donde se logró observar la transición de anatasa a rutilo de la titania a 800°C y la pérdida de grupos hidroxilos de la superficie entre los 500°C y 800°C. La presencia de las formas cristalinas (anatasa y rutilo) de la titania fue analizada mediante difracción de rayos X. Utilizando piridina como molécula de estudio a una concentración 1×10^{-9} se determinó que el soporte logro amplificar la señal de los modos de vibración *8a*, *8b*, y *15* fueron amplificados en 3 órdenes de magnitud con lo que se concluyó que el soporte Sílica-Titania-Plata cumple con el propósito de ser un soporte amplificador de señales en espectroscopia Raman

Palabras Clave: Electrohilado, Sol-Gel, SERS.

Abstract

Nowadays the SERS area is still in development, mainly focused in the development of scaffolds for the detection of trace analytes. This work presents a new technique for the making of a ceramic scaffold by electrospinning. Through infrared spectroscopy it was possible to evaluate the thermal evolution of the sol-gel process. The Titania phase transformation was observed around 800°C and the hydroxyl group loss was detected between 500-800°C. The presence of two Titania phases, anatase and rutile were analyzed with DRX. Using Pyridine (1nM) as probe molecule the SERS effect of the scaffold was evaluated and it was determined that the vibration modes *8a*, *8b*, and *15* were the most amplified signals with a 3 orders of magnitude factor. With this it was concluded that the Silica-Titania-Silver Scaffold is a feasible as a SERS enhancer.

Keywords: Electrospinning, Sol-Gel, SERS.

Amplificación de señales de piridina a través de la técnica SERS con un soporte Sílica-Titania-plata.

Introducción

A partir de la década de 1940 la industria farmacéutica ha experimentado un gran desarrollo acelerado por la constante demanda de medicamentos. La industrialización farmacéutica ha generado un aumento en la contaminación de efluentes a causa de los desechos liberados sin un tratamiento previo (Kumar *et al*, 2004). Hoy en día existe la necesidad de monitorear los residuos farmacéuticos; pues se ha demostrado que exposiciones prolongadas han generado bacterias multi-resistentes (Akmehmet y Otker, 2003). Para controlar la calidad de los efluentes farmacéuticos actualmente se utilizan sistemas de cromatografía líquida de alta resolución (HPLC) (Aga, 2007). Sin embargo HPLC es una técnica costosa que actualmente está siendo desplazada por técnicas espectroscópicas de menor costo como la espectroscopia Raman amplificada en superficie o *SERS* (Gajaraj *et al*, 2013).

La espectroscopia Raman centra su estudio en el análisis de colisiones inelásticas de la radiación electromagnética con la materia y la polarización que se genera dentro de las moléculas, especialmente en moléculas simétricas (Larkin, 2011). A pesar de que la espectroscopia Raman es una técnica versátil posee limitantes ya que puede llegar a ocasionar fotodegradación de las muestras analizadas o la sensibilidad al ruido ambiental (Gajaraj *et al*, 2013). Sin embargo, estas limitantes se han superado gracias al desarrollo de la técnica de espectroscopia Raman amplificada en superficie, descubierta en 1974 por Fleischmann y colaboradores al hacer pasar corriente sobre un cátodo de plata corroído sobre el que se analizaba piridina (Fleischmann *et al*, 1978).

El principio de la amplificación *SERS* es utilizar la nube electrónica superficial de nanoestructuras metálicas un medio capaz de polarizarse y liberar energía para dar lugar al efecto de amplificación. Para explicar la amplificación generada por las nanoestructuras metálicas se ha propuesto dos teorías complementarias donde el analito recibe la energía dispersada del plasmón de resonancia superficial y una vez que sucede el efecto Raman la energía dispersada se reintegra al plasmón de resonancia superficial donde es amplificado (Moskovits, 1985). La segunda teoría propone que debe existir un enlace entre la superficie metálica y el analito para que ocurra la transferencia de energía del plasmón (Ordal *et al*, 1982).

Sin embargo se ha demostrado experimentalmente que ambas teorías pueden suceder de manera simultánea por lo que la investigación se enfoca en el desarrollo de soportes dopados con nanoestructuras metálicas que permitan la detección de analitos con mayor sensibilidad (McNay *et al*, 2011; Kneipp *et al*, 1999). En la actualidad con la técnica de *SERS* se han logrado obtener factores de amplificación de hasta 10^6 por lo que se ha empezado a utilizar para la evaluación de analitos a nivel traza, secuenciación de ácidos nucleicos (Smith y Dent, 2005), análisis de proteínas y cuantificación en sistemas biológicos utilizando marcadores sensibles para la técnica de *SERS* (Kneipp *et al*, 1999).

Este trabajo propone el desarrollo de un soporte para *SERS* base Silica-Titania dopado con plata para la detección de piridina en medio acuoso. Se ha elegido la piridina por su

estructura heterocíclica y que es utilizada como un precursor de importancia en la industria farmacéutica. Se propone que el soporte sea obtenido a través del acoplamiento de la técnica de sol-gel al proceso de electrohilado para posteriormente ser dopado a través de un tratamiento electrolítico.

Materiales y Métodos

A partir de los precursores metalorgánicos Tetraetilortosilicato (TEOS) y Tetraisorpxido de titanito (TTIP) se obtuvieron los sol-geles precursores mezclando relaciones molares de alcóxido, solvente, agua y ácido catalizador en las siguientes proporciones: 1:2:2:0.1 (TEOS: Etanol: Agua; HCl) y 1:10.68:0:10.2 (TTIP: Etanol: Agua: Ácido acético). Cada solución fue mezclada en relación 1:10 P/P con una solución de polivinilpirrolidona (PVP) al 10% en etanol y mezcladas hasta alcanzar la homogeneidad. Posteriormente se realizó el electrohilado de las soluciones utilizando un inyector coaxial.

Las fibras electrohiladas fueron sometidas a un tratamiento térmico progresivo con etapas de calentamiento de 2 horas a 200°C, 500°C, 600°C y 800°C. La evolución térmica del material analizada mediante espectroscopia infrarroja y análisis térmogravimétricos. La morfología de las fibras fue analizada mediante microscopia electrónica de barrido y la composición fue analizada mediante difracción de rayos X y mediante espectroscopia de energía dispersiva de rayos X (EDS).

Las fibras calcinadas fueron fijadas a la superficie de un vidrio ITO y sometidas a 10 minutos de tratamiento en una celda electrolítica con un cátodo de plata pura y un medio 10mM de nitrato de plata en agua a 60°C. Posterior a la electrodeposición se depositaron 10µl de piridina 1nM y se dejó secar al aire para posteriormente ser sometida a la espectroscopia Raman. Las mediciones Raman se obtuvieron utilizando un láser de 532nm y un tiempo de integración de 10 segundos.

Resultados y discusión

En la figura 1a y 1b se muestran las fibras obtenidas a través del proceso de electrohilado previo al tratamiento térmico, se puede observar que las fibras poseen diámetros diversos y no poseen irregularidades considerables en su morfología. En la figura 1c y 1d se muestra la fibra posterior al tratamiento térmico a 800°C con lo que se confirma que la morfología fibrilar se mantiene a pesar del tratamiento térmico. Además se observa una reducción de diámetro de las fibras relacionado directamente relacionado con la transición de fibras de composición principalmente polimérica (orgánico) a fibras totalmente cerámicas (inorgánico).

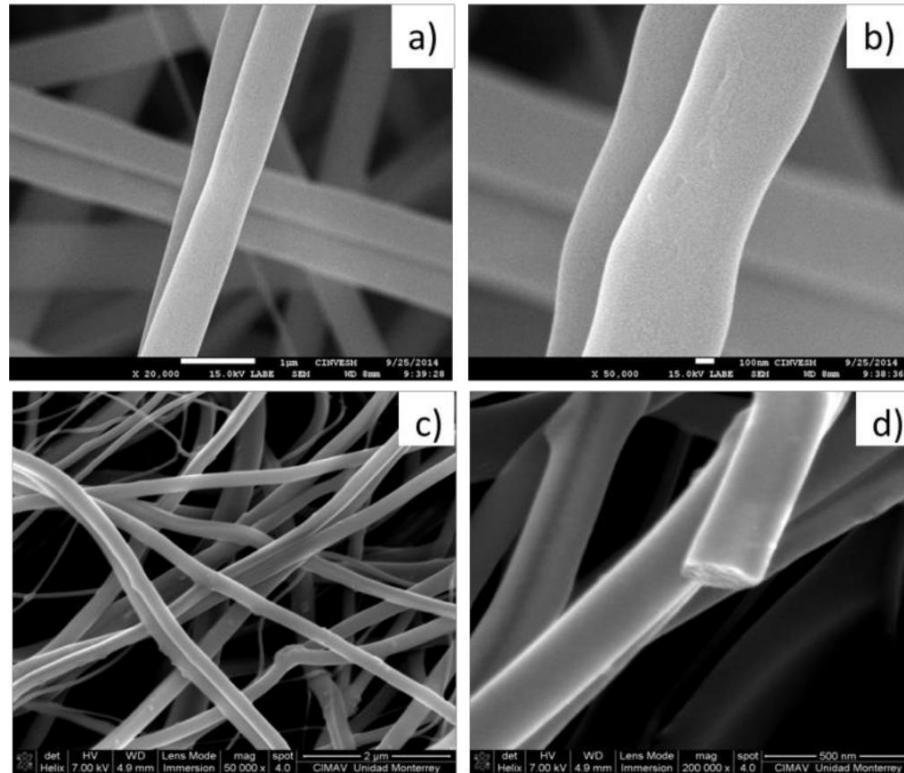


Figura 1.- Fibras obtenidas a través del proceso de electrohilado antes del tratamiento térmico (a y b) y después (c y d).

La evolución térmica del material fue seguida mediante análisis termogravimétricos (figura 2) y espectroscopia infrarroja (figura 3). El análisis termogravimétrico (figura 2a) muestra que el material presenta una pérdida inicial de peso alrededor de los 60°C correspondientes a la pérdida de isopropanol y agua del material. También se observa una segunda pérdida de peso equivalente al 60 % a los 450°C (segundo pico de inflexión) correspondiente al material orgánico presente el polímero utilizado y en los precursores metalorgánicos. A partir de 500°C hasta 1300°C se observa una pérdida de peso del 10% correspondiente a la pérdida de grupos hidroxilos de la superficie del material, que se encuentra relacionado con el proceso de densificación del material (Hench y West, 1990).

En la gráfica correspondiente a CDB (figura 2b) se puede observar que el material presenta un pico endotérmico en los rangos correspondientes a la pérdida de humedad y solventes a los 76°C, dos picos exotérmicos correspondientes a la descomposición inicial de los enlaces Metal-OH (135°C) (Liu *et al*, 2000) y a la transición vítrea del PVP a los 174°C (Feldstein *et al*, 2003). A 430°C se puede observar un pico endotérmico correspondiente a la degradación de la materia orgánica del PVP y las cadenas orgánicas de los precursores metalorgánicos que van de acuerdo a lo reportado previamente por Hench y West (1990).

En el análisis DSC del material también es posible observar otros dos picos exotérmicos entre los 500°C y 560°C que corresponden a la reducción de los grupos silanol (Si-OH) que aún se encuentran presentes en la superficie (Hench y West, 1990). A 700°C se puede observar un pico endotérmico correspondiente a la transición de fase entre la forma anatasa

y rutilo de la Titania (Chao, 2002), Seguido de un pico exotérmico a los 840°C correspondiente a la eliminación final de grupos hidroxilos de la red y la densificación de la red cerámica. Finalmente se observa un pico endotérmico a los 950°C, temperatura a la que se ha reportado la fusión de materiales a base de Sílica (Seco *et al*, 2000)

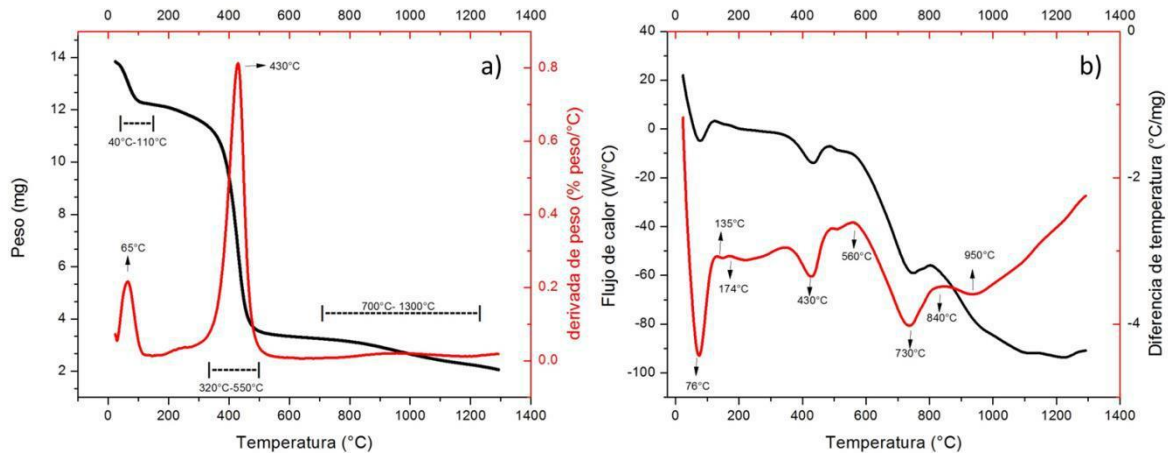


Figura 2.- Gráfica de análisis termogravimétrico y calorimetría diferencial de barrido (b).

En la figura 3a se muestra el espectro ampliado del compuesto desde 23°C hasta 500°C. El espectro infrarrojo muestra de manera inicial bandas correspondientes a las vibraciones del PVP como la presencia de vibraciones de estiramiento de grupos hidroxilo en 3100cm^{-1} , seguido de la banda correspondiente al estiramiento del enlace C-H a 2900cm^{-1} y 1650cm^{-1} . Dentro de la zona de la huella dactilar podemos observar la presencia de la vibración de estiramiento del enlace C=O en los 1655cm^{-1} . A los 1441cm^{-1} , 1415cm^{-1} y 1379cm^{-1} se puede observar bandas que se encuentran relacionadas con las vibraciones de tijereteo de los grupos metilo. Además se observan una banda correspondiente a la vibración del enlace C-N en 1291cm^{-1} (Moharram y Khafagi, 2007). A 200°C se puede observar que en el espectro infrarrojo existe una disminución en la intensidad de la banda correspondiente a C=O y una desaparición casi total de las bandas correspondientes a C-H a causa de la descomposición inicial del polímero que ocurre a los 180°C (Du *et al*, 2006).

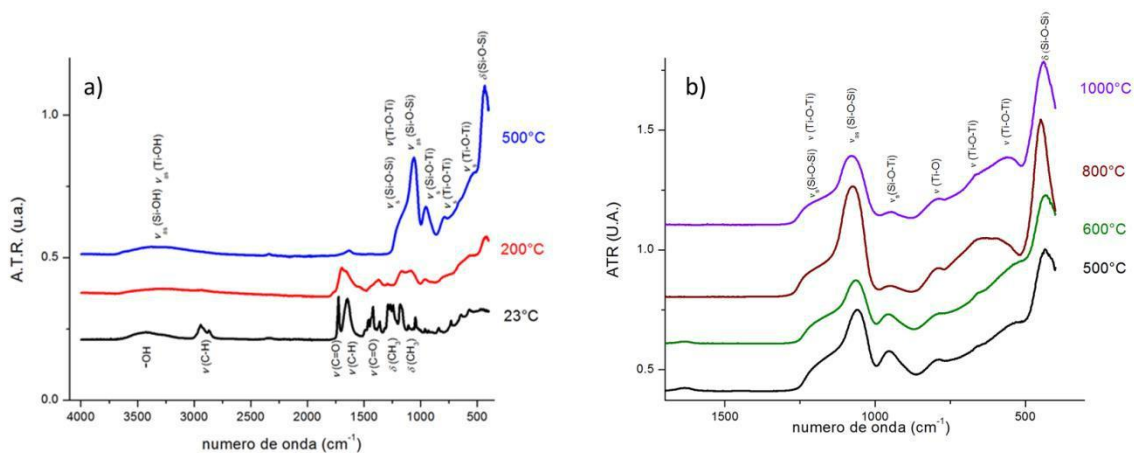


Figura 3.- Espectro infrarrojo del material a través del tratamiento térmico.

En la figura 3b se observa que a partir de los 500°C comienzan a emerger bandas características de la Sílica y Titania. A 500°C se observan las vibraciones de los enlaces Si-O que se presentan en sus modos de vibración de estiramiento simétrico (1220cm^{-1} y 800cm^{-1}), estiramiento asimétrico (1080cm^{-1}) y Tijereteo (460cm^{-1}) (Choi *et al*, 2004). La titania presenta vibraciones de los enlaces Ti-O (1080cm^{-1} y 880cm^{-1}), y distintas vibraciones de estiramiento simétrico del enlace Ti-O-Ti entre los 410cm^{-1} - 760cm^{-1} sin embargo a 500°C (Leite *et al*, 2011). Durante el tratamiento térmico también es posible observar la formación de enlaces de tipo Si-O-Ti por la aparición su una banda a 940cm^{-1} (Seco *et al*, 2000).

Además a 500°C se presentan bandas de menor intensidad en 3500cm^{-1} y 950cm^{-1} pertenecientes a vibraciones de los enlaces Si-OH y Ti-OH, las bandas se presentan similares a 600°C, Sin embargo, al alcanzar los 800°C existen dos cambios de importancia en el espectro infrarrojo, el primero de ellos es la desaparición de las bandas correspondientes a los enlaces Si-OH y Ti-OH en 3500cm^{-1} y 950cm^{-1} lo que indica que el material ha alcanzado la estabilidad química (Hench y West, 1990). Además se observa que las bandas correspondientes a Ti-O y Si-O en 1080cm^{-1} son de mayor intensidad que en el resto de las temperaturas analizadas El aumento de intensidad de la banda en 1080cm^{-1} se encuentra relacionado con la longitud de las cadenas de Si-O-Si o Ti-O-Ti (Choi *et al*, 2004).

En la figura 4 se muestra el soporte a través del tratamiento electrolítico para la deposición de plata. Después de 1 minuto de tratamiento se observó la deposición de nanopartículas con un diámetro promedio de 33nm, después de dos minutos se observó la aparición de estructuras aisladas de tipo dendritas, la densidad de las dendritas sobre las fibras aumento de manera continua con el tiempo de electrodeposición en la celda electrolítica hasta alcanzar una saturación casi total después de 10 minutos dentro de la celda.

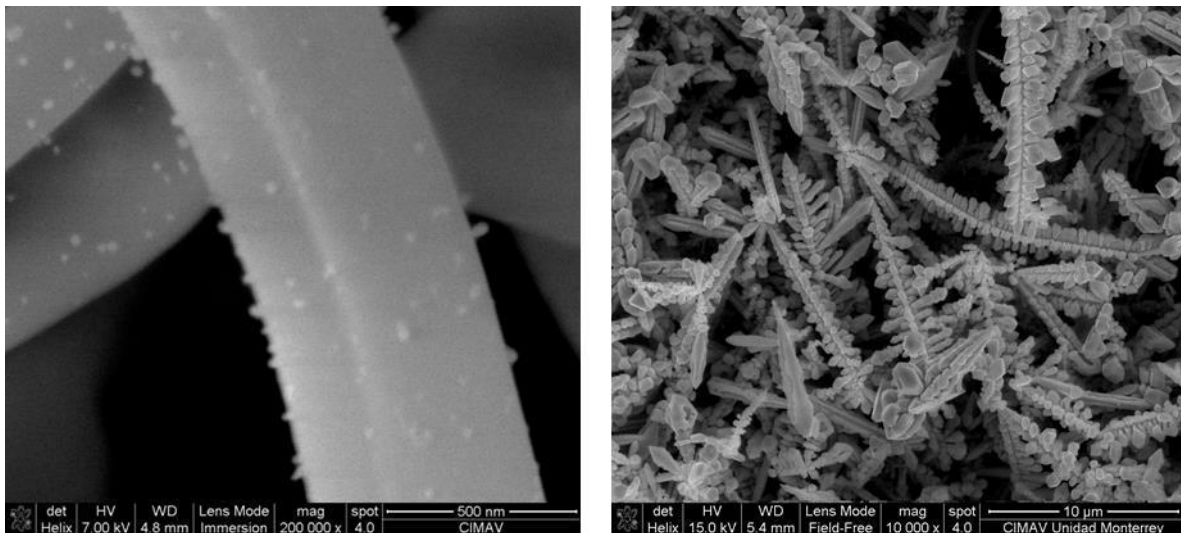


Figura 4.- Micrografías de MEB del soporte cerámico después de 1 minutos en la celda electrolítica (izq.) y 10 minutos (der.).

Finalmente el soporte dopado con dendritas de plata fue sometido a la prueba de amplificación es espectroscopia Raman utilizando piridina como molécula de estudio. En la figura 5 se muestra es espectro obtenido sobre el soporte fabricado y el espectro obtenido

sobre una laminilla de vidrio. Las vibraciones correspondientes a la piridina son estudiadas utilizando los modos normales de vibración del benceno por su similitud estructural, los modos de vibraciones se muestran en la Tabla 1 (Corrsin *et al*, 1953; Kline y Turkevich, 1944). En el espectro no amplificado es posible observar vibraciones a partir correspondientes a los modos de vibración *16a* en los 419cm^{-1} , *10a* a 730cm^{-1} , *18b* en 1306cm^{-1} , *19b* y *19a* en los 1446cm^{-1} y 1478cm^{-1} respectivamente. Finalmente se identificaron los modos de vibración *8a* y *8b* a 1593cm^{-1} y 1625cm^{-1} (Kline y Turkevich, 1944).

En el espectro obtenido sobre el soporte Sílica-Titania dopado con plata se observa la presencia de un mayor número de bandas activas y de mayor intensidad a causa del efecto SERS del soporte. En el espectro Raman es posible apreciar la aparición de una banda de intensidad media a los 244cm^{-1} ; la aparición de esta nueva vibración se encuentra relacionada a la distribución de la piridina sobre la superficie de las estructuras de plata y la interacción del par de electrones libres del nitrógeno con la superficie metálica de las estructuras (Bindhu *et al*, 2015).

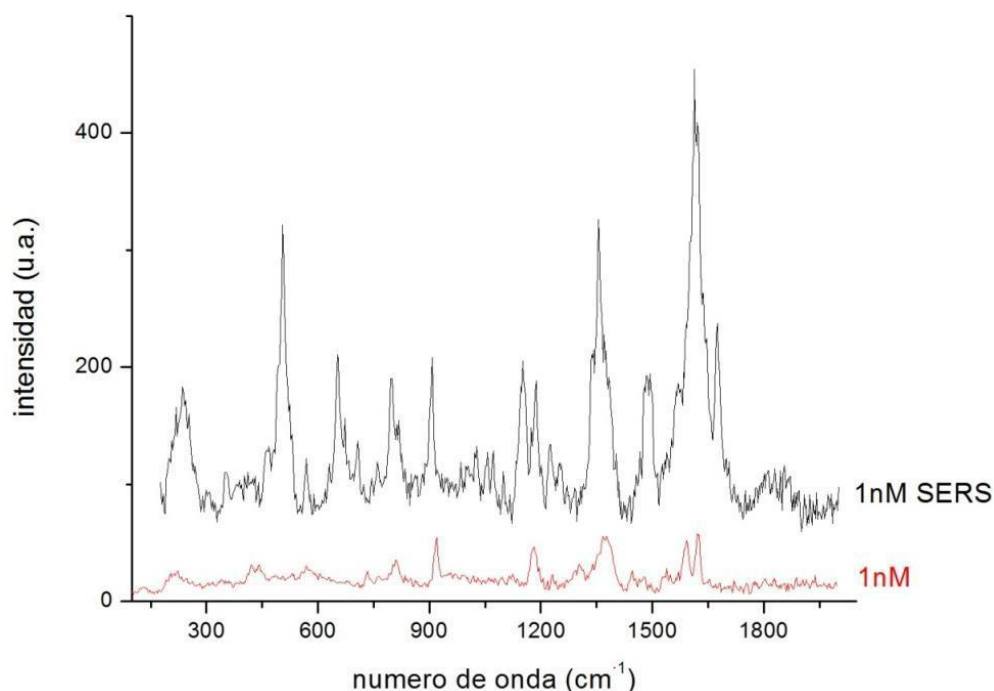


Figura 5.- Espectro obtenido de la piridina 1nM el soporte SERS (espectro negro) y sin el soporte (espectro rojo).

