

TRABAJOS  
CIENTÍFICOS  
EN MÉXICO

TOMO IV

FÍSICO MATEMÁTICAS Y CIENCIAS DE LA TIERRA



## DECLARACIÓN LEGAL

### EDITORES:

María Eugenia Sánchez Morales  
Gloria Verónica Vázquez García  
Amalia Martínez García  
Cristina E. Solano Sosa  
Eva Liliana Ramos Guerrero

ISBN GENERAL 978-607-8821-02-0

Fecha de otorgamiento 14-12-2021

Tomo IV: Físico Matemáticas y Ciencias de la Tierra ISBN 978-607-8821-08-2

Fecha de otorgamiento 07-01-2022

El contenido de los artículos es responsabilidad de los autores.

Temacilli EDITORIAL  
Lagos de Moreno, Jalisco  
<http://temacilli-editorial.com>

D. R. Centro de Investigaciones en Óptica, A. C.  
Loma del Bosque 115, Col. Lomas del Campestre  
C. P. 37150 León, Guanajuato  
México  
Hecho en México



# **Trabajos Científicos en México**

**Tomo IV:**

**Físico Matemáticas y  
Ciencias de la Tierra**

## **PREFACIO**

El presente compendio reúne trabajos de investigación realizados en diversas áreas de la ciencia, cuyo objetivo principal es contribuir a la difusión del trabajo científico que se realiza en México. Con este compendio también se pretende promover el trabajo interdisciplinario entre miembros de diferentes disciplinas científicas.

Este trabajo está organizado en siete tomos los cuales corresponden a las siguientes áreas científicas: I) Biología y química, II) Biotecnología y ciencias agropecuarias, III) Ciencias sociales, IV) Físico matemáticas y ciencias de la tierra, V) Humanidades, ciencias de la conducta y divulgación científica, VI) Ingeniería, así como VII) Medicina y ciencias de la salud.

Octubre de 2021  
León, Gto., México

María Eugenia Sánchez Morales  
Gloria Verónica Vázquez García  
Amalia Martínez García  
Cristina E. Solano Sosa  
Eva Liliana Ramos Guerrero

## Tabla de contenido

CUANTIFICACIÓN DE UN TRUCO DE MAGIA: ESTÁTICA DE FLUIDOS.....	3
LA EVALUACIÓN ESPACIAL MULTICRITERIO COMO HERRAMIENTA PARA LA GESTIÓN DE RECARGA DE ACUÍFEROS.....	8
ESTUDIO DE LAS MICROFIBRAS DE CELULOSA HIDROFÓBICAS OBTENIDAS A PARTIR DE SOJA.....	21
COMPARACIÓN ENTRE EL PROBLEMA CLÁSICO DE LA RUINA DEL JUGADOR Y SU VERSIÓN CON UN Oponente INFINITAMENTE RICO .....	26
MÉTODOS DE SÍNTESIS DEL FOTOCATALIZADOR $\text{KBIO}_3$ .....	32
ESTUDIO DE LOS HáBITOS EN EL USO DE TECNOLOGÍAS DE COMUNICACIÓN INTELIGENTES EN LA POBLACIÓN DE NUEVO INGRESO A ESTUDIAR INGENIERÍA EN LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITA-UNIDAD AZCAPOTZALCO .....	37
ESTUDIO DE LA EMISIÓN ÓPTICA DE LOS TELÉFONOS INTELIGENTES .....	47
REJILLAS DE DIFRACCIÓN COMPUESTAS DE MICROCANALES DONDE FLUYEN LIQUIDOS OPTICAMENTE ACTIVOS.....	54
EFFECTO DEL MEDIO SOBRE LA DISTRIBUCIÓN DE TAMAÑO DE NANOPARTÍCULAS COLOIDALES UTILIZANDO EL MODELO PAC.....	60
CONSTRUCCIÓN DE MODELOS GEOTÉCNICOS MEDIANTE LA APLICACIÓN DE MÉTODOS GEOFÍSICOS: ANÁLISIS DE ESTABILIDAD DE LADERAS.....	66
ANÁLISIS DEL TERMINADOR SOLAR EN ALTA FRECUENCIA.....	80
MOMENTO DIPOLAR DÉBIL DEL TOP .....	85
FUNCIONES DE RITUS PARA EL GRAFENO EN UN CAMPO MAGNÉTICO CONSTANTE GENERADAS POR OPERADORES DE ENTRELAZAMIENTO A PRIMER ORDEN .....	92
DETERMINAR UN PROCESO PARA LA EXTRACCIÓN DEL LÍQUIDO DE LA PLANTA JATROPHA DIOICA MEDIANTE MODELOS ESTADÍSTICOS.....	98
ENSEÑANZA DE LA FÍSICA CON EXPERIMENTOS .....	104
EVALUACIÓN DEL ÍNDICE DE SUSTENTABILIDAD AMBIENTAL COMO HERRAMIENTA DE ANÁLISIS ESPACIAL DE LOS RECURSOS NATURALES DEL ESTADO DE GUANAJUATO... ..	108
SIMULACIÓN NUMERICA DE LA VELOCIDAD DE FLUJO Y PRESIÓN DE UN VISCOSIMETRO DE AGUJA DESCENDENTE.....	118
EFFECTOS DEL VACIADO ENTRÓPICO EN LA ESTRUCTURA DE MEZCLAS COLOIDALES RACÉMICAS BIDIMENSIONALES DE PARTÍCULAS QUIRALES.....	125
ANÁLISIS DE LA ESTABILIDAD DEL ADN MEDIANTE DINÁMICA MOLECULAR BAJO PRESIÓN HIDROSTÁTICA ALTA.....	131
ANÁLISIS NUMÉRICO DEL ÁNGULO DE MEZCLA DEL REACTOR $\theta_{13}$ DE NEUTRINOS.....	143
ANÁLISIS RADIOGRÁFICO TEMPORAL DE LA PERTURBACIÓN MAGNÉTICA DEL CIRCUITO CAÓTICO DE CHUA.....	156
PROCESOS DIFUSIVOS EN UN SISTEMA DE REACCIÓN-DIFUSIÓN BIDIMENSIONAL CUASI-SINGULAR .....	162
DINÁMICA VIBRATORIA DE UNA MEMBRANA CUADRADA SUJETA A UN CORTE CUASI-FRACTAL EN UNO DE SUS LADOS .....	169

UNA MIRADA A LA INTERACCIÓN DE PROTEÍNAS TAU UTILIZANDO EL MICROSCOPIO COMPUTACIONAL.....	173
ANÁLISIS DE NUEVA FÍSICA EN UNA TEORÍA DE PARTÍCULAS CON