En el espectro fue posible observar vibraciones correspondientes a los modos de vibración *16a* y *16b* a los 356cm^{-1} , *6a* y *6b* en 652cm^{-1} y el modo *10b* en 708cm^{-1} y 760cm^{-1} . Las vibraciones relacionadas con los modos *17a* y *17b* fueron observadas a 984cm^{-1} y 1072cm^{-1} ; la banda observada a 1226cm^{-1} corresponde al modo de vibración 9 en sus modos *a* y *b* mientras que la banda a 1493cm^{-1} corresponde al modo *19a* (Corsing *et al*, 1953).

Las bandas que presentaron mayor amplificación fueron las correspondientes al modo de vibración *8a* y *8b*, que se encuentran localizadas en 1576cm^{-1} , 1620cm^{-1} y 1674cm^{-1} (Kline y Turkevich, 1994). Sin embargo las bandas entre 1600cm^{-1} y 1700cm^{-1} también se encuentran relacionadas con el modo de vibración *14* (Corsing *et al*, 1953). Para el cálculo

del factor de amplificación se utiliza la ecuación 1 establecida por Bindhu y colaboradores (2015)

Ecu. 1

En la tabla 1 se muestran los valores de intensidad para cada banda detectada en el espectro SERS y la intensidad de su banda correspondiente en el espectro no amplificado con su respectivo cálculo de factor de amplificación

Tabla 1.- Cálculo de factor de amplificación para las bandas del espectro SERS.

Banda (cm ⁻¹)	Intensidad en SERS	Intensidad normal	Factor de amplificación	Banda (cm ⁻¹)	Intensidad en SERS	Intensidad normal	Factor de amplificación
1674	177	13	13.6	1150	115	11	10.4
1620	404	52	7.7	906	158	49	3.2
1576	131	45	2.9	708	82	20	4.1
1493	144	16	9	504	271	25	10.8
1357	275	50	5.5	569	71	25	2.8
795	140	30	4.6	1187	138	41	3.3

Conclusiones

Mediante el acoplamiento de la técnica de sol-gel al proceso de electrohilado fue posible obtener fibras cerámicas homogéneas, compuestas de Sílica y Titania, con diámetros promedio de 228nm. Mediante espectroscopia infrarroja fue posible seguir la evolución del proceso sol-gel dentro material donde se logró observar la transición de anatasa a rutilo de la titania a 800°C y la pérdida de grupos hidroxilos de la superficie entre los 500°C y 800°C. La presencia de las formas cristalinas (anatasa y rutilo) de la titania fue analizada mediante difracción de rayos X. El soporte Sílica-Titania-plata fue sometido a pruebas de amplificación de señal en espectroscopia Raman, utilizando piridina como molécula de estudio en concentración 1nM, donde se determinó una capacidad de amplificación de 3 órdenes de magnitud en el caso del modo de vibración 8a, 8b y 15, mientras los modos de vibración 17b, 19b y 10b fueron amplificados en dos órdenes de magnitud. La presencia de bandas amplificadas confirma la generación exitosa de un soporte de Sílica-Titania-plata capaz de amplificar señales en espectroscopia

Bibliografía

- Aga, D. (2007)** “*Fate of pharmaceuticals in the environment and in water treatment systems*” CEC Press, Estados Unidos 408 pag.
- Bindhu, M.; Sathe, G.; Umadevi, M. (2015)** “SERS activities of green synthesized silver nanoparticles” *Journal of cluster Science*, vol 26, núm 5, pág 1451-1461
- Chao, H.; Yun, Y.; Xingfang, H.; Larbot, A. (2002)** “Effect of silver dopong on the phase transformation and grain growth of sol-gel titania powder”, *journa of European ceramic society*, vol 23, pág, 1257-126

- Choi, S.; Chu, B.; Lee, S.; Lee, S.; Soon, S.; Hun, S.; Kyo, J.** (2004), "Titania-doped silica fibers prepared by electrospinning and sol-gel process". *Journal of sol-gel science and thecnology*, núm 30, pág 215-221-
- Corsing, J.; Fax, B.; Lord, R.** (1953) "the vibrational spectra of pyridine and pyridined5" *J Chem. Phys*, vol 21, núm 7, pág 1170-1176
- Du, Y.; Yang, P.; Mou, Z.; Hua, N.; Jiang, L.** (2006) "Thermal decomposition behaviors of PVP coated on platinum nanoparticles" *Journal of applied polymer science*, vol 99, pág 23-26.
- Feldstein, M.; Ross, A.; Chevallier, C.; Creton, C.; Dormidontova, E.** (2003) "relation of glass transition temperature to the hydrogen bonding degree and energy in poly(N-vinyl pyrrolidone) blends with hydroxyl-containing plasticizers: 3. Analysisi of twho glass transition temperatures features for PVP solutions in liquid poly(ethylene glycol" *polymer* , vol 44, pág 1819-1834.
- Fleischmann, M.; Hendra, J; McQuillan, A.** (1974) "Raman spectra of pyridine adsorbed a silver electrode" *Chemical physics letters*, Vol 26, núm 2. Pág 163- 166
- Garjaraj, S.; Fan, C.; Lin, M.; Hu, Z.** (2013) "Quantitative detection of nitrate in water and wastewater by surface-enhanced Raman spectroscopy" *Environ monit asses* Num 185, pág 5673-5681.
- Hench, L; West, J.** (1990) "The Sol-Gel process" *Chemical Reviews*. vol 90, pág 33-72.
- Kline, C.; Turkevich, J.** (1944) "The vibrational spectrum of pyridine and the thermodynamic properties of pyridine vapors" *j. Chem. Phys.*, vol 12, núm 7, pág 300-309
- Kneipp, K.; Kneipp, H.; Itzkan, I.; Dasari, R.; Feld, M.** (1999) "Ultrasensitive chemical analysis by Raman spectroscopy", *Chem. Rev.* vol 99, pág 2957-2975.
- Kumar, S.; Kumar S; Hung Y.** (2004). "Treatment of pharmaceutical wastes". En *Handbook of industrial and hazardous waste treatment* (pag 63-131), USA, Marcel: Dekker
- Larkin, P.** (2011) "*infrared and raman spectroscopy; principles and spectral interpretation*" Elsevier, 230 pag.
- Leite, D.; Conceicao, V.; Martins, E.; Soares, A.; Gasmaron, M.; Vasconcelos, W.** (2011) "Infrared Spectroscopy of titania Sol-Gel coating on 316L Stainless Steel" *Material Sciences and applications*, vol 2, pág 1375-1382.
- Liu, X.; Yang, J.; Wang, L.; Yang, X.; Lu, L.; Wang, X.** (2000) "An improvement on sol-gel method for preparing ultrafine and crystallized titania powder" *Materials science and engineering*, vol A289, pág 241-245.
- McNay ,G; Eustace, D; Smith W, Faulds, ; Graham, D.** (2011) "Surface-enhanced Raman Scattering (SERS) and surface-enhanced resonance raman scattering: A review of applications " *appl spectroscopy*, vol 65 No 8 pag 825-837
- Moharram, M.; Khafagi, M.** (2007) "application of FTIR spectroscopyfor structural characterization of ternary poly(acrylic acid)-metal-poly(vinyl pyrrolidone) complexes" *journal of applied polymer scice*, vol 105, pág 1888- 1893
- Moskovits, M.** (1985) "surface enhanced spectroscopy" *Reviews on modern physics*, vol 57 No 3 pag 783-826

Ordal, M; Long, L; Bell, J; Bell, S; Bell, R; Alexander, W; Ward C. (1982) "Optical properties of the metals Al, Co, Cu, Au, Fe, Pb, Ni, Pd, Pt, Ag, Ti and W in the infrared and far infrared" *applied optics*, vol 22, núm 7, pág 1099-1120

Seco, M.; Goncalves,C.; Almeida, R. (2000) "Densification of Hybrid silica-titania sol-gel films estuded by ellipsometry and FTIR" *Material science and engineering*, vol B76, pág, 193-199

Smith, E; Dent, G (2005) "Modern Raman spectroscopy-a practical approach" John Wiley & Sons, Reino Unido, 225 pág.

Witten, T.; Sander, L. (1981) "Difurssion-limited aggregation, a kinetic critical phenomenon" *Physical review letters*, vol 47, núm 19, pág 1400-1403

CAPÍTULO 8

-Física y Matemáticas-

Mundo Cuántico, ¿Que hay más allá de lo que ves?

IVAN RAZIEL SANCHEZ GONZÁLEZ ⁽¹⁾, PEDRO MANUEL HERNÁNDEZ NÚÑEZ ⁽²⁾, &
JONATHAN CURIEL GUEVARA ⁽³⁾

⁽¹⁾Universidad de Guadalajara, Guadalajara, México, ivan_r_11@hotmail.com

⁽²⁾Universidad de Guadalajara, Guadalajara, México, pedromanuelhn@gmail.com

⁽³⁾Universidad de Guadalajara, Guadalajara, México, jon-77rmz@hotmail.com

RESUMEN: El universo de la mecánica cuántica no suele ser percibido como un tópico de conocimiento general; en ciertos sectores de la educación básica (especialmente en la educación pública) no es común que se enseñen algunas nociones del tema. En el peor de los casos la existencia de dichos conocimientos pasan desapercibidos. La difusión de los conceptos no abarca a toda la gente y los avances en el área se encuentran sesgados en los medios de comunicación más populares.

El proyecto se ha planteado como meta brindar difusión concerniente al área de la física cuántica, comenzando por su definición y componentes hasta abordar las diversas teorías que la rodean así como sus bastas aplicaciones en la ciencia y la vida cotidiana. Resaltando entre ellas metáforas y experimentos que han destacado por su naturaleza, trascendencia y genialidad. Logrando cimentar una perspectiva distinta del qué es lo que hay más allá de lo que podemos ver, que tanto conocemos y hasta donde especulamos al respecto. Incentivando la participación, motivación e investigación en esta, y consecuentemente en otras ramas de las ciencias que nos permitan generar un panorama de cómo funciona la naturaleza misma.

Al final del proyecto se busca conseguir los objetivos elaborando un estructurado proyecto difusivo que sirva como una clara y concisa introducción a la mecánica cuántica.

ABSTRACT: The universe of quantum mechanics is not taken as a general knowledge topic; in some sectors of elementary school (especially in public schools) it's not even common to teach and learn basic ideas about quantum mechanics.

The worst case is when the existence of quantum mechanics do not exist and is unnoticed. The diffusion of slight knowledge is not embraced for the people and new advances related with quantum mechanics are not relevant in mainstream media.

Fortunately our project has as a foremost goal to provide diffusion related to quantum mechanics, starting for its definition and main topics consequently moving to the explanations of many theories and real applications in science and daily life. Sticking out metaphors and experiments that has outstanding meanings for their nature and transcendently. Achieving the creation of a different perspective of what is beyond we can see, how much we know and how much we can speculate about everything. Encouraging the participation, motivation and research on this area and consequently in any other area of science that allows us to create a panorama of how nature works itself.

Therefore, at the end we want to achieve our goals making an structured diffusive project that works as a clear and brief introduction to quantum mechanics.

1. INTRODUCCIÓN

Desde el comienzo de la historia de la humanidad la poderosa combinación entre curiosidad y observación ha inspirado nuevas ideas. En el mundo tecnológico actual, todo lo que tocamos, usamos, vemos o hacemos, es posible porque alguien en algún sitio, observo, experimento y transformo lo que una vez fue solo una idea, en una herramienta útil y poderosa. Por increíbles que sean estos inventos e innovaciones, se vuelven insignificantes ante lo que los distintos exploradores han descubierto y están develando mediante la observación del universo más potente, minúsculo y extraño de lo imaginable, el universo cuántico, un paradójico reino con un potencial ilimitado, donde se están desarrollando fenómenos fascinantes en nuevas tecnologías que podrían alterar el mundo tal como lo conocemos.

2. PROBLEMÁTICA

El universo de la mecánica cuántica no suele ser percibido como un tópico de conocimiento general; en ciertos sectores de la educación básica (especialmente en la educación pública) no es común que se enseñen algunas nociones del tema. En el peor de los casos la existencia de dichos conocimientos pasan desapercibidos. La difusión de los conceptos no abarca a toda la gente y los avances en el área se encuentran sesgados en los medios de comunicación más populares.

3. OBJETIVOS

3.1 Objetivo general

- ✓ El proyecto se ha planteado como meta brindar difusión concerniente al área de la física cuántica, comenzando por su definición y componentes hasta abordar las diversas teorías que la rodean. Resaltando entre ellas metáforas y experimentos que han destacado por su naturaleza, trascendencia y genialidad. Logrando cimentar una perspectiva distinta del qué es lo que hay más allá de lo que podemos ver, que tanto conocemos y hasta donde especulamos al respecto. Incentivando la participación, motivación e investigación en esta, y consecuentemente en otras ramas de las ciencias que nos permitan generar un panorama de cómo funciona la naturaleza misma.

3.2 Objetivo específico

- ✓ Mostrar el concepto de la física cuántica
- ✓ Dar a conocer una manera clara y factible de cómo el mundo cuántico afecta directamente nuestro entorno
- ✓ Mencionar las principales teorías que han sido planteadas
- ✓ Brindar elementos para la comprensión; entre ellos el experimento de la doble rejilla
- ✓ Generar interés por el tema motivando la investigación
- ✓ Despertar inquietudes por las ciencias

4. MARCO TEÓRICO O ANTECEDENTES.

4.1 Física clásica

Antes de llegar a la física cuántica es necesario saber un poco sobre física clásica. Primero tenemos a Sir. Isaac Newton, que con varias ecuaciones matemáticas sencillas, describió y predijo el movimiento de los planetas. A continuación un caballero de nombre James Maxwell demostró que la electricidad y el magnetismo también podían resumirse en varias ecuaciones matemáticas. En concreto, los científicos creían saber cómo funcionaba el mundo real, las cosas orbitaban unas alrededor de otras y prácticamente todo lo que se transmitía, incluyendo a la luz, se hacía por ondas. Este era el mundo clásico de la física donde todo es predecible y resulta familiar.

4.2 Física cuántica

4.2.1 *Cuanto de acción.*

La primera incursión de la humanidad en el universo cuántico en 1900 con Max Planck, un físico brillante que intentaba descubrir porque los objetos cambiaban de color al calentarse. Al no encontrar una solución satisfactoria bajo los métodos de la física clásica, y partiendo de la suposición de que la radiación no es emitida en forma continua si no en pequeñas paquetes de energía llamados cuantos, crea una ley donde postula que la energía total de un objeto es un múltiplo de que el llamaría el cuanto de acción, más tarde llamada constante de Planck, identificándola con la hache minúscula, y con un valor de 6.6262×10^{-34} Js. Esta nueva idea no era congruente con las leyes de la física clásica. Planck había ofrecido una explicación muy precisa pero ni el mismo se la creía.

4.2.2 *Efecto fotoeléctrico*

La primera persona que tomo la idea de Planck y la aplico de manera concisa y correcta, fue un examinador de una oficina suiza de patentes: Albert Einstein. Einstein logro explicar el efecto fotoeléctrico y para ello usaría el cuanto de acción.

El efecto fotoeléctrico consiste en que cuando la luz incide sobre una plancha de metal, es capaz de extraer electrones de la misma. Al respecto se puede observar que esto le es factible a la luz de alta frecuencia o sea la luz de onda corta; mientras que la luz de onda larga no puede desprender electrones independientemente de la cantidad de luz que incida sobre la plancha. Con la teoría ondulatoria de la luz no era posible explicar este fenómeno. Por ende Einstein supone que la luz es un flujo de partículas de los llamados fotones.

Cada fotón entrega su energía a exactamente un electrón el cual puede salirse de la plancha de metal si tiene la energía necesaria. Como los fotones de la luz violeta disponen de una frecuencia mayor y por ende, de más energía que los fotones de la luz roja; un fotón violeta logra lo que no lograría una gran cantidad de fotones rojos.

Para determinar la cantidad de energía necesaria para desprender un electrón en cada caso, Einstein, establece la tesis que la energía de los fotones también debe ser el producto de frecuencia y la constante de Planck.

En resumen la aplicación de la teoría cuántica por Einstein, revela que la luz tiene propiedades tanto de partícula como de onda, a lo cual se le llama dualidad onda partícula.

4.2.3 Estructura del átomo

En 1913 el físico danés Niels Bohr, aplica la idea de la cuantización de la luz para explicar la estabilidad de los átomos. Según el modelo de Ernesto Rutherford, vigente hasta ese momento, el átomo se componía de un núcleo con carga positiva y de electrones de carga negativa girando alrededor de él. La estabilidad del átomo está basada sobre el hecho de que las fuerzas de atracción entre las cargas diferentes, es compensada por la fuerza centrífuga de los electrones. Sin embargo, debido a su movimiento los electrones deberían entregar energía permanentemente y hacerse cada vez más lentos hasta caer dentro del núcleo.

Debido a que los átomos se encuentran estables, Bohr supone que los electrones no giran indiscriminadamente, si no por orbitas exactamente definidas sobre las cuales no pueden perder energía. En el interior del átomo el nivel de energía de las orbitas es menor que en el área exterior.

Cuando un electrón salta a una órbita mayor, debe absorber un cuanto de energía o sea, un fotón, si vuelve a la órbita anterior, vuelve a entregar el cuanto de energía; comportamiento que se denomina: salto cuántico.

La energía absorbida o entregada a cada caso también equivale al producto del cuanto de acción de Planck y la frecuencia del fotón.

Bohr afirmaba que los electrones que giraban al rededor del núcleo eran y se comportaban como partículas, fue el físico francés Lui de Broglie, quien demostró que las orbitas atómicas pueden explicarse asumiendo que los electrones también pueden comportarse como onda.

4.2.4 Ecuación de Schrödinger

Hacía falta una teoría unificadora que aclarara como una onda podía comportarse como partícula y viceversa, que explicara el misterio de la dualidad onda partícula de la luz y la materia; y en 1925 Erwin Schrödinger formulo la hoy famosa ecuación que lleva su nombre. Su ecuación sentó las bases de una teoría completa de la mecánica cuántica que proporciono una manera sistemática de comprender los sucesos anteriores de mecánica cuántica así como explorar el mundo atómica para encontrar nuevos e inesperados efectos cuánticos.

La ecuación de Schrödinger determina las funciones de onda físicamente posibles para un sistema y los niveles de energía posibles para este sistema.

Como ya sabemos la materia tiene comportamiento de onda como de partícula, pero ¿cómo se comportan estas ondas? Ciertamente no son ondas mecánicas, ya que el comportamiento de las partículas no se ajusta a, por ejemplo, las ondas de sonido; tampoco son ondas electromagnéticas, ya que no siguen la ecuación de ondas de la luz. Nos hemos topado entonces con un nuevo tipo de onda que son las ondas de materia, las cuales siguen la ecuación de Schrödinger que en otras palabras te da la probabilidad de encontrar una partícula en un estado determinado.

A diferencia de la mecánica de Newton que nos daba la posición exacta de un objeto, la ecuación de Schrödinger solo nos da probabilidades de encontrar a la partícula en un sitio o en otro. Pero ¿estamos hablando de probabilidad? SI, así pues una partícula tiene una probabilidad de estar en un estado o en otro, o en otro, el problema viene al momento de determinar en cuál de

ellos se encuentra realmente; si no podemos observar la partícula directamente, tenemos que decir que la partícula se encuentra en todos los estados a la vez y a esto se le denomina superposición.

4.2.5 Explicación de la Superposición: el gato de Schrödinger

El poder aplicar o llevar la idea de la superposición a la vida cotidiana, era una idea que a todos los científicos les inquietaba, es por ello que Schrödinger creó un experimento mental, llamado el gato de Schrödinger. La idea era tomar un gato, lo metes en una caja, aislado totalmente del exterior, se mete en la caja también una ampollita con veneno que tiene como tapón una partícula radioactiva, si el tapón se desintegra y desaparece el gato muere, si el tapón no se desintegra el gato vive. Como la caja está cerrada no sabemos si el gato está vivo o muerto, el gato está entonces en un estado de superposición en el que está vivo y muerto al mismo tiempo; solo sabremos en qué estado está hasta que abramos la caja, o sea, observando.

4.2.6 Entrelazamiento

Al igual que Schrödinger, Einstein seguía desconcertado por esta paradoja, así que propuso un nuevo experimento mental con sus colegas Podolski y Rosen de Princeton, donde demostraban que ciertas combinaciones de superposiciones de partículas, podían combinarse de una manera extraña e ilógica, imposible de explicar con la mecánica clásica. Básicamente propusieron que la descripción de la realidad dada por la función de onda de Schrödinger estaba incompleta.

Lo que Einstein proponía era: tomemos una partícula en superposición (o sea 2), separémoslas mucho incluso a años luz, después imaginemos a un observador en una mirándola y por consiguiente dándole un estado que antes no tenía. El punto clave es que cuando se toma la medida también determina el estado de la otra partícula. Para Einstein era imposible y lo llamo “inquietante acción a distancia”. Schrödinger lo llamaría entrelazamiento.

Años después el científico irlandés John Bell ideó un experimento para demostrar que lo que Einstein decía era imposible. El experimento consistía en medir un par de electrones al mismo tiempo, o uno en superposición, separados a mucha distancia. La idea era que lo que se mide en un lado no podía influir en la medición tomada del otro lado. Esto era un punto crucial pues según Einstein nada puede viajar más rápido que la luz, o sea, que lo que se hacía en un lado no alcanzaría a llegar al otro lado. El resultado de las mediciones demostró lo que predecía la mecánica cuántica: que sea cual sea la medición en un extremo, si decido medir en la misma dirección en el otro extremo se descubre que los dos fotones están alineados en la misma dirección. Eso significa que los resultados de las mediciones están fuertemente correlacionados, más fuerte que cualquier correlación concebible en la física clásica, significa que cuando dos electrones están separados por muchos metros siguen comportándose como un único objeto.

5. METODOLOGÍA

5.1 Experimento central de la física cuántica: experimento de la doble ranura.

5.1.1 introducción

El experimento de la doble ranura contiene la esencia de la mecánica cuántica, el padre de todos los misterios cuánticos, es una metáfora de la dualidad onda-partícula.

5.1.2 Metodología

5.1.2.1 Materiales

Pantalla detectora.

Pantalla con una ranura.

Pantalla con dos ranuras.

Ondas (de agua o electromagnéticas por ejemplo).

Cañón de partículas de materia (canicas por ejemplo). Cañón de electrones.

Observador

5.1.3 Práctica

1. Hacer pasar una partícula, o bolita de materia (por ejemplo una canica), por una ranura y ver el patrón que se forma.
2. Hacer pasar una partícula, o bolita de materia (por ejemplo una canica), por dos ranuras y ver el patrón que se forma.
3. Hacer pasar una onda de luz o agua por una ranura y observar el patrón que se forma.
4. Hacer pasar una onda de luz o agua por dos ranuras y observar el patrón que se forma.
5. Hacer pasar un haz de electrones por una ranura y observar el patrón que se forma.
6. Hacer pasar un haz de electrones por dos ranuras y observar el patrón que se forma.
7. Hacer pasar electrones individuales por dos ranuras y observar el patrón que se forma.
8. Hacer pasar electrones individuales por dos ranuras y observar por cuál de las dos ranuras pasa el electrón, después observar el patrón que se forma.

6. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

6.1 Resultados

1. Se observó una única banda de golpes.
2. Se observaron dos bandas de golpes.
3. Se observó una única banda de intensidad.
4. Se observó un patrón de interferencias.
5. Se observó una única banda de golpes.
6. Se observó un patrón de interferencias.
7. Se observó un patrón de interferencias.
8. Se observaron 2 bandas de golpes.

6.2 Discusión

Primero para poder comprender el experimento se hizo pasar partículas de materia por una y dos ranuras para darse cuenta como se comportaban dándonos una y dos franjas de golpes como era esperado. Después se probó con ondas, obteniendo en principio una sola franja donde había más frecuencia y después un patrón de interferencias debido a que cuando pasa por dos ranuras se crean dos ondas, cuando la parte superior de una onda choca con la inferior de otra se eliminan entre ellas, y cuando las partes superiores de las ondas chocan, crean más intensidad.

La parte interesante y extraña de este experimento viene cuando lanzamos el haz de electrones, que son como pequeñas partículas, similar a las canicas, pero en un tamaño mucho menor. Al lanzar electrones por una ranura se obtuvo lo que era esperado, una sola franja al igual que su similar las canicas, y cuando lanzamos estos pedacitos minúsculos a través de dos ranuras, tuvieron que haberse dibujado dos franjas al igual que las canicas, pero en vez de eso se obtuvo un patrón de interferencias como con las ondas, no como con las canicas.

¿Cómo era posible que pequeños trozos de materia pudieran presentar un patrón de interferencias? En primera instancia los físicos pensaron que quizá los electrones chocan unos contra otros, debido a que eran miles, y crean ese dibujo. Así que decidieron lanzar electrones de uno por uno, así no podían afectarse unos con otros. El resultado fue un tanto sorprendente pues se volvió a presentar el mismo patrón de interferencias. No se podía ignorar las posibles conclusiones: cada electrón sale como partícula, se convierte en una onda de posibilidades (se divide), pasa por las dos ranuras, interfiere consigo mismo y finalmente choca con la pantalla en forma de partícula. Pero matemáticamente es aún más curioso: pasa por las dos ranuras y por ninguna, pasa por una y por las otras; todas estas posibilidades superpuestas unas con otras.

El experimento desconcertó muchísimo a los físicos, tanto que decidieron mirar con atención para decidir por cual ranura pasaba en realidad el electrón, se puso el observador junto a la pantalla de las dos ranuras, pero cuando miraron el electrón decidió comportarse como una canica de nuevo, dibujo un patrón de dos franjas.

¿Pero cómo puede ser que en el mundo cuántico solo por observar algo, puedas influir en la forma en que se comporta? Definamos a que se refieren los científicos con “observar”. Para observar cómo pasan los electrones hay que iluminarlos, pero al hacerlo, debido a que la luz viene en fotones, estos pueden hacer que los electrones se comporten como partículas.

La pregunta es: ¿qué ocurre realmente cuando las luces están apagadas? Este experimento muestra que cuando un objeto no es medido, ni se interactúa con su entorno, no tiene una posición definida, sino que está a la vez en muchas posiciones, esto es lo que se llama la superposición cuántica.

7. PRINCIPALES APLICACIONES.

7.1 Semiconductores

Los semiconductores son materiales con una gran separación entre dos estados cuánticos, que se constituyen a lo largo una banda de valencia de la última capa de electrones del átomo, y la banda de conducción. Con la señal de la base se consigue que se acerquen los dos estados cuánticos separados y se permite que los electrones pasen a la banda superior y se comporten como en un material conductor.

7.2 Transistor

Los transistores sin duda fue la invención más importante que tuvo la electrónica en el siglo pasado, hoy día se han logrado producir de varias maneras y tamaños diminutos. Todo dispositivo los usa. Estos se componen de tres terminales, la Base, el Emisor y el Colector. Internamente está formado por un cristal que contiene una región P entre dos N (NPN) o entre N y P (PNP), la diferencia entre ambos radica en la polaridad de sus electrodos.

7.3 Laser

Un láser (de la sigla inglesa light amplification by stimulated emission of radiation, amplificación de luz por emisión estimulada de radiación) es un dispositivo que utiliza un efecto de la mecánica cuántica, la emisión inducida o estimulada, para generar un haz de luz coherente de un medio adecuado y con el tamaño, la forma y la pureza controlados. En 1916, Einstein estableció los fundamentos para el desarrollo de los láseres y de sus predecesores, los másers (que emiten microondas), utilizando la ley de radiación de Planck basada en los conceptos de emisión espontánea e inducida de radiación.

7.4 Microscopio T.E.M.

Los microscopios electrónicos más sencillos constan de dos lentes formadores de la imagen de forma muy parecida a los ópticos convencionales. La iluminación proviene de un cañón de electrones emitidos por un filamento W o LaB6. Los electrones son acelerados al aplicar un potencial negativo y focalizado mediante dos lentes condensadores sobre una muestra delgada transparente a los electrones. Después de pasar a través de la muestra los electrones son recogidos y focalizados por la lente objetivo dentro de una imagen intermedia ampliada.

8. FUTURAS LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

8.1 Laser

Los avances en la tecnología láser han dado como resultado que los rayos laser sean algo habitual. Utilizamos los láseres cada día aun sin darnos cuenta. Los avances futuros en esta tecnología sin duda producirán mejoras en las áreas de entretenimiento, medicina, odontología, computación, defensa y telecomunicaciones. Los láseres tal vez puedan también ser utilizados para producir energía en un futuro no tan distante.

8.2 Ordenador cuántico

Los ordenadores actuales trabajan con dos posiciones: encendido y apagado. Los informáticos otorgan valor 1 y 0. sin embargo en los ordenadores cuánticos los bits pueden adoptar otros estados diferentes de 1 o 0, logrando transferir mayor información y realizar una gran cantidad de operaciones informáticas al mismo tiempo.

9. CONCLUSIÓN

Al término de éste proyecto podemos concluir que probamos nuestros puntos u objetivos. Demostramos en primer plano de la mecánica cuántica es muy reconocida en el ámbito de las ciencias y que al pasar del tiempo va adquiriendo mayor relevancia en todos los ámbitos de la vida. Al mismo tiempo hicimos hincapié en la importancia que tiene como ciencia, y por tanto la necesidad de implementarla en los programas didácticos de las instituciones educativas de nuestro país para evitar un rezago mundial. Logramos demostrar también que la mecánica cuántica no es una ciencia rara o experimental como se piensa en nuestro país, sino que alrededor

del mundo se están llevando a cabo grandes avances en el área que están afectando directamente la ciencia y la tecnología.

Conforme a los objetivos: Conseguimos los objetivos elaborando un estructurado proyecto difusivo que sirviera como una clara y concisa introducción a la mecánica cuántica. La difusión y los componentes de la misma fueron abordados de una manera que resultara sencilla de comprender pero que de igual manera fuera exacta y precisa. Echamos mano de los diferentes teoremas, teorías, y experimentos registrados para dar fidelidad a nuestras afirmaciones y demostrar los principios de la mecánica cuántica, de manera que pudiéramos brindar los elementos necesarios para la comprensión del tema.

Esperamos que con el esfuerzo aquí plasmado se logre generar el interés por el tema que estamos buscando despertar, cimentando en quienes reciban nuestra información una perspectiva amplia y clara de la mecánica cuántica, suficiente para que pueda percatarse del papel tan importante que juega ésta en nuestra vida diaria, en nuestro entorno y en los avances que están previstos para el futuro cercano, los cuales revolucionarían por completo la ciencia y la tecnología en todo el mundo.

10. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICA

Alvarenga, Máximo. (2009). Física General. México: OXFORD UNIVERSITY PRESS

Young, Friedman. Sears, Zemansky. (2009). Física Moderna. En Física Universitaria, con física moderna Vol. 2, 12° edición. (1307-1401). México: PEARSON EDUCACION.

Raymond A. Serway. (2006). Introducción a la física cuántica y Mecánica cuántica. En FÍSICA incluye física moderna (1161-1211). México: McGraw-Hill.

Robert Eisberg y Robert Resnik. (2008). Física Cuántica. México: LIMUSA.

Robert Eisberg. (2007). Fundamentos de física moderna. México: LIMUSA

Páginas de Internet

Derek Diorio. (2012). The Quantum Tamers, reveling our weird and weired future. 12 de Noviembre del 2012, de MrQcharm, YouTube Sitio web: <http://www.youtube.com/watch?v=O9TA2faf6nw>

Antje Samiralow. (2005). Max Planck y la Física cuántica. 16 de abril del 2013, de Cumbres de las ciencias naturales y la técnica, YouTube Sitio web: <http://www.youtube.com/watch?v=ppLqWcdSWyQ>

11. GLOSARIO

11.1 Difracción.

Es el fenómeno por el cual se produce una desviación de los rayos luminosos al pasar por un cuerpo opaco o por una apertura de diámetro menor o igual a la longitud de onda.

11.2 Electrón.

Partícula con carga negativa que constituye uno de los componentes fundamentales de todas las sustancias.

11.3 Física cuántica.

Es una rama de la física que se especializa en el estudio del comportamiento de la materia cuando las dimensiones de esta son tan pequeñas que empiezan a notarse los efectos como la imposibilidad de conocer la posición exacta de una partícula, su energía, o conocer simultáneamente su posición y velocidad sin afectar la propia partícula.

Surgió a principios del siglo XX ante la inexactitud de la física clásica para resolver problemas experimentales y teóricos a nivel atómico.

11.4 Fotón.

Cuanto de la luz, es decir, la mínima partícula de energía luminosa que se puede obtener.

Es un fenómeno que ocurre cuando dos sistemas de ondas de iguales características se propagan por un mismo medio y coinciden. En ciertos puntos llegan las ondas de forma tal que se compensan los efectos de movimiento que producen sobre ciertas partículas del medio de propagación. Por ejemplo, una cresta se anula con un valle y una compresión con una dilatación en la propagación de ondas.

11.6 Longitud de onda.

Distancia existente entre dos crestas o dos valles consecutivos (un periodo) en la gráfica de propagación de una onda.

11.7 Mecánica cuántica.

Los principios fundamentales de la mecánica cuántica establecen con mayor exactitud el comportamiento y la dinámica de sistemas irreversibles. Los efectos sobre la materia son notables en materiales mesoscópicos, aproximadamente 1,000 átomos de composición.

11.8 Naturaleza dual de la luz.

Considera dos maneras distintas y simultáneas pero igualmente válidas para la explicación de la propagación de la luz; la energía luminosa, al propagarse a partir de una fuente emisora, lo hace en forma de colección de fuerzas variables que, en forma de ondas, avanza alejándose a una velocidad considerable, esto le da sentido a la afirmación de que la luz es un fenómeno ondulatorio, pero modernamente se ha visto que además la luz tiene características tales que permiten compararle con diminutos proyectiles (fotones en éste caso) que salen de los emisores y que son arrojados con velocidad enorme a lo largo de los rayos luminosos, siendo esta la explicación al fenómeno de la mecánica ondulatoria. En pocas palabras la luz tiene naturaleza dual: presenta características tanto de onda como de partícula (fotón).

11.9 Nivel atómico.

Referente al tamaño de un átomo. Un átomo mide la millonésima parte de un milímetro (mesoscópico)

11.10 Onda.

Comoción periódica que se propaga a través de algún medio físico a partir de un centro emisor. | puede considerarse como una fuerza o colección de fuerzas cuya magnitud fluctúa.

11.11 Partícula.

Cuerpo material físico de minúsculas dimensiones constituyente de la materia.

CAPÍTULO 9

**–Ingeniería
en Comunicaciones y
Electrónica–**

Cálculo del Kernel analítico para funcionales tipo GGA en la teoría de los funcionales de la densidad auxiliar

Jesús Aarón Pérez Rodríguez ⁽¹⁾, Dr. Bernardo A. Zuñiga Gutiérrez ⁽²⁾

(1) *Universidad de Guadalajara, Guadalajara, México, jesus.aaron.perez@gmail.com*

(2) *Universidad de Guadalajara, Guadalajara, México, bzuniga.51@gmail.com*

RESUMEN:

Este trabajo aborda el tema del cálculo del kernel de forma analítica para el funcional de intercambio PBE96 y de correlación PBE, tipo GGA, dentro de la teoría de los funcionales de la densidad auxiliar. El objetivo de esta formulación es reducir los tiempos de cálculo y optimizar los recursos empleados en un equipo de cómputo para el cálculo de propiedades de moléculas y nanopartículas, tales como la interacción entre espines nucleares (resonancia magnética), polarización y frecuencias de vibraciones moleculares, entre otras, también formuladas dentro el marco de la teoría de los funcionales de la densidad auxiliar. La comparación entre el método analítico propuesto y el realizado por diferencia finita demuestra que la formulación analítica es varias veces más rápido, permitiendo el cálculo de propiedades moleculares de sistemas conteniendo con hasta mil átomos en tiempos razonables de cómputo usando recursos moderados de cómputo (las polarizabilidad del C180 fue calculado en una computadora de escritorio con un procesador I7 y 1 GB de RAM). La nueva formulación analítica se implemento en el código de estructura electrónica llamado deMonk (www.demon-software.com).

PALABRAS CLAVE:

Propiedades magnéticas, ADFT, Funcionales GGA, PBE.

ABSTRACT:

This paper addresses the issue of calculation kernel for GGA functionals in the auxiliary density functional theory analytically for the functional PBE, in order to reduce calculation times and optimize computer equipment resources used in calculating the spin-spin interaction and frequency molecular vibration in the framework of the auxiliary density functional theory under comparison of the proposed method and the calculation by finite differences, using software deMonk (www.demon-software.com). for calculating molecular interactions.

KEY WORDS:

Magnetic properties, ADFT, GGA Functionals, PBE.

1. INTRODUCCION

El desarrollo tecnológico actual está basado en el conocimiento a detalle a nivel molecular de los fenómenos que ocurren. Las nanopartículas tienen mucho potencial de aplicación pues sus propiedades energéticas, eléctricas y magnéticas pueden ser moduladas a conveniencia según el número de átomos y acomodo espacial de estos. También podemos mencionar que el entendimiento a detalle de las propiedades magnéticas de las moléculas de agua y de compuestos paramagnéticos, involucrados en el fenómeno de la resonancia magnética nuclear, permite mejorar las técnicas de diagnóstico médico. Recordemos que la sensibilidad de esta técnica depende de la magnitud y duración de la magnetización transversal generada en el paciente. Ante un campo magnético perfectamente uniforme, la velocidad de desaparición de la magnetización transversal está asociada a los pequeños campos magnéticos inducidos en el interior de las moléculas, estos dependen del entorno químico de los protones y de la composición molecular del tejido. Además los agentes de contraste en resonancia magnética, que se alojan en un tejido en particular, también alteran los pequeños campos magnéticos de los protones en el tejido, y por lo tanto el tiempo de desaparición de la magnetización transversal, mejorando la nitidez de la imagen, esto facilita la detección de tumores en las imágenes. En el estudio experimental de las propiedades moleculares, usualmente hay que hacer varios ensayos de prueba y error con varios compuestos para determinar cuál de ellos tiene la propiedad útil para alguna aplicación de interés. Tanto ensayo experimental llega a ser muy costoso y habría multitud de detalles que no se podrían observar directamente. Por otro parte, el estudio de las propiedades moleculares a un nivel teórico sería mucho menos costoso, daría la explicación del fenómeno a detalle y permitiría deducir que compuestos que tienen las propiedades moleculares apropiadas. Sin embargo, un estudio teórico de las propiedades requiere de un complejo modelo matemático basado en el marco teórico de la mecánica cuántica. La complejidad y el gran número de variables a tratar de estas ecuaciones hacen obligatorio el uso de una computadora para su solución y, por la misma razón, el tamaño de los sistemas que se puede estudiar esta limitado.

La ecuación de Schrödinger es la ecuación que debe resolverse para calcular las propiedades de una molécula o nanopartícula, pero carece de una solución exacta. Sin embargo, esta ecuación se puede resolver de forma aproximada. Estrictamente, la función de onda es la cantidad que determina las propiedades moleculares, y esta depende de las tres coordenadas cartesianas de cada uno de las partículas, electrones y núcleos, que constituyen la molécula, ambas son partículas cuánticas. Sin embargo, por la aproximación de Born-Oppenheimer, la función de onda asociada a una molécula es reducida una función que solo considera como partículas cuánticas los electrones, mientras que los núcleos son puntos fijos en el espacio con una carga positiva, por lo tanto, el número de variables en la función de onda es menor. Existen diversas aproximaciones a la solución de la ecuación de Schrödinger electrónica, conocidas como metodologías *ab-initio*, las más precisas reproducen las propiedades con excelente acuerdo a las observaciones experimentales, pero sus ecuaciones de trabajo son tan robustas que solo compuestos conteniendo hasta una docena de átomos pueden ser estudiados rutinariamente, a menos que se cuente con

acceso a supercómputo (muy limitado en la mayoría de los países). Las metodologías llamadas Coupled-Cluster (CC) y de Configuración de Interacciones (CI) son ejemplos de metodologías sofisticadas. La teoría de los funcionales de la densidad (DFT, por sus siglas en inglés) ofrece otra solución aproximada a la ecuación de Schrödinger. En DFT, la densidad de electrones, una función de solo tres variables, es la cantidad que determina las propiedades de una molécula. DFT llega ser menos precisa que CC o CI, pero aún así su acuerdo con los datos experimentales es muy bueno, pero a un costo computacional mucho menor. Sistemas conteniendo algunas decenas de átomos, hasta 50 átomos aproximadamente, pueden ser estudiados rutinariamente. Esta mejora computacional no llega ser suficiente en algunos compuestos de interés que pueden llegar a contener algunos cientos de átomos, una simulación computacional confiable requiere considerar el sistema completo. Por lo tanto, la investigación de algoritmos matemáticos-computacionales altamente eficientes es tema actual de investigación.

La teoría de los funcionales de la densidad auxiliar (ADFT por sus siglas en inglés) ha demostrado ser altamente eficiente en comparación con implementaciones de DFT convencional, y las metodologías ab-initio (A. M. Koster, 2011). En general, la eficiencia de la ADFT radica en el uso de una densidad aproximada para la evaluación de las contribuciones del intercambio y correlación. Entonces, la ADFT permite el cálculo de propiedades energéticas, eléctricas o magnéticas de sistemas que contienen cientos de átomos.

Muchas de las propiedades moleculares son calculadas como segundas derivadas de la energía, requiriendo el cómputo de la densidad perturbada. En este sentido, la teoría de perturbaciones de la densidad auxiliar (ADPT) establece las ecuaciones de trabajo para el cálculo de la densidad perturbada libre de cualquier procedimiento auto-consistente, contrario a su contraparte en la DFT convencional (A. M. Koster, 2011).. Esto ya es un avance en el campo del rendimiento computacional; sin embargo, la ADPT en el código de deMon2k (David Young, 2001) calcula las segundas derivadas funcionales del potencial de intercambio y correlación (el Kernel) como diferencias finitas, menguando su eficiencia. Por lo tanto, la formulación analítica de estas derivadas puede incrementar el rendimiento computacional de la ADPT.

En este trabajo se presenta dicha formulación general para funcionales de intercambio y correlación de aproximación de gradiente generalizado (GGA, por sus siglas en inglés), y su aplicación en particular al funcional PBE96-PBE. Se mostraran casos de prueba para comprobar la mejora en el rendimiento computacional para el cálculo de propiedades eléctricas y magnéticas.

2. LA ENERGIA EN FUNCION DE LA DENSIDAD ELECTRONICA

La idea de expresar la energía electrónica en función de la densidad electrónica se remonta a los comienzos de la mecánica cuántica (Thomas-Fermi 1927). Esta posibilidad resulta muy atractiva porque reduce la dimensionalidad de un problema de 3 variables a otro de solo 3.

$$\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N) \leftrightarrow (\rho, \dots) \tag{1}$$

Y evita tratar con la función de onda cuya complejidad crece exponencialmente con el número de electrones. En este marco se propuso escribir la energía como suma de funcionales que dependen de ρ ,

$$E[\rho] = T[\rho] + E_{int}[\rho] \tag{2}$$

donde $T[\rho]$ es la energía cinética, mientras que $E_{int}[\rho]$ y $E_{ext}[\rho]$ son la interacción Coulombica de repulsión electrón-electrón y de atracción electrón-núcleo, respectivamente; ambas interacciones pueden representarse mediante las expresiones correspondientes a distribuciones de cargas clásicas;

$$E_{int}[\rho] = \frac{1}{2} \int \int \frac{\rho(r) \rho(r')}{|r-r'|} dr dr' \tag{3}$$

$$E_{ext}[\rho] = \int \frac{\rho(r) \phi(r)}{r} dr \tag{4}$$

Aquí es la carga del núcleo Z . Por otra parte, la forma de describir la energía cinética no tiene una correspondencia con expresiones de la física clásica. La expresión exacta de $T[\rho]$ no está determinada, por lo que tenemos que recurrir a modelos aproximados para deducir un funcional. El modelo de Thomas-Fermi (Ira N. Levine, 2001), uno de los primeros, adopta la energía cinética de un gas uniforme de electrones;

$$T[\rho] = \frac{3}{10} (3\pi^2)^{2/3} \int \rho^{5/3}(r) dr \tag{5}$$

Este esquema describe aproximadamente algunos sistemas metálicos con electrones deslocalizados, pero falla en moléculas pues no describe apropiadamente las uniones químicas. La energía cinética electrónica supone un porcentaje significativo de la energía electrónica total. La dificultad para hallar un funcional $T[\rho]$ lo suficientemente exacto imposibilitó el desarrollo de modelos matemáticos basados en ρ , que resultaran competitivos con las formulaciones dependientes de la función de onda. Extensiones del modelo de Thomas-Fermi no consiguieron igualar la exactitud de Hartree-Fock, pero la idea de utilizar ρ se mantuvo latente. Finalmente resurge en los 60s, tras los teoremas de Hohenberg y Kohn (Ira N. Levine, 2001), este último laureado con el premio Nobel de química en 1998. Conviene notar que la función de onda electrónica, y por lo tanto la energía, están determinadas unívocamente por el potencial externo $\phi(r)$, generado por los núcleos, y por el número de electrones N ,

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N |\psi_i(\mathbf{r})|^2 \quad [6]$$

$$\int \rho(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \sum_{i=1}^N \int \rho(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \sum_{i=1}^N \int |\psi_i(\mathbf{r})|^2 \psi_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad [7]$$

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N |\psi_i(\mathbf{r})|^2 \quad [8]$$

Hohenberg y Kohn probaron que $\rho(\mathbf{r})$ tiene una relación unívoca con $\psi(\mathbf{r})$, por lo cual por transitividad debe haber una relación unívoca entre $\rho(\mathbf{r})$ y $\psi(\mathbf{r})$. La reciprocidad entre $\rho(\mathbf{r})$ y $\psi(\mathbf{r})$ puede demostrarse por una reducción al absurdo. En otras palabras, si conocemos la densidad de electrones de una molécula entonces podemos determinar la disposición de los núcleos (geometría molecular), su identidad y de sus propiedades energéticas, eléctricas y magnéticas.

3. TEORIA DE LOS FUNCIONALES DE LA DENSIDAD AUXILIAR

3.1. Método de Kohn-Sham

La ecuación [2] establece una relación fundamental entre la energía y la densidad electrónica de una molécula, pero no tiene una expresión matemática explícita para resolverla. En este sentido, el método de Kohn-Sham provee una manera de computar la energía electrónica. La idea central es considerar un modelo de molécula en la cual los electrones no interactúan entre sí (no tienen carga eléctrica), pero se asume que la densidad de electrones de este modelo es exactamente igual a la densidad del sistema real. Bajo esta suposición, la función de onda está descrita de forma precisa como un determinante cuyas entradas son funciones que dependen de un solo electrón. El determinante es conocido como el determinante de Slater, originalmente introducido en la metodología de Hartree-Fock, y cada una de las funciones son conocidas como orbitales moleculares (OM). En el método de Kohn-Sham, $\psi(\mathbf{r})$ y $\rho(\mathbf{r})$ se expresan en términos de los OM:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N |\psi_i(\mathbf{r})|^2 \quad [9]$$

y:

$$\psi_i(\mathbf{r}) = \sum_{\mu=1}^M c_{\mu i} \phi_{\mu}(\mathbf{r}) \quad [9a]$$

En este marco Kohn y Sham propusieron escribir el funcional de la energía como:

$$E[\rho] = T[\rho] + V[\rho] + E_{xc}[\rho] \quad [10]$$

donde $E_{xc}[\rho]$, conocido como el funcional de intercambio y correlación, reúne todas las (pequeñas) contribuciones faltantes para alcanzar la energía exacta. La energía cinética y el potencial Coulombico calculados en el modelo de electrones no interactuantes no son exactas al sistema real, por lo que viene a corregir a estas contribuciones a la energía molecular:

$$E_{xc}[\rho] = E_x[\rho] + E_c[\rho] \quad [11]$$

La expresión funcional exacta de $E[\psi]$ es desconocida, solo puede ser aproximada. Actualmente existen un gran número de aproximaciones a $E[\psi]$ y la exactitud del método queda determinada por la aproximación con la que se calcula $E[\psi]$.

3.2. Ecuaciones de Kohn-Sham

Más explícitamente, el funcional de la energía puede escribirse:

$$E[\psi] = \frac{1}{2} \int |\nabla^2 \psi|^2 - \int \frac{(\psi)}{r} + \frac{1}{2} \int \frac{(\psi)(\psi)}{r_{12}} + E_{xc}[\psi] \quad [12]$$

Entonces podemos determinar la energía electrónica conociendo el conjunto de

OMs, pero hasta este punto no está claro cómo determinarlos. El principio variacional nos indica que la ψ_0 que corresponde con el sistema real es aquella que minimiza a $E[\psi]$; por lo tanto, los OMs y ϵ_i pueden obtenerse de

la condición:

$$\frac{\delta E[\psi]}{\delta \psi} = 0 \quad [13]$$

con la restricción de que los sean ortonormales (lo cual implica $\int \psi_i \psi_j = \delta_{ij}$). Se define entonces el Lagrangiano:

$$L[\psi, \lambda] = E[\psi] - \sum_{ij} \lambda_{ij} \left(\int \psi_i \psi_j - \delta_{ij} \right) \quad [14]$$

el cual se deriva respecto de cada OMs, ψ_i . La derivada funcional de $L[\psi, \lambda]$ debe conducir a un sistema de ecuaciones análogas a las de Hartree-Fock, salvo por el operador de intercambio, y con el añadido de la contribución proveniente de E_{xc} . Estas se conocen como las ecuaciones de Kohn-Sham:

$$-\frac{1}{2} \nabla^2 \psi_i - \frac{Z}{r} \psi_i + \int \frac{\psi_j \psi_j}{r_{12}} \psi_i + (\epsilon_i - \epsilon_j) \psi_i = \epsilon_i \psi_i \quad [15]$$

donde son los orbitales moleculares de Kohn-Sham, y es el potencial de intercambio y correlación, la primera derivada funcional de E_{xc} ,

¹¹ Estas ecuaciones son no lineales por la dependencia de E_{xc}

respecto de ψ_i

o de λ_{ij} . En particular el tercer término es exactamente el operador de Coulomb de HF, pero escrito en este caso en función de ψ_j . Las ecuaciones de KS pueden escribirse;

$$-\frac{1}{2} \nabla^2 \psi_i - \frac{Z}{r} \psi_i + \sum_j \psi_j \psi_j + v_{xc} \psi_i = \epsilon_i \psi_i \quad [16]$$

Ahora, los OMs son expresados como una combinación lineal de funciones de base, $\psi_i = \sum_k c_{ki} \phi_k$, funciones Gaussianas-cartesianas, $\phi_k = e^{-\alpha(r-r_k)}$. Entonces se obtiene un sistema de ecuaciones análogo al de Roothaan. Igual que en HF, este sistema se transforma a una base ortonormalizada, y se resuelve con el método de campo auto-consistente (SCF, por sus siglas en inglés), partiendo de un "initial guess" para ψ_i . En la práctica, las ecuaciones [12] y [16] deben

expresarse en términos de las funciones de base. En este sentido, el potencial de intercambio y correlación es calculado en términos de las funciones de base de la siguiente manera:

$$\Sigma_i \int \psi_i(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r}') \psi_i(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \quad [17]$$

Nótese que se evalúa como una sumatoria de integrales sobre todo el espacio, las cuales se calculan por integración numérica, esto debido a lo complicado de las expresiones matemáticas que tienen los funcionales. Por su parte, la contribución de Coulomb involucra integrales de cuatro funciones de base, o de cuatro centros, cuya solución es dada de forma analítica. El número de integrales a resolver es 4^4 , lo que representa una serie cuello de botella computacional. Un modelo de un tubo de nanocarbono puede contener 14,000 funciones de base. El ajuste variacional del potencial de Coulomb es una aproximación matemática en la que se introduce una densidad de electrones aproximada, esta es expresada como una expansión lineal de un conjunto de funciones auxiliares:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^M \psi_i(\mathbf{r}) \quad [18]$$

$\psi_i(\mathbf{r})$ representa una función Gaussiana-Hermitiana. Con el ajuste variacional el escalamiento de la contribución de repulsión electrónica se reduce a $2 \times M$, donde K y M denotan respectivamente el número total de funciones de bases y auxiliares empleadas, respectivamente. El número de integrales a resolver es aproximadamente igual a 3^3 :

$$\int \psi_i(\mathbf{r}) \psi_j(\mathbf{r}) \psi_k(\mathbf{r}) \psi_l(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad [19]$$

El método de Kohn-Sham obtiene la energía núcleo-electrón y electrón-electrón a partir de la electrostática clásica correspondiente a una distribución de carga, más la energía cinética de electrones no interactuantes. Pero es exacto por definición, porque incluye un término que corrige los efectos cuánticos que no son considerados en y en . El principal es el intercambio. Luego, la exactitud del método recae en el modo de calcular . Como en el modelo de Thomas-Fermi, Kohn y Sham (Ira N. Levine, 2001) propusieron adoptar la contribución correspondiente a un gas homogéneo de electrones. Pero en contraste con TF, donde se aproximaba la energía cinética que representa una fracción importante de la , aquí supone una corrección menor. La aproximación usual para calcular es a partir de definir las energías de intercambio y correlación por partícula, y .

La diferencia entre DFT convencional y ADFT es que la primera usa la expresión de la densidad de Kohn-Sham, Ec. (9a), y la segunda utiliza la densidad auxiliar, Ec. (18). La utilización de la densidad auxiliar tiene importancia en la eficiencia computacional, pues el número de integrales a resolver se reduce dramáticamente.

4. FUNCIONALES DE GGA

Los primeros funcionales de intercambio y correlación estaban expresados únicamente por $\tilde{\epsilon}(\rho)$, estos funcionales se clasifican dentro de la aproximación local de densidad (LDA, por sus siglas en inglés). Los funcionales tipo LDA por lo general no reproducen satisfactoriamente las propiedades moleculares. A fin de mejorar los resultados en moléculas, en los 80s se propusieron otros funcionales que además de incluir $\tilde{\epsilon}(\rho)$ también incorporan información acerca de la variación de la densidad con la posición, a través de la dependencia con el gradiente de la densidad $\nabla\rho(\mathbf{r})$. Estos se clasifican como aproximaciones del gradiente generalizado (GGA, por sus siglas en inglés):

$$E = \int \tilde{\epsilon}(\rho, \nabla\rho, \nabla^2\rho) \rho^2 d\mathbf{r} \quad [20]$$

En general Los funcionales tipo GGA son los más usados pues reproducen confiablemente los resultados experimentales. No se conoce una forma exacta y general para $\tilde{\epsilon}$, pero se han identificado algunas condiciones físicas y matemáticas que el funcional correcto debe verificar (e.g., para un sistema de un electrón el intercambio debe cancelarse exactamente con la correlación, como en HF). Existen funcionales diseñados exclusivamente de acuerdo a consideraciones teóricas (por ejemplo PBE), aunque la mayoría incluye parámetros empíricos.

Entre los funcionales de intercambio más usados están el PW91 y el de Becke (B o B88), que incluye un único parámetro b escogido para reproducir la energía de intercambio de Hartree-Fock en diversos átomos. Funcionales de correlación usuales son el LYP, P86 y PW91. Dado que las contribuciones de intercambio y de correlación suelen construirse de manera independiente, puede combinar cualquier par (X, Y) . La combinación PBE96-PBE es ampliamente aplicada en cálculos de DFT de propiedades moleculares.

5. CALCULO ANALITICO DEL KERNEL DE INTERCAMBIO Y CORRELACION PARA FUNCIONALES GGA

La energía electrónica de la ecuación [12] considera a una molécula o nanopartícula en ausencia de campos externos y tampoco considera los espines nucleares. Si las propiedades moleculares dependen de la presencia de estos campos o de los espines nucleares se deben agregar otras contribuciones energéticas a la ecuación [12], las cuales suelen ser muy pequeñas en comparación con la energía total. Entonces las propiedades moleculares se pueden calcular como segundas derivadas de la energía electrónica con respecto a la perturbación, como una serie de Taylor. Por ejemplo, la polarizabilidad eléctrica surge cuando a una molécula se le aplica un campo eléctrico externo, esta se calcula como segundas derivadas de la energía con respecto a un par de componentes cartesianos del campo eléctrico. La derivada de la energía electrónica dada por DFT convencional produce una ecuación que requiere de un método de campo auto-consistente para su solución. Lo más grave es que la segunda derivada funcional de [] tiene un escalamiento de ρ^4 , su evaluación es mediante integración numérica, afectando gravemente su

eficiencia computacional. El cálculo de la polarizabilidad de un fullereno C_{60} puede tomar meses.

Usando la energía electrónica dada por ADFT, las ecuaciones de trabajo tienen inherente una eficiencia computacional remarcable. En primer lugar, las ecuaciones no requieren del método auto-consistente para su solución; en segundo lugar, la segunda derivada funcional de $[]$ tiene un escalamiento de 2 . Estos hechos han permitido el cálculo de un modelo de fullereno C_{540} , en una semana usando 8 procesadores Intel con 16 GB de RAM, un tiempo bastante razonable. La derivada del potencial de intercambio y correlación para funcionales tipo GGA mostrada debajo, Ec. [21], da lugar al kernel GGA en el marco de la ADFT:

$$\delta^2 E_{xc}[\rho] = \int \int \delta \rho(\mathbf{r}) \delta \rho(\mathbf{r}') K_{xc}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \quad [21]$$

En la Ec. [21] hemos considerado que las funciones auxiliares, α y β , dependencia de la perturbación, las propiedades eléctricas y magnéticas se calculan usando funciones auxiliares independientes de la perturbación. La evaluación del kernel requiere la derivada del potencial de intercambio y correlación (segunda derivada funcional de $[]$) con respecto a ρ_α y ρ_β , densidad de electrones α o β , respectivamente. Esto da lugar a un kernel a cuatro contribuciones en $\alpha\alpha$, $\alpha\beta$, $\beta\alpha$ y $\beta\beta$, en el caso de sistemas de capa cerrada solo las primeras dos se calculan. Para facilitar la notación se decide omitir la dependencia espín electrónico de la derivada del funcional de intercambio y correlación. En general, la derivada funcional del potencial de intercambio y correlación, $[]$, es la evaluación de qué tanto varía el funcional en un punto \mathbf{r} cuando hay un cambio infinitesimal en la densidad en este mismo punto \mathbf{r} , por ende se busca la siguiente derivada:

$$\frac{\delta^2 E_{xc}[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r}) \delta \rho(\mathbf{r}')} = \int \int \delta \rho(\mathbf{r}) \delta \rho(\mathbf{r}') K_{xc}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \quad [22]$$

La integral de la derecha en la Ec. [22] es precisamente el kernel GGA en ADFT. Estas expresiones fueron derivadas recientemente. La extensa formulación resultante, para encontrar las ecuaciones de trabajo, se puede discutir en cuatro términos, cada uno corresponde a una sumatoria sobre el número de funciones auxiliares:

$$\delta^2 E_{xc}[\rho] = \delta^2 E_{xc}^{\alpha\alpha} + \delta^2 E_{xc}^{\alpha\beta} + \delta^2 E_{xc}^{\beta\alpha} + \delta^2 E_{xc}^{\beta\beta} \quad [23]$$

Ahora daremos la expresión de estas sumas individualmente ya en su “forma de implementación”, al lector interesado en los detalles de la derivación de cada suma sugerimos que revise la referencia [B. Zuniga Gutierrez, 2015]. El primer término, $\delta^2 E_{xc}^{\alpha\alpha}$, está dado como:

$$\delta^2 E_{xc}^{\alpha\alpha} = \int \int \delta \rho_\alpha(\mathbf{r}) \delta \rho_\alpha(\mathbf{r}') K_{xc}^{\alpha\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \quad [24]$$

La evaluación de requiere de las segundas derivadas de la densidad de la energía de intercambio y correlación, $(\delta^2 E_{xc})$, para el funcional de intercambio y

correlación del tipo GGA que se desee trabajar, PBE96-PBE en este trabajo. Para la segunda suma, , tenemos:

$$\int \int \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\mathbf{r}d\mathbf{r}' \quad [25]$$

En es necesario contar con las segundas derivadas mixtas de respecto de y están disponibles por lo que deben de ser deducidas. La tercera sumatoria, , está dada por:

$$\int \int \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3} d\mathbf{r}d\mathbf{r}' \quad [26]$$

Finalmente, la última sumatoria es:

$$\int \int \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^5} d\mathbf{r}d\mathbf{r}' \quad [27]$$

Las ecuaciones (25), (26), (27) y (28) son las ecuaciones funcionales para el cálculo analítico de los funcionales de intercambio y correlación tipo GGA en el marco de la ADFT. El cálculo del kernel por diferencias finitas implica menos trabajo de implementación pues todo software basado en DFT tiene implementado varios funcionales tipo GGA y sus primeras derivadas funcionales, necesarias para la minimización de la energía. Por otra parte, el cálculo analítico del kernel implica pues la necesidad de hacer las segundas derivadas de (7) e implementarlas, las expresiones son extensas y complejas, para cada funcional en específico. Por supuesto, la gran ventaja de la formulación analítica del kernel es la eficiencia computacional inherente. Podemos decir que el número de integrales a resolver se reduce a la mitad con la formulación analítica.

6. CALCULOS PARA EL FUNCIONAL PBE

Una vez establecidas las ecuaciones de trabajo del kernel analítico en ADFT tenemos que seleccionar los funcionales GGA de interés para determinar e implementar sus segundas derivadas. Uno de los funcionales GGA de más uso en el cálculo de propiedades eléctricas y magnéticas es la combinación del funcional de intercambio PBE96 y el de correlación PBE. Las segundas derivadas son presentadas a continuación:

6.1. Correlación PBE

Comenzamos con la expresión del funcional de la energía de correlación de Perdew-Becke-Erhensorf (PBE) (J. P. Perdew, 1996) en la forma:

$$E_c = \int \int \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\mathbf{r}d\mathbf{r}' + \int \int \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3} d\mathbf{r}d\mathbf{r}' + \int \int \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^5} d\mathbf{r}d\mathbf{r}' \quad [28]$$

$\rho(\vec{r})$ denota la densidad de energía de intercambio y correlación de un funcional tipo LDA, solo depende de $\rho(\vec{r})$. El funcional PW92 tipo LSD fue seleccionado como $\rho(\vec{r})$, cuyo kernel ya estaba implementado. Las derivadas correspondientes a $\rho(\vec{r})$ no estaban reportadas previo a este trabajo. La expresión de $\rho(\vec{r})$ está dada por

$$\rho(\vec{r}) = \frac{3}{4} \rho(\vec{r}) \left\{ 1 + \frac{1}{2} \left[\frac{1 + \sqrt{1 + 48 \beta^2 \rho(\vec{r})}}{1 + \sqrt{1 + 48 \beta^2 \rho(\vec{r})}} \right] \right\} \quad [29]$$

Para facilitar la notación la Ec. [38] es reescrita de la siguiente forma:

$$\rho(\vec{r}) = \frac{3}{4} \rho(\vec{r}) \left(\rho(\vec{r}) \right) \quad [30]$$

$\rho(\vec{r})$ es una función que depende de

la polarización de espín relativa =

$$\frac{\rho_\uparrow(\vec{r}) - \rho_\downarrow(\vec{r})}{\rho(\vec{r})}$$

$$\rho(\vec{r}) = \frac{1}{2} \left(\rho(\vec{r}) + \rho(\vec{r}) \sqrt{1 + 48 \beta^2 \rho(\vec{r})} \right) \quad [31]$$

tiene dependencia tanto de $\rho(\vec{r})$ y $\rho(\vec{r})$:

$$\rho(\vec{r}) = \frac{1}{2} \left(\rho(\vec{r}) + \rho(\vec{r}) \sqrt{1 + 48 \beta^2 \rho(\vec{r})} \right) \quad \text{con} \quad \rho(\vec{r}) = \frac{1}{2} \left(\rho(\vec{r}) + \rho(\vec{r}) \sqrt{1 + 48 \beta^2 \rho(\vec{r})} \right)$$

Y es donde la dependencia en el gradiente de la densidad se encuentra:

$$\rho(\vec{r}) = \frac{1}{2} \left(\rho(\vec{r}) + \rho(\vec{r}) \sqrt{1 + 48 \beta^2 \rho(\vec{r})} \right) \quad \text{con} \quad \rho(\vec{r}) = \frac{1}{2} \left(\rho(\vec{r}) + \rho(\vec{r}) \sqrt{1 + 48 \beta^2 \rho(\vec{r})} \right) \quad [32]$$

Las primeras derivadas de $\rho(\vec{r})$, Ec. [37] son:

$$\frac{\partial \rho(\vec{r})}{\partial \rho(\vec{r})} = \left\{ \frac{\partial \rho(\vec{r})}{\partial \rho(\vec{r})} + \frac{\partial \rho(\vec{r})}{\partial \rho(\vec{r})} \right\} + \left\{ \frac{\partial \rho(\vec{r})}{\partial \rho(\vec{r})} + \frac{\partial \rho(\vec{r})}{\partial \rho(\vec{r})} \right\} \frac{\partial \rho(\vec{r})}{\partial \rho(\vec{r})} \quad [33]$$

Aquí denota cualquier componente de espín, o $\rho(\vec{r})$. Mientras que las segundas derivadas de son:

$$\frac{\partial^2 \rho(\vec{r})}{\partial \rho(\vec{r})^2} = \left\{ \frac{\partial^2 \rho(\vec{r})}{\partial \rho(\vec{r})^2} + \frac{\partial^2 \rho(\vec{r})}{\partial \rho(\vec{r})^2} \right\} + \left\{ \frac{\partial^2 \rho(\vec{r})}{\partial \rho(\vec{r})^2} + \frac{\partial^2 \rho(\vec{r})}{\partial \rho(\vec{r})^2} \right\} \frac{\partial \rho(\vec{r})}{\partial \rho(\vec{r})} \quad [34]$$

Respecto al gradiente tenemos que:

$$\frac{\partial \rho(\vec{r})}{\partial \rho(\vec{r})} = \frac{\partial \rho(\vec{r})}{\partial \rho(\vec{r})} + \frac{\partial \rho(\vec{r})}{\partial \rho(\vec{r})} \quad [35]$$

Y para la segunda derivada:

$$\frac{\partial^2 \rho(\vec{r})}{\partial \rho(\vec{r})^2} = \frac{\partial^2 \rho(\vec{r})}{\partial \rho(\vec{r})^2} + \frac{\partial^2 \rho(\vec{r})}{\partial \rho(\vec{r})^2} \quad [36]$$

6.2. Intercambio PBE

Comenzamos con la expresión del funcional de intercambio en la forma:

$$E_x = -\frac{1}{2} \int \frac{\rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \quad [37]$$

Con:

$$E_x = -\frac{1}{2} \int \frac{\rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' = -\frac{1}{2} \int \rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}') \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \quad [38]$$

Y:

$$E_x = -\frac{1}{2} \int \frac{\rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' = -\frac{1}{2} \int \rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}') \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \quad [39]$$

$$E_x = -\frac{1}{2} \int \frac{\rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' = -\frac{1}{2} \int \rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}') \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \quad [40]$$

Las primeras derivadas de E_x son:

$$\frac{\delta E_x}{\delta \rho(\mathbf{r})} = -\frac{1}{2} \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' = -\frac{1}{2} \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' \quad [41]$$

Mientras que las segundas derivadas son:

$$\frac{\delta^2 E_x}{\delta \rho(\mathbf{r}) \delta \rho(\mathbf{r}')} = \frac{1}{2} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \quad [42]$$

Respecto al gradiente tenemos que:

$$\frac{\delta E_x}{\delta \rho(\mathbf{r})} = -\frac{1}{2} \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' = -\frac{1}{2} \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' \quad [43]$$

Y para la segunda derivada:

$$\frac{\delta^2 E_x}{\delta \rho(\mathbf{r}) \delta \rho(\mathbf{r}')} = \frac{1}{2} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \quad [44]$$

Por último la derivada conjunta:

$$\frac{\delta E_x}{\delta \rho(\mathbf{r}) \delta \rho(\mathbf{r}')} = \frac{1}{2} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \quad [45]$$

7. DETALLES DE COMPUTO

Las derivadas mostradas anteriormente para la formulación del kernel analítico de los funcionales de intercambio y correlación tipo GGA dentro del marco de la ADFT fue implementado en el código LCGTO-DFT de deMon2k (A. M. Koster 2011). Los cálculos de polarizabilidades de alcanos lineales son realizados con el funcional PBE (J. P. Perdew, 1996), en combinación con las funciones de base

DZVP y el conjunto de funciones auxiliares GEN-A2. (P. Calaminici, 2007). Geometrías optimizadas de los alcanos son utilizadas en los cálculos, las optimizaciones se realizaron a nivel DFT. Las energías de intercambio y correlación, potenciales y kernels fueron evaluados por integración numérica, utilizando redes de adaptación. (Thomas Bredow, 2001). La tolerancia por defecto de deMon2k es de 10^{-5} u.a. Todos los cálculos fueron desarrollados en un equipo Intel R XeonTM CPUs E5-2665 de 2.4 GHz y 2GB de RAM.

8. VALIDACIÓN

La polarizabilidad, denotada como α , es la propiedad o capacidad de una molécula de inducir un dipolo magnético como respuesta a la aplicación de un campo eléctrico. Hemos calculado dicha propiedad en una serie de alcanos lineales, mostrados en la tabla de abajo, usando la formulación del kernel numérico, diferencias finitas, y nuestra implementación del kernel analítico. La Tabla I muestra que el valor de α obtenido con cualquier formulación es el mismo, nuestra implementación es correcta, pero el tiempo de cómputo del kernel es varias veces menor con la formulación analítica.

Tabla I. Polarizabilidades de alcanos lineales calculados con la metodología PBE/DZVP/GEN-A2

	(a.u.)		Tiempo del kernel (s)	
	Numérico (FD)	Analítico	Numérico (FD)	Analítico
<i>C₅H₁₂</i>	59.72	59.72	94.6	16.7
<i>C₁₅H₃₂</i>	181.39	181.39	1491.4	405.3
<i>C₂₀H₄₂</i>	243.03	243.03	1797.3	403.0
<i>C₂₅H₅₂</i>	304.81	304.81	1945.4	1385.9
<i>C₃₀H₆₂</i>	366.65	366.64	3297.0	1041.7
<i>C₃₅H₇₂</i>	428.57	428.57	3431.6	2023.2
<i>C₄₀H₈₂</i>	490.40	490.40	3593.8	2292.0
<i>C₄₅H₉₂</i>	552.24	552.24	6968.2	2898.8

Nuestros cálculos fueron realizados en un cúmulo de cómputo cuyos procesadores no son homogéneos. Algunos nodos tienen más capacidades que otros, por lo que los tiempos de cómputo varían según el procesador asignado por el sistema de colas. Aunque el escalamiento queda oculto, aún así siempre nuestro nuevo kernel analítico requiere menos tiempo. Estudios sistemáticos del kernel en modelos de fullerenos demuestran que la formulación analítica es cuando menos 2 veces más rápida.

9. CONCLUSIÓN

Las ecuaciones funcionales para el cálculo analítico del kernel GGA con la ADFT como referencia mejoran el rendimiento computacional de la ADFT reduciendo el número de integrales a calcular. Con esta formulación el tiempo del CPU para los cálculos del kernel se ve reducido en un factor de al menos 2 en comparación con la

implementación tradicional de diferencias finitas en el límite de sistemas de gran tamaño. Esta mejora es particularmente importante para sistemas más compactos, como fullerenos donde el kernel GGA tomaría más del 35 % del tiempo total de cómputo. Las formulas generales del cálculo analítico del kernel GGA en la ADFT muestran que la nueva cantidad necesaria, comparada con la implementación del potencial GGA, son las segundas derivadas de la función (ζ). Estas derivadas pueden ser complicadas de calcular pero se puede facilitar con el uso de paquetes de algebra simbólica. Por lo tanto está es una contribución más hacia el cómputo eficiente de propiedades eléctricas y magnéticas de sistemas con cientos de átomos.

10. AGRADECIMIENTOS

Este trabajo fue desarrollado gracias al apoyo y disposición del Doctor Bernardo Zúñiga quien a pesar de los inconvenientes siempre confió en su alumnado y como buen ingeniero busco alternativas que permitieron la continuación de este y otros proyectos “Gracias”.

11. REFERENCIAS

1. **A. M. Koster, G. Geudtner, et al.** (2011). *deMon2k, Version 3; The deMon Developers*, Distrito federal, México.
2. **B. Zuniga-Gutierrez, Anderas M. Köster,** (2015): *Analytical GGA exchange-correlation kernel calculation in auxiliary density functional theory*, Molecular Physics, Reino Unido.
3. **David Young,** (2001). *Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems.*, New York, EUA.
4. **Ira N. Levine,** (2001). *Química cuántica*, New York, EUA.
5. **J. P. Perdew, K. Burke, Ernzerhof** (1996). *Generalized Gradient Approximation Made Simple*, American Physical Society, EUA.
6. **P. Calaminici, F. Janetzko, A. M. Köster,** (2007). *Density functional theory optimized basis sets for gradient corrected functionals: 3d3d transition metal systems*, American Physical Society, EUA.
7. **P. Calaminici, Victor-Daniel Domínguez-Soria,** (2014). “Auxiliary Density Functional Theory: From Molecules to Nanostructures”. *Handbook of Computational Chemistry pp.573-610*, Distrito federal, México.
8. **R. G. Parr, W. Yang,** (1989). *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*, New York, EUA.
9. **Thomas Bredow, Gerald Geudtner, Karl Jug,** (2001). *MSINDO parameterization for third-row transition metals*, New York, EUA.

CAPÍTULO 10

**-Ingeniería en Informática y
Computación-**

DEVELOPMENT OF A MOBILE APPLICATION FOR DISPLAYING AIR POLLUTION IN CITIES

KLOPČIČ VID ⁽¹⁾, HIRCI NEJC ⁽²⁾

Mentors: Alenka Mozer ⁽³⁾, David Kocman ⁽⁴⁾

⁽¹⁾ Gimnazija Vič, Ljubljana, Slovenia, nhirci@gmail.com

⁽²⁾ Gimnazija Vič, Ljubljana, Slovenia, klopcic.vid@gmail.com

⁽³⁾ Gimnazija Vič, Ljubljana, Slovenia, alenka.mozer@guest.arnes.si

⁽⁴⁾ Josef Stefan Institute, Ljubljana, Slovenia, david.kocman@ijs.si

SUMMARY:

Air quality affects our health more than most people think. Due to a growing industry, increased traffic and high population density, in big cities there are many regions with constantly exceeded permitted concentrations of pollutants. Scientists from different European cities initiated CITI-SENSE project. The goal of the project is to develop a sensor-based citizens' observatory community for improving quality of life in cities. Ljubljana, the capital of Slovenia, is one of the nine CITI-SENSE project locations where actions are taking place on a local level.

A group of Gimnazija Vič students has been involved in CITI-SENSE project from the very start. Students are working hand in hand with the scientist from Josef Stefan Institute (JSI, a leading Slovenian science research institution is coordinating project activities in Ljubljana). Initially JSI provided five stationary air quality measuring units for the city of Ljubljana. Units were based on commercially available low-cost micro sensor packs. In addition, researchers at JSI developed a portable measuring units.

Students are developing a centralized open source platform for android systems and PCs that average citizen can easily understand; air quality parameters are visualized by effective color schemes, which are displayed as layers over Google maps. Application will also provide interpretations of the measurements in accordance to the Air Quality Index (AQI).

The application will be accessible from any modern device, whether from a native app or via web interface. On areas with several measuring stations, AQI heat maps of pollution will be generated. Our Android app will also support portable measuring units connected over low energy Bluetooth. We designed our application to interpret the data from the available measuring units, but it also enables inclusion of data/measurements from any amateur weather station as well as any commercially available air monitoring products.

As of autumn 2015 the application is available on Google play to a limited number of users that are providing us with some feedback about the general functionality and possible flaws of the application. After all the final tests are made and major bugs resolved the application will be available to the public in summer 2016.

KEYWORDS: Air pollution, mobile application, AQI heatmaps

1 INTRODUCTION

Due to growing industry, traffic and high population density, in big cities there are many regions with constantly exceeded permitted concentrations of pollutants. Even more common are regions, where pollution is occasionally exceeding norms because of traffic spikes or weather effects (e.g. air inversion in valleys or basins surrounded by mountains). The problem is that most of the people are not aware of effects of longterm exposure to overly polluted air. A study made in 2012 reported that around 7 milion people died as a result of air pollution exposure. This was largely due to the fact that long exposers can cause or deteriorate many diseases. Regions that are the most endangered are low- and middle- income countries in South-East Asia and Western Pacific Regions.

(WHO 2012) In Slovenia, concentrations of PM_{2.5} and PM₁₀ (particulate matter – small mostly solid particles) exceed permitted levels. (ARSO 2013) The main source of PM_{2.5} and PM₁₀ pollution are traditional fireplaces used in home households. Currently, there are two air quality stations in Ljubljana, which is hardly enough to see the actual quality of air. Their first task would be to establish a representative sample of measuring locations for more accurate air quality analysis; by more air quality stations we would also get more information on the most polluted areas in Ljubljana. While we were searching for additional information about the mentioned issues, we noticed the lack of easily understandable data for average users, thus we started designing a concept for a mobile application (based on Android operating system) for an accurate, yet simply explicable air pollution visualization.

1.1 CITI-SENSE PROJECT

CITI-SENSE is a European project that is developing a sensor-based citizens' observatory community for improving quality of life in cities. An important goal of the project is to ensure an easy community feedback, which will have a large impact on the development of the project. (CITI-SENSE 2012) Plans for the near future are to spread the air quality measuring systems in numerous public institutions and to develop a user-friendly sensor unit, which will be connected to the network of stations. Within the project there will be around 20-30 outdoor measuring units installed in each city.

1.2 RESEARCH GOAL

A group of Gimnazija Vič students, led by the authors of this research project, has been involved in CITI-SENSE project since the beginning; therefore, we were the first ones to get access to measurements. From the very start, this group of students was very involved, working hand in hand with the scientist at JSI. As a result, our school was chosen as the reference school for all of the schools involved in the CITI-SENSE project in Ljubljana. In the pilot phase of the project, JSI provided five stationary measuring units for the city of Ljubljana. Units were composed of low-cost commercially available electrochemical sensor packs. In addition to those units, researchers at JSI developed a portable measuring unit.

Based on the data from these units, we started developing a centralized open source platform for mobile phones/tablets and PCs that average citizen can easily understand. The application is designed in a way that air quality parameters are visualized by effective color schemes displayed as layers over Google maps. Application will also provide interpretations of the

measurements in accordance to the air quality index (AQI). It will be accessible from any modern mobile device, whether from a native app or via web interface. Our Android and iOS app will also support portable measuring units connected over low energy Bluetooth 4.0. With the portable unit, the user will get accurate measurements at any location he is staying during the day. We designed our application to interpret the data from the available measuring units, but it also enables inclusion of data/measurements from any amateur weather station as well as commercially available air monitoring products (e.g. Netatmo, Cubesensors). With this application, we want to minimize harmful effects of pollution on our health by raising public awareness. We also want to give citizens an option to check official measurements with alternative measurements from different locations. Application will be entirely open source and released under the GNU Lesser General Public License (LGPL), which allows modifications of the application by the community.

2 AIR POLLUTANTS

2.1 TROPOSPHERIC OZONE AS POLLUTANT

In the stratosphere (second layer of our atmosphere from the ground up) ozone is formed with the photolysis of oxygen, followed by a reaction between free oxygen atom and oxygen. Due to intense sunlight the creation and destruction of ozone can happen very quickly. The balance between the two is preserved under natural conditions. Although ozone level in the stratosphere is crucial to protect life on Earth, when it present in the lowest layer of atmosphere, that is in troposphere, it can have deadly effect on our health.

Ozone can cause a variety of issues such as, chest pain, heavy breathing, scars on lung tissues and it can worsen a lot of lung diseases like bronchitis. Because a child's lungs aren't as immune to ozone as adults, children are much more susceptible to higher ozone concentrations. Unfortunately, a lot of countries around the globe exceed the limited concentration. (EPA 2015) Under the Slovenian legislation of the assessment of air quality, the given limit for ozone concentration in a 8-hour period is $120 \mu\text{g}/\text{m}^3$. (Government of the Republic of Slovenia 2011) Tropospheric ozone or ground level ozone forms in a reaction involving NO_x and VOC (volatile organic compounds) in the presence of heat and sunlight. That is why we also need to be careful about the concentration of these two pollutants. Ozone can also be formed in the lower atmosphere with the photolysis of nitrogen oxide (NO_2), followed by a similar reaction as in the stratosphere.

However, natural tropospheric ozone is not as common and does not really affect ozone concentration in the air. Major sources of NO_x and VOC are industrial facilities, electric utilities and motor vehicles. This is especially noticeable early in the morning due to rush hour traffic. Other parameters such as humidity and temperature, can also affect the concentration of ozone in air. (Carr, 2007) By reactions with NO_2 , ozone is decomposed and deposited to the ground. Some areas around the globe are more commonly exposed to inversion, which consequentially leads to an increased concentration of smog, which is a mixture of common air pollutants. Some pollutants that affect the production of ozone are also among them. When researching this kind of environments, the researchers discovered some quite unusual information. According to Nature's article in these special situations,

ozone production occurs at lower NO_x and much larger VOC concentrations than does its summertime urban counterpart. In this particular situation, ozone is produced from carbonyl photolysis in an oil and gas basin. (Edwards, Peter M 2014) This information was quite relevant to us, since meteorological inversion very often occurs in our capital city Ljubljana.

2.2 SULFUR DIOXIDE

When any materials or compounds that contain sulfur are burned, the sulfur is oxidized - it forms chemical bonds with oxygen and so we get sulfur dioxide as a product of that reaction. Sulphur dioxide is a colourless, toxic gas, which has an irritating smell. Sulfur dioxide mostly originates from fuel combustion and industrial processes. While it also appears in nature at the eruptions of volcanos or large wildfires, this source of emissions is quite smaller than that of humans. The biggest origin of sulphur dioxide production are coal powered power plants, which are still one of the main and the biggest sources of electricity in the world; they produce around 3.5 million tons of sulphur dioxide per year each.

(EPA, 2015) Sulphur dioxide is also the main culprit behind the appearance of acid rain, besides nitric oxide. It forms sulphuric acid through three basic reactions. Acid rain has a big effect on forests and water organisms, since it can lower pH of water to almost 4, which can cause death on a large number of aquatic species. It does not have a large impact on human health, since it cannot enter our organism in most cases. (EPA, date not given) Under the Slovenian legislation of the assessment of air quality, the given limit for the concentration of sulphur dioxide in a 24-hour period is $125 \mu\text{g}/\text{m}^3$. (Government of the Republic of Slovenia, 2011)

According to the data from Slovenian governmental institution ARSO (Slovenian Environment Agency), there are three critical regions in Slovenia where SO_2 values are regularly exceeded. Major sources of pollution in these areas are thermal power plants and big industrial facilities, which are not as common in other regions of our country.

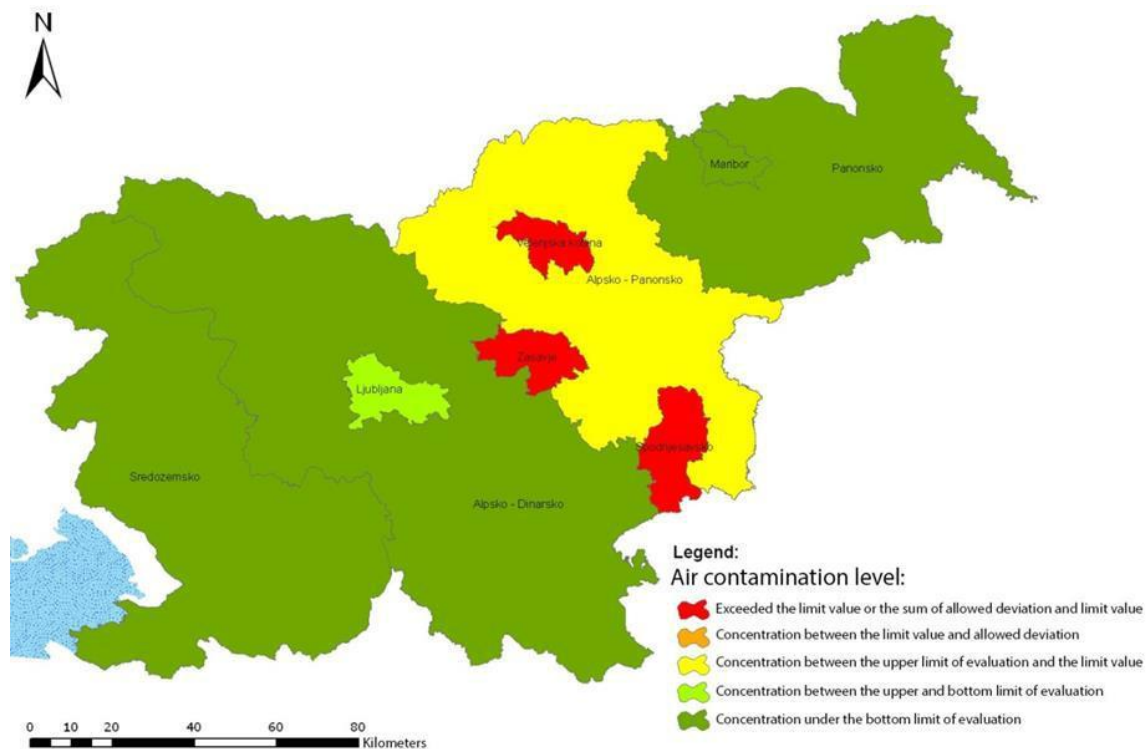


Figure 1: Map of sulfur dioxide pollution

2.3 PARTICULATE MATTER PM₁₀ AND PM_{2.5}

Particulate matter pollutants (PM) are small solid particles present in air; they originate from different sources. We divide this pollutant by size, mostly measuring two main categories: bigger particles (PM₁₀) in the size of 10 µm, and smaller ones (PM_{2.5}) in the size of 2.5 µm. The size is not the only difference between the two. While PM₁₀ are mostly composed of smoke, dirt and dust from factories, farming, and roads, molds, spores, and pollen; however, PM_{2.5} are usually toxic organic compounds and heavy metals, thus they are much more dangerous. Smaller and lighter particles can stay in the air for up to days or weeks, opposite the bigger ones, which land on the ground in a few minutes or hours.

In terms of length, PM_{2.5} can travel only from 100 meters to 30 kilometers, when the smaller ones can stay in the air, even after reaching more than 100 kilometers. Because of the smaller size the PM_{2.5} can also enter our lungs more easily and travel deeper, than PM₁₀. (Air Info Now, date not given)

Higher concentrations of particulate matter, especially fine particles can cause premature death in people with heart or lung disease, nonfatal heart attacks, irregular heartbeat, aggravated asthma, decreased lung function, and increased respiratory symptoms, such as irritation of the airways, coughing or difficulty breathing. People that already have a heart or lung condition and children are much more susceptible to higher concentrations of particulates. Fine particles (PM_{2.5}) are the main cause of reduced visibility (haze) in parts of some countries. (EPA 2013)

2.4 NITROGEN OXIDES

Nitrogen dioxide (NO₂) is one of a group of highly reactive gases known as oxides of nitrogen, or nitrogen oxides (NO_x). Other nitrogen oxides include nitrous acid and nitric acid. NO₂ forms quickly from emissions from cars, trucks and buses, power plants, and off-road equipment. (EPA 2012) Nitrogen dioxide has an especially high effect on plants, since it can cause severe damage on the leaves and reduce growth. It also plays a very large role in the general air quality.

Nitrogen dioxide is involved in reactions forming ground level ozone, it is one of the main components of smog and it has a major impact on the Greenhouse effect and global warming. (Clean Air Strategic Alliance, 2004 – 2007) Nitrogen oxides (NO_x) are also involved in ozone hole, and springtime polar tropospheric ozone depletion processes in the stratosphere; however, this is not a focus of this project. Under the Directive 2008/50/ec of the European Parliament (2008) on ambient air quality and cleaner air for Europe as well as under the Slovenian legislation of the assessment of air quality the given limit for the concentration of nitrogen dioxide in a 1-hour period is 200µg/m³.

(European parliament, 2008)(Government of the Republic of Slovenia, 2011) This is however only one of the impacts of nitrogen dioxide on air quality. Another very important aspect of increased concentrations of NO₂ is its reactions with water. It can form nitric acid (HNO₃), which then comes down into soil with rain, snow, sleet, hail or fog. Like sulphuric acid, it has a large impact on water ecosystems, like lakes and rivers. Besides that, studies have also shown that it has an effect on forest, crops, materials and buildings. There is also a possibility

for the oxides to interact with other objects, even when there is no precipitation, which is called dry deposition. (Clean Air Strategic Alliance, 2004 - 2007)

2.5 CARBON MONOXIDE, BLACK CARBON

Carbon monoxide (CO) is a colourless, odourless gas emitted from combustion processes. CO can cause harmful health effects by reducing oxygen delivery to the body's organs (like heart and brain) and tissues. At extremely high levels, CO can cause death. (EPA 2012) Because it is more likely for it to reach high concentrations indoors, it is good to have a simple carbon monoxide detector in every house that has a furnace or a fireplace. Carbon monoxide is formed in processes involving burning; however, it is more common for it to appear, when there is a lack of oxygen during burning.

Even though this gas is not deadly at low concentrations it can still poison your body, which causes loss of balance, vision problems, memory problems and eventual loss of consciousness. The reason why carbon monoxide can enter our blood so easily is that it is much better at getting into haemoglobin instead of oxygen. Because of this people with existing cardiovascular diseases, babies, small children and pregnant mothers tend to be more susceptible to the changing concentrations of carbon monoxide. If not treated in time poisoning with this gas can also lead to severe brain damage, heart damage, urinary incontinence, and eventually dead. (Nordqvist 2009) Under the Slovenian legislation of the assessment of air quality, the given limit for the concentration of carbon monoxide in an 8-hour period is $10000 \mu\text{g}/\text{m}^3$. (Government of the Republic of Slovenia 2011)

Black carbon usually represents from 5% to 40% of PM₁₀. Black carbon can also in large number of cases be considered as a much better indicator of air quality effects on our health, due to the fact that it is much more strongly connected to the sources of pollution. Main sources of black carbon pollution are intense traffic and biomass burning. Concentrations of black carbon inside schools and hospitals is unfortunately usually as bad as outdoors, which is mostly due to lack of air-conditioning units. (Močnik, 2014)

Another important factor we need to take into account is the effect of black carbon on climate changes. It might be only in small quantities, but it can easily absorb lots of sunlight, which warms up the atmosphere and limits the quantity of sunlight reaching Earth's surface.

Effects of carbon monoxide is easily comparable to effects of carbon dioxide and is as such one of the main culprits behind global warming. Carbon dioxide heats up Earth with power of $1,6 \text{ W}/\text{km}^2$, while black carbon heats up our planet with power of $1,1 \text{ W}/\text{km}^2$. The largest difference between the two is their life span. Carbon dioxide usually stays in our atmosphere for 100 years, while black carbon lasts only one week to a month. (Močnik, 2014)

3 MATERIALS AND METHODS

3.1 SENSOR UNITS

3.1.1 AQmesh

The AQmesh from Geotech is a multi-sensor air quality monitoring device that has been designed as a high accuracy, indicative alternative to traditional air quality measuring stations. The main functionality of the device is to identify, alert and log air quality events that may pose risks to human health and the environment. The device uses nanotechnology sensors to continuously measure levels of air pollutants, transmitting the data over the internet for cloud-based storage and processing. The sensors can operate as a stand-alone monitoring station or can be linked to form a network. Either way, the data they

transmit is analyzed and widely available through a variety of channels including social networking sites and mobile phone alerts. Sensors are measuring ozone, nitrogen oxide, , relative humidity, temperature and pressure. (Geotech, date not given)



Figure 2: Outdoor AQmesh unit

3.1.2 Vesna portable unit

Vesna is a portable sensor unit, which was developed by the researchers at Jozef Stefan Institute and is meant to serve as a publicly accessible small air quality measuring device. It will measure carbon monoxide, nitrogen dioxide, ozone, hydrogen sulphide, nitrogen oxide, sulphur dioxide and volatile organic compounds. It is possible to add an extra particulate matter sensor connected with a cable. A hardware unit, also developed by the experts at Josef Stefan Institute, takes care of the communication between the sensors and the smartphone. The station is connected to a smart phone through Bluetooth 4.0 connection.

3.1.3 Netatmo sensor unit



Figure 3: Netatmo weather unit

Netatmo is a company that specializes in electronics and has made a weather station that is accessible and friendly to any user. In addition, we received one weather station and an extra indoor sensor unit. In one package, there is normally one indoor station unit that is connected to a network and works as a mediator for all the other units in your web. Netatmo has also created a very simplified way to see the measurements of each unit. When you connect the main station to the wireless

network, you simply connect all other stations to this one and you are finished. Netatmo has also made a mobile app for these units in order for customers to have an easy way of managing outside access to their unit, seeing measurements of each unit and sharing all the data to Netatmo weather map, which connects all the Netatmo outdoor sensor units in a grid, visible on a world map. The problem is that the outdoor sensor units only measure temperature, humidity, pressure, and none of the main air pollutants. (Netatmo, 2012)

4 MOBILE APPLICATION

4.1 ANDROID AND WEB APPLICATION DEVELOPMENT TOOLS

In the development process, we were using many tools, which vastly increased our productivity. For programming the Android app we used Android Studio. Android Studio is the official IDE from Google, based on JetBrains IntelliJ IDEA. Its key features are automated Gradle build system, rich layout editor for theme editing and code templates for common app features (Google, date not given). Web app was written in Sublime Text editor and was debugged with the Firebug extension for Mozilla Firefox browser. Icons and other graphics were made using Adobe Photoshop CC. For version control, we are using Git. It allows us to view and restore changes from any point in time, which is crucial for keeping the project manageable. Git is also used by the largest corporations like Google, Facebook and Microsoft. (Git, 2015)

4.2 DEVELOPMENT OF THE APPLICATION

4.2.1 *Android app components*

4.2.1.1 Activities

An activity represents a single screen with a user interface. For example, in our app there are separate activities for data visualization on a map, analysis of past measurements on graph, raw sensor readings, information about pollutants, and settings. Although the activities work together to form a cohesive user experience in the email app, each one is independent of the others. As such, a different app can start any one of these activities (if the app allows it). When user will want to share measurements via email or social network, our app will call external activity and pass the data for sharing. (Google, 2015)

4.2.1.2 Services

A service is a component that runs in the background, without user interface. They perform long-running operations without blocking user interaction with an activity. CITI-SENSE app has one service, which takes care of communication with the server and portable measuring station. It sustains connection when the smartphone is put to sleep or user minimizes the app. To prevent battery drain, data are collected in specified time interval. Service can communicate with activities using intents, Android Interface Definition Language, or using the service object itself. (Google, 2015)

4.2.1.3 Content providers

A content provider manages a shared set of app data. You can store the data in a SQLite database, on the web, in the file system or any other persistent storage location your app can

access. We are using SQLite database for saving measurements if the phone is offline. The recorded data is later uploaded to the web server, where becomes available to all users. Through our content provider, anyone can access collected data from an external application. (Google, 2015)

4.2.1.4 Broadcast receivers

A broadcast receiver is a component that responds to system-wide broadcast announcements. Many broadcasts originate from the system. Main receiver in our app is responsible for triggering data collection in specified time interval. Broadcasts are triggered by the system's alarm manager. Although broadcast receivers do not have a user interface, they may create a status bar notification to alert the user when a broadcast event occurs. Broadcast receiver is intended to do a very minimal amount of work and is usually just a gateway to other components of the app. (Google, 2015)

4.2.2 *Web server*

The web server is responsible for storing and serving measurements using MySQL database. With all data in one place, we can generate heat maps of pollution, which are served back to the user. It also hosts a web app, which is available through server domain name. Web app is written in HTML5 in combination with CSS stylesheets and JavaScript. We also offer an application programming interface (API) for access to raw measurements in JSON format. All of data are safely transmitted over encrypted HTTPS protocol.

4.2.2.1 Apache server

The Apache server project is collaborative software development effort aimed at creating a robust, commercial-grade, featureful and freely available source code implementation of an HTTP (Web) server. (Apache, 2015) Currently it is the most commonly used web server, used by many big sites, including Apple, BBC and Microsoft (Sharwood, 2015). A target platform for Apache web server is Linux, but it also supports Windows systems. To support Django web framework, we are using mod_wsgi module. It can host any Python application, which supports the Web Server Gateway Interface (WSGI) (Dumpleton, date not given). WSGI is a specification that describes how web server communicates with web applications, and how web applications can be chained together to process one request.

4.2.2.2 Django web framework

Django is a high-level Python Web framework, which follows a pattern called Model View Controller (MVC). MVC is a way of developing software so that the code for defining and accessing data (the model) is separate from request-routing logic (the controller), which in turn is separate from the user interface (the view). This approach minimizes the amount of written code, because you can easily reuse it in other parts with similar functionality. (Holovaty & Moss, 2009)

4.2.2.3 MySQL database

MySQL is an open source relational database management system. It offers a very high level of performance and reliability and runs on virtually all platforms, including Linux, Windows and UNIX. It supports many data types. When our user base will grow, we will have to store

and retrieve a lot of information. MySQL's performance and scalability make it the best choice for our project. (Oracle Corporation, date not given)

5 RESULTS: CITI-SENSE APPLICATION

5.1 MOBILE APPLICATION FEATURES

Application's purpose is to show levels of air pollution in self-explanatory way. It has live air pollution map, displayed as a layer on Google Maps, alarms and guidelines in case of extreme levels of pollution, location based air quality tracing, advanced raw data analyzer for experts and short description of every pollutant. The app will also collect and forward data from portable measuring unit. In order to prevent the battery drain, collected measurements are cached offline and sent to the server in a specified time interval (e.g. 15 minutes). Every time the pollution level exceeds safe limit, app notifies the user and shows guidelines how to minimize harmful effects. Notification is triggered by our server using Google Messaging API.

5.1.1 Information on pollutants

Under this category, we want to inform user on all of the pollutants measured with the sensor units. We made an effort to include all of the important information and minimize amount of unnecessary theory. We focused especially on the health effects. In addition, we will also show a list of the most common sources of the selected pollutant, which will help users to choose, which areas they have to avoid.

5.1.2 Visualization on map

This is the main feature of our application; here is displayed an overlay of air humidity as a layer over Google Maps. The app will create an overlay based on calculations according to AQI. A network of stationary sensor units will send all data to a common server. Server will predict the transitions between the sensor units on the map using spline interpolation, therefore creating the overlay image. Map accuracy depends on the density of measuring stations. The user will be able to view overlay for a single pollutant or an overlay showing overall contamination.

5.1.3 Analysis of the measurements

In order to have a more accurate view on the actual exceeded values of a certain pollutant we developed a section, for displaying measurements on graphs. The user

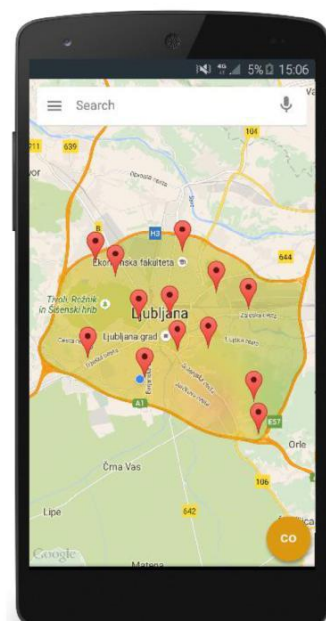
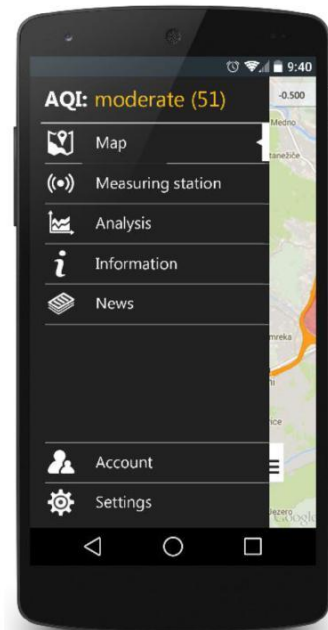


Figure 5: Map of CO pollution

will be able to select data from a specified time period, which will be plotted on a graph. Observing pollution as function of time can be very interesting and meaningful information, because you can see repeating pattern of pollution (e.g. traffic spikes).

5.1.4 Measuring stations

For more advanced users, we created a simple way to download measurements of an individual unit in JSON or XML format. Access to raw values of pollutants will be available from any unit within our app. Here, users can connect to the remote measuring unit Vesna and add other supported measuring stations.

5.2 WEB APPLICATION FEATURES

For easy access from computer, we have also developed web application. Anyone with an internet connection can browse through past measurements, see real time pollution overlays and share their findings on social media. Users with an account can also add their own measuring units using our API and see measurements uploaded from portable measuring unit. Recommended type of submitted data is JSON, but we will add support for any additionally requested plain-text format.

5.3 DISTRIBUTION ON GOOGLE PLAY

In summer 2015 we decided that the application for Android based systems is more or less finished, so we proceeded to the closed beta testing phase of our application. We allowed a specific number of users from our school to download the application and test its functionality and possible bugs. Once our beta testers have opted-in and installed our app using the link we provided, they received automatic updates that would follow their feedback in a matter of few minutes. Hopefully most of possible issues on a variety of devices will be resolved this way, before we make the app available to the public. If all goes well, we will have a completely working application by summer 2016.

6 CONCLUSIONS AND COMMENT

The major obstacle in the development of our application is the “data-flow” with main server. Even though we designed our application for a wide range of measuring stations, the temporary lack of proper analytical sensor units does have an impact on the accuracy of our application. In order to reduce the consequences of this, hopefully short-term problem (fingers crossed!), we searched the market for commercially accessible personal sensor units as a substitute.

The emergence of low-cost easy to use portable air quality sensors units is opening new possibilities for individuals to assess their exposure to air pollutants at specific place and time, and share this information through the Internet connection. There are several personal sensor units available on the market, e.g. Cubesensors, Netatmo weather station, but they usually do

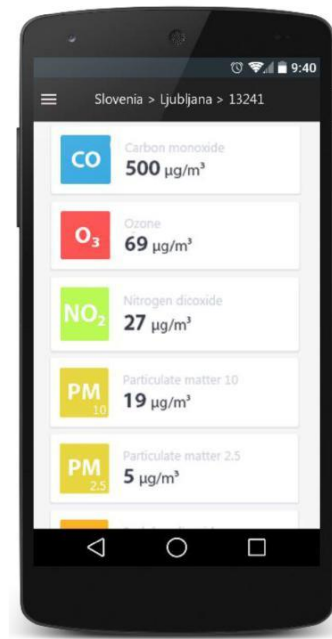


Figure 6: Latest data from stations

not have appropriate sensors for measuring air pollution parameters like PM₁₀, PM_{2.5}, NO_x, SO₂ etc. Sensor units like these are becoming more and more popular, which is why we want to add their measurements to our cloud server, to improve our network of sensor units. Users who will own these stations will also be able to choose, if they want to share their measurements with other users, which will also help in forming a better community. In addition, when the IJS will finish developing their mobile sensor unit Vesna, there will also be a possibility for users to buy this unit and add it to our network.

This will improve the overall accuracy of our overlay and help the user a lot in determining the current pollution on the user's location. Vesna is a mobile sensor unit that can be used in measuring indoor and outdoor air quality, which it makes very flexible to the user's needs. The version designed for the pilot studies was equipped with the following sensors: NO₂, O₃, CO, temperature, relative humidity, pressure, and accelerometer and was a decent replacement for the AQMesh sensor units in this research.

Our platform will give citizens an alternative to check air quality data measured by governmental institutions. Because not all users own a smartphone or a tablet, or they simply prefer to use their computers for analyzing data, we are also developing a web application with similar features. In spring 2016 we were able to contact Norwegian Institute for Air Research (NILU), which are the main coordinators of the CITI-SENSE project. They offered us a direct access to the common servers containing data from all the project's measuring stations, which are presently situated in Ljubljana and Oslo. With this the issue of "data-flow" has been more or less resolved and because the server is common to the every city with measuring stations in the project, it will be very easy to increase our application coverage to each of the 7 European cities.

7 REFERENCES

- Air Info Now.** (date not given). *What is Particulate Matter?*
http://www.airinfonow.org/html/ed_particulate.html.
- Apache.** (2015). *Group, D.* http://httpd.apache.org/ABOUT_APACHE.html.
- ARSO.** 2014. *Kakovost zraka v sloveniji v letu 2013*. Ljubljana: ARSO.
- Carr, Allison.** (2007). *Ecological Effects of Tropospheric Ozone*.
<https://web.duke.edu/nicholas/bio217/akcarr/index.html>.
- Dumpleton, Graham.** date not given. *Code.google.com.*
<https://code.google.com/p/modwsgi/>.
- EPA.** (2006) . *Air Quality Criteria for*. National Center for Environmental Assessment-RTP Office .
- EPA.** (2003). *Ozone*. Washington: Office of Air and Radiation.
- European parliament.** (2008). "Directive on ambient air quality and cleaner air for Europe."
- Geotech.** (date not given). *AQmesh* .. <http://www.geotechuk.com/products/outdoor-air-quality/aqmesh.aspx>.
- Git.** (2015). *Git-scm.com*. <http://git-scm.com/>.

Google. (2015). *Fundamentals, A.*

<http://developer.android.com/guide/components/fundamentals.html>.

Močnik, Griša. Meritve črnega ogljika. November 20, 2014. Lecture held at UNG.

<http://www.ung.si/sl/raziskave/znanstveni-veceri/2014-2015/grisa-mocnik/>

Nordqvist, Christian. *What is carbon monoxide poisoning? What causes carbon monoxide poisoning?* November 23, 2009. <http://www.medicalnewstoday.com/articles/171876.php>.

Oracle Corporation. (date not given). *Dev.mysql.com*. Accessed 3 7,

2015. <http://dev.mysql.com/doc/refman/5.0/en/features.html>.

Sharwood, Simon. (2015). "Theregister.co.uk." *Theregister* 1. Accessed 3 7, 2015.

http://www.theregister.co.uk/2015/01/19/apache_retains_perch_atop_global_web_server_market/.

WHO. (2005). *WHO Air quality guidelines for particulate matter, ozone, nitrogen*. Geneva: WHO Press.

CAPÍTULO 11

-Ingeniería

Mecánica – Eléctrica-

APROVECHAMIENTO DE LA ENERGÍA SOLAR PARA EL RECICLAJE DE POLÍMEROS.

VÍCTOR R. NUÑO SÁNCHEZ ⁽¹⁾, JUAN F. BURGOS CASTRO ⁽²⁾ & DANIEL
ÁVILA MARTÍNEZ ⁽³⁾

⁽¹⁾ Universidad de Guadalajara, Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingenierías, Guadalajara,
México, e-mail victor_victorzapo@hotmail.com

⁽²⁾ Universidad de Guadalajara, Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingenierías, Guadalajara,
México, e-mail jfbc_93gdl@hotmail.com

⁽³⁾ Universidad de Guadalajara, Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingenierías, Guadalajara,
México, e-mail df_chino3@hotmail.com

RESUMEN:

En la presente investigación se propone el aprovechamiento de la energía solar por medio de la combinación de concentradores solares y paneles fotovoltaicos, para satisfacer de forma sustentable la demanda de energética total de una planta recicladora de polímeros; Los paneles conectados a inversores se encargan de la demanda de electricidad de la planta, mientras que los concentradores calientan un fluido de trabajo, que dentro un ciclo termodinámico se encarga de suministrar energía calorífica a todos los procesos que la requieran, esto maximiza la eficiencia del sistema al utilizar directamente la energía calorífica. Así se puede contribuir a disminuir la contaminación y a proveer de energía limpia a este tipo de industrias y las que tengan procesos similares.

Palabras clave: *Energía solar, Concentradores solares, Reciclaje de plásticos.*

ABSTRACT:

In this research proposes the exploitation of solar energy through the combination of solar concentrators and photovoltaic panels, to satisfy sustainable way the energetic demand for a polymer recycling plant; the panels connected to inverters take charge of the demand of electricity from plant, whilst the concentrators heats a working fluid, that within a thermodynamic cycle take charge to provide calorific energy to all processes requiring it, this maximizes the efficiency of the system, directly using the calorific energy. So it can contribute to reducing the contamination and to provide clean energy to this type of industries and those that have similar processes.

Keywords: *Solar energy, Solar concentrator, Plastics recycling.*

1. INTRODUCCIÓN

La investigación que realizamos es para abordar dos problemas; El primero consiste en que la energía eléctrica utilizada en México, sigue siendo principalmente producida en plantas que utilizan la quema de hidrocarburos para su funcionamiento, el 72% de la energía eléctrica que fue generada en México durante el año 2014, se generó de esta manera (SENER, 2105, [1]), esto pese a que contamos con vastos recursos energéticos renovables, como lo son el viento y la radiación solar (Agencia Informativa CONACYT, 2014, [2]), además de los recursos hídricos, los cuales si son aprovechados para la generación de energía eléctrica; El segundo problema abordado es la contaminación ambiental producida por el uso de polímeros, ya que esto daña fuertemente a nuestro país, según datos del INEGI, los plásticos desechados en el país pasaron de 1'346,100 toneladas en el año 2000 a 4'674,400 toneladas en 2013, representando el 10.89% de la basura total en 2013, y se estima que en 2011 se recicló sólo el 11% de estos desechos (INEGI, 2014, [3]) (Alethia Vázquez Morillas, Rosa Ma. Espinosa Valdemar, Margarita Beltrán Villavicencio y Maribel Velasco Pérez, [4]), pero este problema puede ser mitigado simplemente con el reciclaje, dado que el 80% de los polímeros producidos son termoplásticos, los cuales son ideales para ser reciclados, es importante señalar que los procesos que el reciclaje conlleva, requieren de mucha energía tanto eléctrica como calorífica para llevarse a cabo.

Esto nos afecta de manera importante, ya que la basura que no encontramos tirada en nuestras calles y carreteras, es confinada a vertederos que se convierten en focos de infección y contaminan los mantos freáticos subyacentes, mientras que sólo ocultan el problema, por otra parte, la energía que requieren los polímeros para su transformación, al ser obtenida principalmente por la quema de hidrocarburos, acentúa el problema de la contaminación relacionada con la obtención de energía.

2. OBJETIVOS

La presente investigación tiene como objetivo ofrecer nuevas aplicaciones para las fuentes de energía renovables, en esta se presenta una planta de reciclaje de polímeros, la cual satisface el total de su demanda energética, tanto de energía eléctrica como calorífica mediante el uso de celdas fotovoltaicas y concentradores solares. Sin embargo, existen muchos procesos industriales que requieren de estos dos tipos de energía, por lo tanto, pueden utilizar el mismo sistema adecuándolo para el caso específico.

Se presenta este proceso en particular, debido a que otro de los objetivos de esta investigación, es el de dar una solución al problema de contaminación ambiental que tiene nuestro país, el cual se deriva del uso excesivo de polímeros y la falta de cultura de reciclaje, así mismo, se muestra esto como algo que puede hacer que pasemos de tener un problema de contaminación por polímeros, a que mediante el aprovechamiento de la energía solar que incide sobre nuestro país, podamos reciclar toda esta basura e incluso tengamos capacidad de importar basura para reciclar, y con esto generar una nueva industria en México.

Finalmente, se pretende que esta investigación y la implementación de lo que aquí se presenta, sean de utilidad para la meta internacional de sustentabilidad energética y cuidado del planeta, ya que este problema nos concierne a todos, por lo tanto, debemos hacer lo propio para que en conjunto encontremos una solución viable que permita la subsistencia de las sociedades como las conocemos y posteriormente mejoremos su estructura en todos los ámbitos posibles.

3. MATERIALES Y METODOLOGÍA

Nuestra investigación ha sido totalmente teórica, por lo tanto, no se realizaron experimentos de laboratorio para probar nuestra hipótesis, así pues, la metodología de nuestra investigación fue la siguiente:

En una primera reunión planteamos la problemática que deseamos resolver, derivado de dicha problemática surgieron propuestas por parte de todos los miembros del equipo, dichas propuestas fueron analizadas según la factibilidad de implementación de las mismas, esto en base a las tecnologías existentes, recursos disponibles en el país y el impacto social, ambiental y económico de las propuestas. Una vez tomada la decisión acerca de la solución más viable se hizo el plan respecto a los temas que debíamos investigar para formular nuestra propuesta.

3.1. Temas investigados

- Proceso de peletizado de polímeros.
- Materiales que pueden ser peletizados.
- Temperaturas requeridas en el proceso de peletizado de polímeros.
- Intercambiadores de calor.
- Fluidos termodinámicos de trabajo.
- Hornos y extrusoras de plásticos.
- Tuberías utilizadas en el proceso.
- Equipos eléctricos utilizados en las plantas de peletizado de polímeros.
- Celdas fotovoltaicas.
- Concentradores solares.
- Radiación solar en México.
- Estadísticas sobre el uso y reciclaje de polímeros en México.

4. PROPUESTA

Consiste en aprovechar la radiación solar que incide en la zona norte del país, generando con esta fuente la energía necesaria para realizar el proceso de peletizado de polímeros. El sistema captará tanto energía eléctrica como energía térmica, con el objetivo de satisfacer todos los procesos que requiere el reciclaje.

4.1. Mecanismo para la obtención de la energía

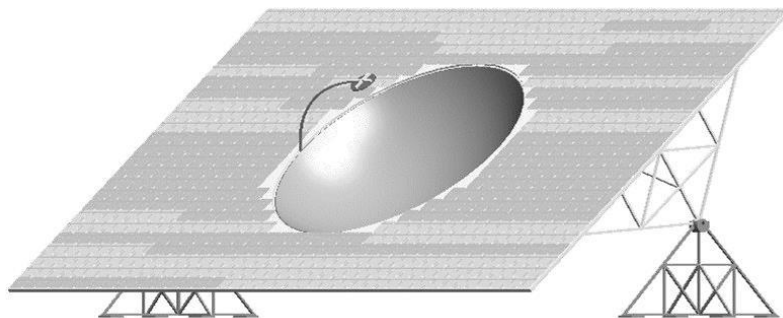


Figura 1.- Mecanismo para la obtención de la energía, mediante un concentrador solar y celdas fotovoltaicas.

La obtención de energía va a tener lugar en un área despejada que cuente con un alto índice de radiación solar, en dicha área se van a colocar múltiples mecanismos, los cuales tienen la función de orientar una plataforma rectangular, manteniéndola perpendicular a los rayos del sol que inciden sobre ella. La plataforma tendrá en el centro un par de espejos redondos y cóncavos, que concentrarán los rayos solares en un punto focal, mientras que el resto de la plataforma estará cubierta de celdas fotovoltaicas.

El mecanismo detectará la posición del sol y mediante un sistema de control, girará la plataforma con respecto a un eje horizontal, haciendo que la plataforma siga la trayectoria del sol de este a oeste, mientras que el eje que rota la plataforma de norte a sur y viceversa, corregirá su orientación sólo una vez por día, esto cerca del mediodía, asegurando así la máxima incidencia de rayos solares sobre la plataforma (J. Roldán, 2013, [5]).

4.2. Recolección y transformación de la energía eléctrica

Los rayos solares serán captados por celdas fotovoltaicas, las cuales convierten esta radiación en energía eléctrica, dicho proceso actualmente maneja eficiencias de alrededor del 20% (Sunpower corporation, 2015, [6]).

Las celdas fotovoltaicas deberán interconectarse de forma que entreguen 12VDC, 24VDC, 48VDC o el voltaje que sea requerido por el inversor de voltaje elegido para el proyecto, así mismo, los inversores se conectarán, de forma que entreguen la señal trifásica, con el voltaje requerido por los equipos eléctricos de la planta de reciclaje.

4.3. Recolección y distribución de la energía calorífica

Los rayos incidentes en el espejo cóncavo mayor, serán concentrados en un punto focal 1, antes de lograr llegar a dicho punto, los rayos se reflejarán en un espejo cóncavo mucho más pequeño que el primero, el objetivo de este segundo espejo es redirigir los rayos solares, de forma que pasen por un orificio en el centro del espejo mayor, concentrándose en un punto focal 2, el cual se ubica en el eje de rotación de la plataforma que soporta al concentrador solar, conformado por los espejos antes mencionados.

En el punto focal 2 se ubicará un cuerpo negro, unido a una tubería que unirá a todos los concentradores, dicha tubería utilizará agua como fluido de trabajo para hacer la transferencia de energía calorífica. Existen tuberías flexibles capaces de transportar fluidos a altas temperaturas, sin embargo estas son costosas y trataremos de prescindir de ellas en nuestro proyecto, el cual puede utilizar tuberías rígidas, las cuales son capaces de trabajar a altas presiones y temperaturas, como lo hacen ahora mismo en las centrales termoeléctricas.

Investigaciones en el “National Renewable Energy Laboratory” se centran en el desarrollo y validación de tecnologías avanzadas para receptores térmicos y materiales absorbentes para el uso en sistemas concentradores de energía solar. Planean proyectos de torres de alta temperatura, capaces de generar energía térmica a temperaturas superiores a los 650°C con una eficiencia térmica mayor al 90% (National Renewable Energy Laboratory, 2012, [7]).

Debido a eficiencias tan altas es que las centrales termosolares, están siendo utilizadas en otros países, pese a que actualmente sean sistemas que generan relativamente poca energía, en comparación con otro tipo de centrales eléctricas (Bright Source Energy, [8]).

4.4. Proceso

En la planta el proceso iniciará con la recepción de los polímeros que serán reciclados, los cuales serán triturados, limpiados y secados, tal como ya ocurre actualmente en las plantas de reciclaje de polímeros, posteriormente pasarán por una banda que los precalentará y llevará

a una tolva, dicha tolva entregará los polímeros precalentados a un horno, del cual saldrán ya derretidos para pasar a una máquina extrusora, a la salida de esta serán enfriados con agua y posteriormente cortados en pellets, hecho esto ya sólo resta empacarlos y distribuirlos a las plantas que los transformarán en nuevos productos.

4.5. Materiales que pueden ser peletizados

Existen varios polímeros que pueden ser reciclados mediante este proceso, cabe señalar que estos sufren modificaciones como resultado de los ciclos de calentamiento y enfriamiento, las cuales van haciendo que éstos se degraden, por lo tanto, el número de veces que pueden ser reciclados es limitado. Los termoplásticos son los polímeros que pueden ser derretidos y moldeados al aplicarles calor y son estos los que nos interesan para este proceso, como lo son: el polietileno, el poliestireno, acrílicos, policarbonatos, entre otros.

4.6. Temperaturas requeridas

La temperatura máxima requerida para derretir los polímeros, estará situada en el extrusor, siendo esta temperatura diferente según el termoplástico que esté siendo reciclado.

Las temperaturas de procesamiento típicas para plásticos semi-cristalinos, son por lo general de aproximadamente 50°C a 75°C por encima del punto de fusión de la resina. Por ejemplo, el polietileno de alta densidad (HDPE) con una temperatura de fusión () de 130°C se procesa típicamente de 180°C a 205°C o superior. Si la resina es susceptible a la degradación, puede ser procesada más cerca de su punto de fusión.

Los plásticos amorfos se suelen procesar aproximadamente a 100°C por encima de su temperatura de transición vítrea (). Por ejemplo, el poliestireno (PS) con una de 100°C se procesa típicamente alrededor de los 200°C.

Por lo tanto, de los termoplásticos que nos interesan, el que requiere mayor temperatura en la extrusión es el poliestireno, cuya es de 240°C, siendo amorfo su es de 100°C, se infiere que su temperatura de extrusión será un par de decenas de grados arriba de su , 260°C aproximadamente (Chris Rauwendaal, 2008, [9]) (Mikell P. Groover, 2007, [10]).

4.7. Intercambiadores de calor

De la unión de las tuberías de todos los concentradores sale una tubería, la cual va a dirigir y transferir la energía calorífica a las máquinas que la requieran, como lo son: la banda de precalentado, el horno y la extrusora. Cada una de éstas tendrá un intercambiador de calor que se describirá más adelante.

4.8. Distribución de la planta

La distribución horizontal de la planta, será relevante en todos los aspectos que nos señala la optimización propia de la ingeniería industrial, sin embargo, para nuestro propósito resulta relevante hacer que la distancia entre los concentradores solares y las máquinas térmicas sea la menor posible, esto debido a que la tubería tiene pérdidas por unidad de longitud y es prudente llevarlas al mínimo.

Por otra parte, la distribución vertical resulta mucho más relevante, ya que de esto depende que el fluido de trabajo tenga un flujo adecuado. Los concentradores estarán ubicados a nivel de planta, las tuberías que se desprenden de estos, irán en ascenso pasando por el extrusor y el horno vertical, llegando a su máxima altura en la tolva que alimenta al horno, posteriormente la tubería baja por la banda de precalentado hasta una profundidad de unos 50 cm bajo tierra, antes de subir nuevamente al concentrador, con esta distribución vertical se garantiza la óptima circulación del fluido de trabajo y el adecuado aprovechamiento de la energía calorífica.

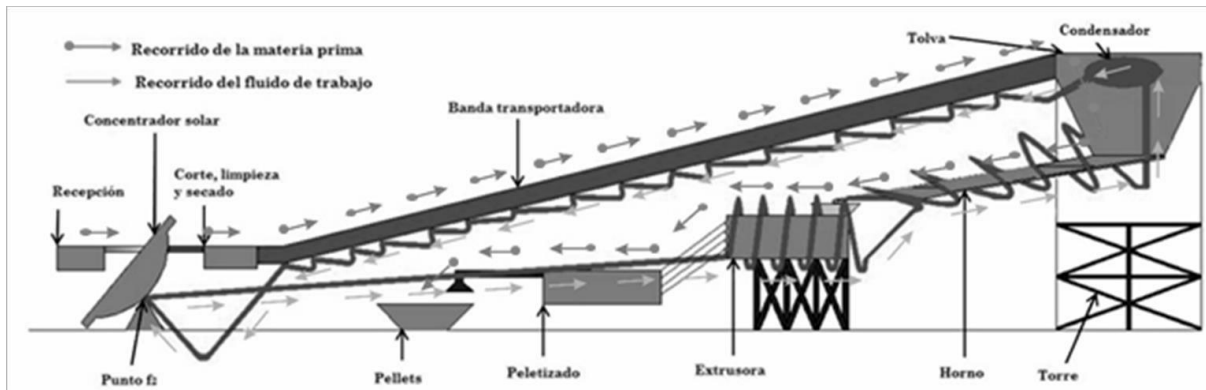


Figura 2.- Dibujo esquemático de la distribución vertical de la planta peletizadora de polímeros.

4.9. Fluido de trabajo para la transferencia de energía calorífica

En la industria se utilizan diversos fluidos con el propósito de transferir energía calorífica, siendo el agua el más importante, también se utilizan fluidos como la acetona y existen aceites fabricados con ésta finalidad, la ventaja de los aceites es que evitan la corrosión en las tuberías que los contienen, sin embargo éstos trabajan a temperaturas reducidas, cercanas a los 300°C , pese a que no requerimos temperaturas muy elevadas, 300°C resulta inconveniente para nuestros fines, por esta razón y por motivos económicos se propone el uso de agua, ya que puede trabajar a muy altas temperaturas y es ideal para este tipo de procesos, además como es muy utilizada para estos fines, se conocen perfectamente sus características y es muy fácil su implementación (Fluido térmico pirobloc, [11]).

4.10. Tuberías utilizadas

Para este proyecto se proponen tuberías rígidas, hechas de acero inoxidable austenítico, los cuales son capaces de resistir la oxidación y la corrosión a altas temperaturas (Outokumpu, [12]). También es posible que derivado del diseño de la planta, resulte necesaria la utilización de mangueras metálicas flexibles, esto para realizar alguna unión con cierta libertad de movimiento (Raúl Sánchez Barajas, [13]), éstas solo pueden utilizarse en donde la temperatura no vaya a alcanzar los 600°C , puesto que ese es su límite permitido.

Es importante mencionar que los tramos de tubería que no estén previstos para intercambiar calor con el medio circundante, deberán estar recubiertos por un aislante térmico para evitar la pérdida de energía por disipación en el ambiente (ISOVER Saint-Gobain, 2010, [14]).

4.11. Distribución del calor

La energía calorífica recibida en los concentradores solares y transferida al fluido en las tuberías, va a circular a través de todo el circuito térmico por un principio conocido como termosifón (Instituto Tecnológico de Canarias, 2007, [15]), esto significa que en el

concentrador se va a transferir suficiente energía al fluido de trabajo para convertirlo en vapor, dicho vapor fluiría hacia arriba por diferencia de temperaturas, pasando por los intercambiadores de calor de la extrusora y el horno, al llegar al punto más alto, este fluido se condensará y bajará por el lado opuesto de la tubería, pese a estar condensado seguirá teniendo una temperatura elevada, por lo tanto, se le hará pasar por un intercambiador de calor en la banda de precalentado, donde entregará más energía. Este ciclo termodinámico consigue aprovechar al máximo la energía calorífica obtenida en el concentrador y no requiere que el fluido de trabajo sea bombeado.

4.12. Extrusora

Ésta recibirá la energía proveniente directamente del concentrador, por lo que la máxima temperatura en contacto con la materia prima se dará en este punto.

La extrusora será muy similar a las existentes en el mercado actual, estará conformada por un cuerpo cilíndrico hueco dentro del cual se ubicará un tornillo helicoidal para desplazar y presionar el polímero derretido contra la boquilla de extrusión.

La variante propuesta consiste en que el cuerpo cilíndrico de la extrusora será recubierto por un tubo en espiral, dicho tubo es el que llevará el fluido termodinámico de trabajo, transfiriendo así energía calorífica al termoplástico que circulará dentro de la extrusora, finalmente la extrusora junto con el tubo en espiral serán aislados térmicamente del ambiente.

4.13. Horno

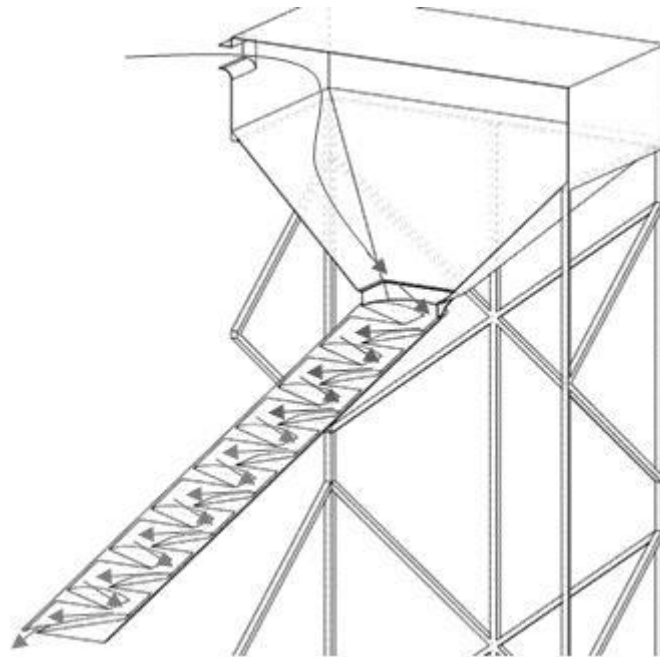


Figura 3.- Torre donde se ubica la tolva que descarga la materia prima al horno, esta representación esquemática sólo muestra el camino que sigue la materia prima en el proceso, sin embargo no ilustra al intercambiador de calor así como al aislante térmico.

El fluido termodinámico a la salida del extrusor se dirigirá al horno, en el cual debe haber la temperatura suficiente para derretir los termoplásticos; el trabajo de éste es recibir los polímeros precalentados y entregarlos ya derretidos a la extrusora.

El horno consistirá básicamente en un cilindro metálico inclinado, dentro del cual habrá una serie de láminas, que obligarán a la materia prima a hacer un recorrido en zigzag dentro del horno, a la vez que estas láminas metálicas le transfieren energía calorífica por conducción; el cilindro metálico estará recubierto por una tubería en espiral, la cual lleva el fluido termodinámico de trabajo y finalmente este conjunto será recubierto por un aislante térmico.

4.14. Banda de precalentado

Ésta consiste en una banda transportadora metálica, la cual llevará los polímeros ya limpios, secos y triturados hacia la tolva que alimenta al horno, dicha banda transportadora estará en contacto directo con un serpentín, dentro del cual circula el fluido de trabajo del ciclo termodinámico; la banda transportadora junto con el serpentín serán ubicados dentro de un cilindro cubierto por un aislante térmico, esto con el objetivo de que los polímeros en tránsito, reciban calor por conducción y a su vez lo reciban por convección, maximizando así la eficiencia en este proceso, a la vez que se minimiza la disipación de calor al ambiente.

Este será el último paso donde se entregará energía térmica a la materia prima, dentro del serpentín fluiría líquido a temperaturas cercanas a los 100°C, a la salida de éste será recibido por el concentrador que calentará nuevamente el fluido, completando así el ciclo termodinámico.

4.15. Sistema de control de temperatura

Los intercambiadores de calor ubicados en la extrusora, el horno y la banda de precalentamiento serán dotados de una tubería secundaria, la cual tendrá como objetivo llevar agua fría al sistema cuando así se requiera, ya que los polímeros pueden ser degradados al ser sometidos a temperaturas altas, la temperatura deberá ser controlada, pese a que esto representa pérdidas al sistema, se deberá realizar siempre que sea necesario, esta tubería no requiere caudales elevados, por lo que el flujo en ella será impulsado por una bomba centrífuga de baja potencia.

4.16. Equipo eléctrico en la planta

La planta requerirá de múltiples equipos eléctricos para su operación, se requerirán bombas para la circulación de agua, tanto en el proceso de peletizado como en las tuberías de servicio en la planta; motores eléctricos para muchos de los procesos, como el triturado de la materia prima, el transporte interno de la misma e incluso el mecanismo seguidor del sol, se requieren además un conjunto de electrodomésticos para el área de comida de la planta y según la NOM-025-STPS-2008 (Condiciones de iluminación en los centros de trabajo), se deben contar con 200 luxes para el área de trabajo en cuestión y 100 luxes para áreas comunes como comedores, pasillos, salas de juntas o espacios de la misma índole (Javier Lozano Alarcon, 2008, [16]).

5. RESULTADOS

Se planteó la propuesta de una planta de peletizado de polímeros, la cual satisfaga su consumo energético exclusivamente mediante el uso de energía solar. Se diseñó un mecanismo que combina un concentrador solar y celdas fotovoltaicas, maximizando de esta forma la recolección de energía, así mismo se muestra un proceso de peletizado de polímeros que incorpora una banda de precalentado, un horno y una extrusora, los cuales funcionan con calor obtenido del concentrador solar.

Con todo esto se logró diseñar un proceso de reciclaje totalmente sustentable, con lo cual se reduce la contaminación producida por el uso de polímeros, además de hacer del reciclaje un negocio más lucrativo al prescindir de insumos energéticos, por ende, esto no incrementa la huella de carbono del ser humano.

6. DISCUSIÓN

Es claro que ahora existen muchos proyectos que involucran las energías renovables, como las celdas fotovoltaicas y los concentradores solares, incluso hay proyectos muy grandes, como las centrales termo-solares, sin embargo, nuestro objetivo no es mostrar una nueva tecnología, sino ampliar el uso y aplicación de las mismas, mostrando que la combinación de estas tecnologías conocidas, puede usarse para crear industrias ecológicamente responsables.

A diferencia de las centrales termo-solares que pueden trabajar día y noche, ya que almacenan energía calorífica, la planta que proponemos sólo puede realizar su proceso de reciclaje durante el día, pese a ello debe almacenar energía eléctrica en baterías, para utilizarla en procesos ajenos al peletizado como son la iluminación, servicios esenciales por la noche e inclusive inyectarla en la red eléctrica cuando se tenga energía excedente.

Es importante considerar el nivel de radiación disponible en cada día pero la planta podrá operar pese a que la radiación sea baja, obviamente trabajaría con un volumen de producción menor, incluso el sistema de captación de energía puede ser sobredimensionado para seguir en operación durante los meses más críticos en este sentido.

Nosotros consideramos que este tipo de proyectos son importantes, pero nos parece que todas las medidas propuestas por parte de los científicos, ingenieros y tecnólogos, deben estar acompañadas de una fuerte campaña de concientización, puesto que cada persona puede apoyar al cambiar sus hábitos, enfocándolos hacia una sustentabilidad a pequeña escala.

7. CONCLUSIÓN

Esta investigación y la propuesta derivada de la misma aportan diversos beneficios; el primero consiste en que podemos aprovechar la radiación solar de algunas zonas del país, principalmente la noroeste y la central, obteniendo energía sin la necesidad de quemar hidrocarburos, dando así un paso hacia la sustentabilidad energética; la energía obtenida es transferida directamente al proceso de peletizado de polímeros, dicho proceso requiere una parte de energía calorífica, por lo que parte de la energía no requiere de una conversión, lo cual hace más eficiente al sistema; un beneficio muy importante radica en el reciclaje, pues éste es un problema que daña severamente al medioambiente de nuestro país y su rica biodiversidad; finalmente, la creación de nuevas industrias en la zona norte, representa una fuente de nuevos empleos.

8. REFERENCIAS

- [1] Secretaría de Energía, SENER. (2015). Estadísticas del sector eléctrico. Consultado 20 de Septiembre de 2015, de <http://egob2.energia.gob.mx/portal/electricidad.html>
- [2] Agencia Informativa CONACYT, V. S. (2014, Octubre 14). Sonora podría abastecer de energía a todo México con tecnología fotovoltaica. Consultado 20 Septiembre de 2015, de <http://www.conacytprensa.mx/index.php/tecnologia/energia/329-reportaje-con-la-radiacion-solar-que-recibe-el-1-de-sonora-se-podria-generar-energia-suficiente-para-todo-el-pais>

- [3] INEGI. Anuario estadístico y geográfico de los Estados Unidos Mexicanos, 2014. En base a PR. Informe de Gobierno, Anexo, Estadísticas Nacionales, Desarrollo Sustentable, (varios años), México, D.F.
- [4] El reciclaje de los plásticos, ANIPAC, UAM, Alethia Vázquez Morillas, Rosa Ma. Espinosa Valdemar, Margarita Beltrán Villavicencio y Maribel Velasco Pérez, páginas 2, 11 y 12 de <http://www.anipac.com/reciclajeplasticosuam.pdf>
- [5] Roldán J. (2013). Montaje mecánico en instalaciones solares fotovoltaicas. España: Ediciones paraninfo.
- [6] Paneles solares para uso residencial y empresarial. (2015). Consultado 20 de Septiembre de 2015, de <http://www.sunpowercorp.es/products/solar-panels/>
- [7] Receiver R&D. (2012). Consultado 20 de Septiembre de 2015, de <http://www.nrel.gov/csp/receivers.html>
- [8] Bright source. (s.f.). IVANPAH; A Brightsource Energy Concentrating Solar Power Project. Consultado 20 de Septiembre de 2015, de http://www.brightsourceenergy.com/stuff/contentmgr/files/0/8a69e55a233e0b7edfe14b9f77f5eb8d/folder/ivanpah_fact_sheet_3_26_14.pdf
- [9] Plastic Technology, C. R., PT. (2008, May). TIME TO LEARN ABOUT Dynamic Optimization of Extruder Barrel Temperatures: Plastics Technology. Retrieved September 20, 2015, from <http://www.ptonline.com/articles/time-to-learn-about-dynamic-optimization-of-extruder-barrel-temperatures>
- [10] Mikell P. Groover (2007), Fundamentos de manufactura moderna, McGraw Hill, Tercera Edición, páginas 156 -163.
- [11] Aceite térmico Pirobloc HTF-Clean. (s.f.). Consultado 20 de Septiembre de 2015, de <http://www.fluidotermico.com/es/aceites-termicos/15-pirobloc-htf-clean.html>
- [12] Aceros para rendimiento a temperaturas: Elevadas a 550 °C o más. (n.d.). Consultado 20 de Septiembre de 2015, de <http://www.outokumpu.com/mx/acero-inoxidable/tipos-de-acero-inoxidable/aceros-inoxidables-austeniticos-para-temperaturas-elevadas/Paginas/default.aspx>
- [13] Raúl Sánchez Barajas (s.f.), Catálogo de productos de tubos mangueras y conexiones, <http://tubosmanguerasyconexiones.com/wp-content/uploads/2011/06/CATALOGO-DE-TMC-new.pdf>
- [14] Aislamiento técnico. (2010). Consultado 20 de Septiembre de 2015, de <http://www.isover-aislamiento-tecnico.es/Industria/Aplicaciones/Tuberias/General>
- [15] Instituto Tecnológico de Canarias (2007), Guía Didáctica de energía solar , Consultada en <http://www.cienciacanaria.es/files/Guia-didactica-de-energia-solar-Captadores-solares-termicos.pdf>
- [16] Secretaría de trabajo y previsión social, J. L. (2008). NORMA Oficial Mexicana NOM-025-STPS-2008, Condiciones de iluminación en los centros de trabajo, Consultado 20 de Septiembre de 2015 en <http://www.stps.gob.mx/bp/secciones/dgsst/normatividad/normas/Nom-025.pdf>

CAPÍTULO 12

**-Ingeniería en Alimentos y
Biotecnología-**

EVALUACIÓN DE UN MÉTODO DE SECADO EN LA CONSERVACIÓN DE CEPAS MICROBIANAS.

LOPEZ DOMINGUEZ AMIN E. ⁽¹⁾, VELASCO MARTINEZ ALEJANDRO ⁽²⁾ & TÉLLEZ MORA PATRICIA

^(1,2) Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingenierías, Guadalajara, Jal, México ; ⁽³⁾ Centro de Bachillerato Tecnológico Industrial y de Servicios No 38

e-mail (amineld@outlook.com ⁽¹⁾; alexvelascom9@gmail.com ⁽²⁾; patyte16@yahoo.com.mx ⁽³⁾)

RESUMEN

En el CBTis 38, se inició con la conservación de cepas indispensables en las actividades formativas. En el periodo enero-julio 2011, se utilizó el secado por: deshidratación en sílica-gel y tiras de papel filtro. El presente trabajo tuvo como objetivo la implementación de dos métodos de secado y la evaluación del crecimiento.

Cepas: *E. coli*; *Serratia sp*; *S. aureus*; *Klebsiella pneumoniae*; *Saccharomyces*: *LSM1*; *LJCH*; *AAC2*; *C. albicans*; *A. niger*, crecidas en medios específicos, se incubaron 24h a 37°C, Levaduras: 24h a 35°C y hongos 48h a 28°C. Métodos de conservación: Sílica-gel y papel filtro. Soluciones de suspensión: Leche descremada 10% v/v, Peptona al 0.8% v/v. Conservación en papel: Papel filtro whatman N°2 de 1x5 cm estéril. Se introdujeron en la suspensión celular se retiraron a una caja Petri en un desecador hasta completa sequedad, se guardaron en tubos. Sílica-gel: se utilizaron frascos de vidrio de 10ml de capacidad con 1g de sílica-gel estéril y seca, se tomaron 500µL de la suspensión microbiana, se agregaron a tres frascos de sílica-gel (3X), se llevaron a un desecador estéril hasta sequedad.

Re-activación: las cepas conservadas se reactivaron en 2 etapas con tres soluciones distintas, se incubaron en medios ricos y luego trasferidas a medios específicos para identificarlas, con pruebas bioquímicas.

Se reactivaron y presentaron buen crecimiento; pero la única que creció en las tres soluciones de reactivación fue *Klebsiella pneumoniae*; *Candida albicans*, creció tanto en la reactivación con leche descremada y caldo nutritivo. *Saccharomyces LSM1* y *AAC2*, únicamente crecieron en la reactivación con leche descremada.

El método de conservación por sílica gel y tiras de papel filtro para los cultivos microbianos aquí evaluados, presentó una viabilidad promedio del 90%, excepto para *A. niger* (60%); representando una alternativa viable y económica de conservación.

Se concluyó que las cepas responden perfectamente al método de conservación implementado hace tres años. Cabe señalar que *Klebsiella pneumoniae*, creció bastante bien en los dos métodos con los dos agentes protectores. Las levaduras también se lograron reactivar y crecer aunque no en las tres soluciones, dejando de manifiesto el metabolismo particulares de cada una.

Palabras clave: *Cepas; Técnicas de conservación; Deshidratación microbiana.*

ABSTRACT

The culture collection was started in CBTis No. 38 because the strains are indispensable in training activities. During January - July 2011, dehydration in silica gel and filter paper strips were used. The objective of this study was the implementation of two drying methods and their evaluation of Growth.

Strains used: *E. coli*; *Serratia* sp; *S. aureus*; *Klebsiella pneumoniae*; *Saccharomyces*: LSM1; LJCH; AAC2; *C. albicans*; *A. niger*, grown in specific medium, incubated 24h at 37°C, Yeasts: 24h at 35°C and fungi 48h at 28°C. Conservation techniques: Silica-gel and filter paper. Suspension solutions: Skim milk 10% v/v peptone, 0.8% v/v. Conservation paper: Whatman filter paper No. 2 sterile 1x5 cm. They were introduced into the cell suspension after that were carried inside a Petri dish and put into a desiccator to complete dryness and stored in tubes. Silica-gel: glass jars of 10ml capacity were used with 1 g of silica-gel dry sterile, were taken 500µL of the microbial suspension, three bottles of silica-gel (3X) were added, they were carried a sterile desiccator to dryness.

Re-activation: the preserved strains were reactivated in two stages with three different solutions, incubated in rich medium and then blotted to specific means to identify them.

The strains were reactivated and showed good growth; but the only one that grew in the three solutions reactivation was *Klebsiella pneumoniae*; *Candida albicans*, grew both in reviving with skim milk and nutrient broth. *Saccharomyces* LSM1 and AAC2 only grew in reviving with skim milk.

The method of preservation by silica gel and filter paper strips for microbial cultures here evaluated, after one year presented an average viability of 90%, except for *A. niger* (60 %); representing a viable and economical alternative conservation.

It was concluded that the strains respond perfectly preservation method implemented three years ago. It should be noted that *Klebsiella pneumoniae*, grew quite well in the two methods with the two protective agents. Yeasts also able to reactivate and grow but not in all three solutions, leaving clear their particular metabolism.

Keywords: *Strains; Conservation techniques; Microbial dehydration*

1.0 INTRODUCCIÓN

La preservación de cepas microbianas no es tarea fácil y debe garantizar la viabilidad, pureza y estabilidad genética de los cultivos, características que coinciden con los objetivos de un buen método de conservación (Floccari M. 1998). Muchas técnicas se encuentran disponibles para este fin, se identifican tres categorías que se pueden agrupar acorde con el tiempo en que permanecen viables las células conservadas: conservación a largo plazo, donde clasifican la congelación y la liofilización; conservación a mediano plazo, que comprende la desecación en diferentes soportes, así como el almacenamiento en tierra y la suspensión en agua estéril (destilada o de mar), y la conservación a corto plazo, donde se incluye la resiembra periódica (Giono S, *et. al.*, 2009).

La conservación a mediano plazo es el término que agrupa las técnicas con las que se logra mantener la viabilidad de los cultivos entre dos y cinco años. Se destaca en este grupo la desecación en diferentes soportes (arena, zeolita, sílica gel, gelatina, papel, perlas de vidrio), donde la paralización del crecimiento se produce por eliminación del agua disponible (Weng A. 2012), como el almacenamiento en tierra y la suspensión en agua estéril (destilada o de mar), métodos bien documentados, en especial para los hongos, lo que no descarta su uso para la conservación de bacterias según reportes de varios autores (Malik KA, 1999; Smith D, *et. al.*, 2000).

A pesar de la gran variedad de técnicas de conservación de cepas microbianas, no existe una universal, para conservar adecuadamente todos los microorganismos; por ello surge la necesidad de evaluar varias técnicas de preservación hasta encontrar la más factible de aplicar a los microorganismos mantenidos en la colección, adecuándola a la situación real de cada organización. Los principales aspectos que se deben tener en cuenta para la para la elección de las técnicas más apropiadas se basan en los siguientes criterios (Weng, 2012):

- Mantenimiento de la viabilidad.
- Cambios de la población hacia la selección.
- Cambios genéticos.
- Pureza.
- Costo.
- Número de cultivos.
- Valor de los cultivos (Cepas).
- Frecuencia del uso de los cultivos.

En el caso de que no se disponga de todos los recursos para establecer métodos de conservación a largo plazo, se hace necesario contar con métodos alternativos como herramientas que nos ofrecen otras posibilidades. La eliminación del agua (deshidratación) es un método de conservación que reduce drásticamente el metabolismo. Sin embargo, no todos los microorganismos sobreviven a estos métodos de secado. Por lo que se hace necesario añadir agentes protectores (leche descremada, glutamato sódico al 10% p/v). Una vez secos es importante mantener el producto sellado (tapón de rosca, ampollita) para evitar el contacto con el aire ya que son higroscópicos. Los soportes que se suelen utilizar son arena, suelo, sílica gel previamente secados y esterilizados por calentamiento con aire caliente (no utilizar autoclave o calor seco). Sobre estos soportes se añade la suspensión de los microorganismos y se deja secar a temperatura ambiente. También se pueden utilizar como soportes discos o tiras de papel, agar, discos de gelatina, donde se añade la suspensión de microorganismos y posteriormente se seca al vacío evitando congelación, lo que se denomina liofilización. Estos métodos de secado son particularmente útiles para conservar microorganismos productores de esporas, como los. Actinomicetos (Snell JJS., 1991). El método de Sílica gel anhidra se ha

utilizado para preservar hongos y una serie de especies bacterianas. La técnica consiste en añadir una suspensión de microorganismos en leche descremada directamente a la sílica gel anhidra. Esta técnica es barata, rápida y extremadamente simple de utilizar. Otro de los métodos reportado como viables y simples es la utilización de papel filtro, que mantiene los microorganismos viables hasta por tres años (Sosa López et al., 2011).

El presente trabajo tuvo como objetivo implementar al menos dos técnicas de secado para la conservación de cepas microbianas, y evaluar su crecimiento después de tres años.

2.0 MATERIAL Y METODOLOGÍA:

2.1 Microorganismos:

Bacterias: *Escherichia coli*; *Serratia sp*; *Klebsiella pneumoniae*; *Staphylococcus aureus*.

Levaduras: *Saccharomyces* LSM1; LJCH; AAC2; *Candida albicans*.

Hongos: *Aspergillus niger*.

2.2 Medios de cultivo:

Medios: con eosina y azul de metileno (EMB); Agar sal y manitol (ASM); Biggy; gelosa agar; agave: Jugo de agave ajustado a 5°Brix, 2g/L de $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$ y 2.5 % p/v de agar-agar. Agar nutritivo (AN). Papa dextrosa agar (PDA), Agar cuenta estándar, Leche descremada al 10% v/v y peptona de caseína al 0.8% p/v.

2.3 Metodología:

Todas las cepas se crecieron previamente en su medio de cultivo selectivo: *K. pneumoniae*, *E. coli* y *Serratia sp* en medio EMB; *S. aureus* en medio sal y manitol. Se incubaron por 24 h a 37°C. Para las cepas LSM1; LJCH y AAC2 en medio de agave (MA); para *Candida albicans* se utilizó medio gelosa agar. Se incubaron por 48 h a 35°C y el hongo se creció en medio Biggy a 28°C por un tiempo de 48h. Los métodos de conservación fueron sílica gel y papel filtro. Se preparó leche descremada al 10% v/v y peptona al 0.8% p/v, para usarlas en la re-suspensión celular. Se utilizaron 3 cajas crecidas, a cada una se le agregaron 2 ml de la solución (sea leche descremada o peptona), para re-suspender las células y se vaciaron en un vaso de precipitado de 100ml estéril. Para determinar la población inicial se tomó 1.0 ml y se hicieron diluciones en tubos con agua destilada estéril: 10^{-1} ; 10^{-2} ; 10^{-3} ; 10^{-4} ; 10^{-5} y 10^{-6} ; se sembró 1.0 ml en el medio respectivo. Para las técnicas de conservación, de la misma suspensión celular se tomaron 500 μl y se adicionaron en área estéril a frascos ámbar de 10ml con 2.0 g de sílica gel, previamente esterilizada en horno durante 72 h a 110°C, se llevaron a sequedad en un desecador estéril entre 7 y 10 días. Posteriormente se sellaron perfectamente y se conservaron en área estéril a temperatura ambiente. Para el secado sobre papel filtro se utilizaron tiras estériles de papel whatman No 2, de 1.0 x 5.0 cm. Se introdujeron en la suspensión celular se retiraron con pinzas estériles a una caja Petri para llevarse a un desecador hasta completa sequedad (por 7 o 10 días).

A partir de los 6 meses de mantenimiento, se realizaron resiembras de las cepas conservadas. Para estimar la viabilidad (si había o no crecimiento) en cada cepa, se tomaron muestras secas de los microorganismos, se llevaron a incubar en tubos con 10ml de peptona al 0.8% (este paso se realizó por duplicado), luego se resembró 1 ml de la suspensión en medio rico: para las bacterias se utilizó AN, en el caso de las levaduras y el hongo PDA. Se utilizó para lectura la caja que tuviera una población de $\text{UFC} \geq 50$ y ≤ 100 . A la población obtenida se le realizó

observación microscópica y tinción de Gram para evaluar estabilidad morfológica después del proceso de conservación.

El esquema de reactivación se presenta en la figura 1. Es importante señalar que la conservación de las cepas, además de estar sobre sílica gel y papel filtro, cada una se suspendió en dos agentes protectores: Leche descremada y peptona. Para la re-suspensión de los microorganismos se utilizaron como soluciones reactivadoras: leche descremada al 10% v/v y peptona de caseína al 0.8% p/v en tubos de ensaye con 8 ml de los medios mencionados, se esterilizaron 15 min a 110 lb de presión. En área estéril se sembró una serie de tubos con una asada de sílica gel y otra serie de tubos con un cuadro de aproximadamente 0.5 cm², de las cepas que se mantienen sobre papel filtro en las soluciones mencionadas, y un tercer tubo (serie "c"), se utilizó directamente caldo nutritivo, como se muestra en la primer línea del esquema de trabajo (figura 1). Los tubos se llevaron a incubar a 35 ± 2 °C durante 24 h. A partir de los tubos activados en la etapa previa, segunda línea del esquema de trabajo (figura 1), se transfirió 1 ml a otra serie de tubos de ensaye, los cuales contienen 8ml de caldo nutritivo estéril, excepto en la serie identificada como "c", este tubo pasa directamente a medio sólido (agar cuenta estándar), se llevan a incubar de 24 h a 35 ± 2 °C.

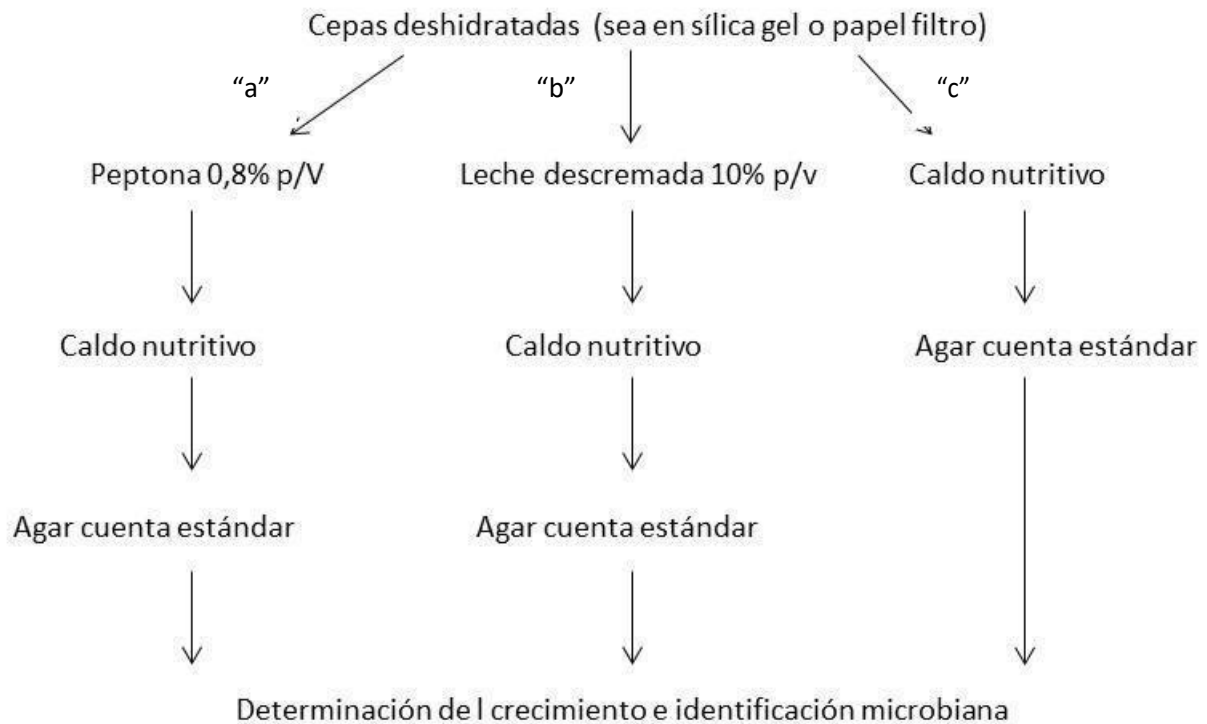


Figura 1. Esquema de reactivación de cepas deshidratadas

A partir de éstos tubos se sembraron en cajas con agar cuenta estándar (excepto la serie "c") y se llevan a incubar entre 24 – 48 h a 35 ± 2 °C. Sí presentaban crecimiento se analizaba la pureza y morfología microscópica (con el empleo de la Tinción de Gram) y la verificación de las características bioquímicas.

Posteriormente todas las cepas se crecieron previamente en su medio de cultivo selectivo: *K. pneumoniae*, *E. coli* y *Serratia* en medio EMB; *S. aureus* en medio sal y manitol. Se incubaron por 24 h a 37°C. Para las cepas LSM1; LJCH y AAC2 en medio de agave (MA); para *Candida albicans* se utilizó el medio gelosa agar. Se incubaron por 48 h a 35°C y el hongo se creció en medio Biggy a 28°C por un tiempo de 48h.

3.0 RESULTADOS:

Después de conservar las cepas en las técnicas mencionadas se evaluó el crecimiento al año y a los tres años.

3.1 Evaluación de las técnicas de conservación después de un año.

En la tabla No. 1 se presentan los resultados de viabilidad crecimiento de las cepas estudiadas

Tabla 1.- Crecimiento microbiano en sílica gel y papel filtro

	Silica gel		Papel filtro	
	Leche (10% v/v)	Peptona (0.8%p/v)	Leche (10% v/v)	Peptona (0.8%p/v)
Especie microbiana	Viabilidad (%)			
<i>Escherichia coli</i>	90	91	91	90
<i>Klebsiella pneumoniae</i>	70	92	92	90
<i>Staphylococcus aureus</i>	91	92	90	90
<i>Serratia sp</i>	90	91	90	90
<i>Saccharomyces LSM1</i>	89	91	90	89
<i>Saccharomyces LJCH</i>	89	89	89	90
<i>Saccharomyces AAC2</i>	90	89	89	90
<i>Candida albicans</i>	70	70	70	70
<i>Aspergillus niger</i>	60	62	60	60

No hubo diferencias entre las soluciones de peptona y leche descremada utilizadas para la resuspensión, tanto para las cepas mantenidas en sílica-gel como las conservadas en papel filtro, ver tabla 1.

En la sig. tabla se presentan los resultados del crecimiento microbiano después de 1 año de conservación. Se puede observar que ambos métodos fueron muy buenos para la gran mayoría de las cepas, a excepción de *A. niger* quien presentó contaminación en la reactivación y el tiempo de crecimiento en la primera resiembra fue de 7 días.

El método de conservación por sílica gel y tiras de papel filtro para los cultivos microbianos aquí evaluados, presentó una viabilidad promedio del 90%, excepto para *A. niger* (60%); representando una alternativa viable y económica de conservación.

3.2 Evaluación de las técnicas de conservación después de tres años

Los resultados de reactivación de las cepas después de tres años, se presentan en la tabla No2. La cepas de *S. aureus* y *Aspergillus niger* presentaron problemas de crecimiento y contaminación, no se pudieron recuperar. *Saccharomyces* LJCH, accidentalmente se perdió.

De las soluciones reactivadoras la que mejor funcionó con las cepas de estudio fue la leche descremada. Se puede observar el notable decremento en el crecimiento en todas las cepas evaluadas. Las cepas que más resistieron la desecación fueron *Saccharomyces* LSM1 y AAC2, ya que presentaron las viabilidades más altas con leche descremada.

Tabla 2.- Crecimiento microbiano en sílica gel y papel filtro, después de tres años

Especie microbiana	Silica gel		Papel filtro	
	Leche (10% v/v)	Peptona (0.8%p/v)	Leche (10% v/v)	Peptona (0.8%p/v)
	Viabilidad (%)			
<i>Escherichia coli</i>	60	nc	62	nc
<i>Klebsiella pneumoniae</i>	55	57	55	60
<i>Staphylococcus aureus</i>	nc	nc	nc	nc
<i>Serratia sp</i>	nc	nc	57	nc
<i>Saccharomyces LSM1</i>	74	nc	74	nc
<i>Saccharomyces LJCH</i>	nd	nd	nd	nd
<i>Saccharomyces AAC2</i>	75	nc	75	nc
<i>Candida albicans</i>	45	nc	44	nc
<i>Aspergillus niger</i>	—	—	—	—

nd: No se determinó su crecimiento; **nc:** ausencia de crecimiento

La única cepa que creció en las tres rutas de reactivación (figura 1), tanto de las cepas provenientes de sílica gel, como de las que provienen de tiras de papel filtro, fue *Klebsiella pneumoniae*, figuras 2, 3 y 4.: La cepa de *Candida albicans*, creció tanto en la reactivación de la ruta “b” figura 5, como en la ruta “c” figura 6; mientras que las cepas de levaduras *Saccharomyces*, LSM1 y AAC2, únicamente crecieron en la reactivación de la ruta “b” figura 7 y 8.

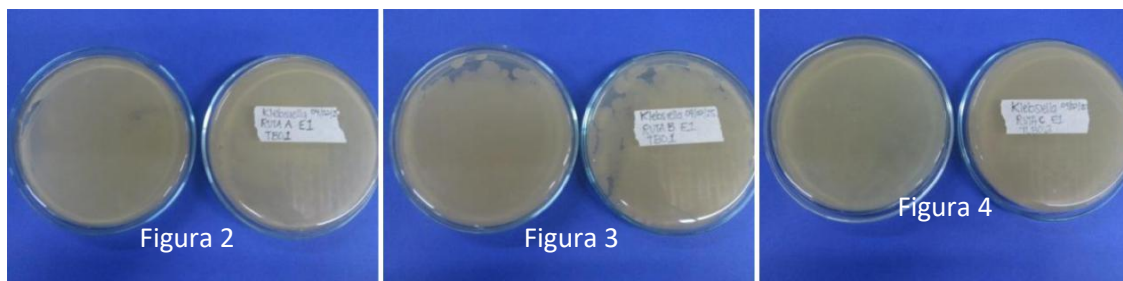


Figura 2, 3, 4: Crecimiento de *Klebsiella pneumoniae*, siguiendo ruta a (figura 2); ruta b (figura 3) y la ruta c (figura 4), después de 24 h de cultivo, en cuenta estándar.



Figura 5.-Crecimiento de *C. albicans*, ruta "b" **Figura 6.** Crecimiento de *C. albicans* ruta "c"

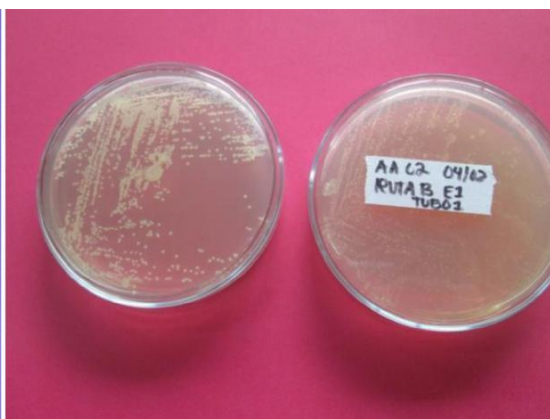
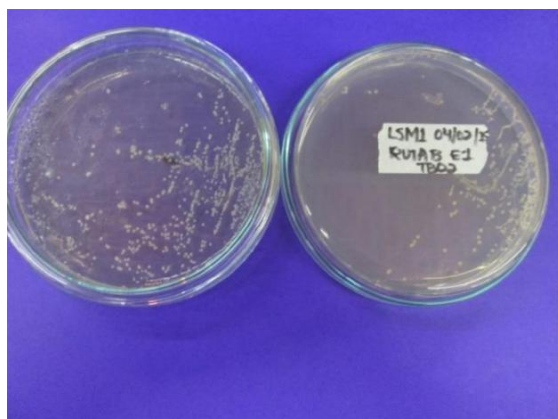


Figura 7. Crecimiento de *S. LSM1* en ruta "b" Con 24 h de cultivo. **Figura 8.** Crecimiento de AAC2, en ruta "b" Con 24 h de cultivo.

4.0 CONCLUSIONES:

Las cepas estudiadas responden perfectamente a los métodos de conservación para los cultivos microbianos implementados después de un año, presentaron una viabilidad promedio del 90%, excepto para *A. niger* (60%).

Después de tres años la cepa *Klebsiella pneumoniae* ha crecido bastante bien en los dos métodos con los dos agentes protectores. Las cepas de levaduras fueron las cepas que presentaron una viabilidad más alta después de tres años de desecación.

Se observó que de las dos soluciones, la leche descremada fue la que presentó mejores resultados representando una alternativa viable y económica de conservación.

5.0 BIBLIOGRAFÍA

- Floccari M. (1998). "Métodos de conservación de cultivos bacterianos". Revista Argentina de Microbiología, 30: 42-51.
- Giono S, Castro G, Aguilar G, Arteaga RI, Ochoa SA, Rivera M, *et. al.* (2009). "Manual de prácticas. En: V Seminario y Taller Internacional de Colecciones Microbianas". México DF: Instituto Politécnico Nacional - Escuela Nacional de Ciencias Biológicas.
- Malik KA (1991). *Maintenance of microorganisms by simple methods*. In: Kirsop BE. & Doyle A, eds. *Maintenance of microorganisms and cultured cells. A manual of laboratory methods*. London: Academic Press. p. 121-32.
- Smith D, Onions AHS. (1994). *The preservation and maintenance of living fungi*. En: Centre for Agricultural Bioscience International. Wallingford UK.
- Snell JJS. (1991). *General introduction to maintenance methods*. In: Kirsop BE, Doyle A, eds. *Maintenance of Microorganisms and cultured cell*. A manual of laboratory methods. London: Academic Press: 21-30
- Sosa López, Acenet I.; Pazos Álvarez- Rivera, Victoria; Borges Marín, Giovanni; González García Marleny y Ponce Grijuela Enrique (2011). "Evaluación del método de conservación en papel filtro en dos cepas *Bacillus subtilis cohn*, mediante la actividad antagónica frente a *Rhizoctonia solani Kühn*". Fitosanidad. 15, (1), pp. 45-49
- Weng Alemán Zulia (2012). "Recobrado de *Shigella* spp. conservada por la técnica de secado en perlas de vidrio". Departamento de Microbiología Sanitaria. Laboratorio Colección Microbiana. Instituto Nacional de Higiene, Epidemiología y Microbiología (INHEM). Infanta 1158 e/ Llinás y Clavel, Centro Habana. La Habana, Cuba. CP: 10300. Correo electrónico: zuliaweng@yahoo.com, _____ publicado en http://bvs.sld.cu/revistas/hie/vol51_1_13/hie05113.htm.

Los autores agradecen el apoyo brindado para la realización del proyecto al CBTis No. 38 y las compañeras Emelin Sarai Gómez Rodríguez y Alejandra Viesca Jiménez

Agradecimiento a las universidades e instituciones por su colaboración

-Universidad de Guadalajara-

-University of Calgary-

-Politécnico di Torino-

-Saint-Petersburg State University-

-Gimnazija Vič, Jozef Stefan Institute-

-Faculty of Applied Mathematics and Informatics of the Belarusian State University (Belarus, Minsk)-

-Lviv, Ukraine-

-Kazakhstan, Almaty, the Gymnasium "Self-Cognition"-

-Colegio de Estudios Científicos y Tecnológicos del Estado de Michoacán, Plantel 01 Penjamillo-

-School 564 and Chebyshev Laboratory-

-Advanced Educational Scientific Center of Moscow State University-

-Ukrainian State University of Chemical Technology-

-Universidad Nacional de Colombia-

-Vyatka State University, Russian Federation-

-Corporación Universitaria del Huila Corhuila-

-Instituto Federal do Amapá-

-Universidad Federal de Amapá-

-Tecnológico de Estudios Superiores de Ecatepec-

-Instituto Tecnológico de Morelia-

-Universidad Tecnológica de Culiacán-

-Instituto Tecnológico de Villahermosa-

-Kremenchuk School-

-Instituto Tecnológico de Estudios Superiores de Monterrey-

-Universidad Nacional Autónoma de México-

-Universidad Politécnica de San Luis Potosí-

-Universidad Autónoma de Ciudad Juárez-

-Chemical-ecological lyceum - ITMO University-

**Esta edición electrónica se realizó en febrero de 2018
Guadalajara, Jalisco, México.**

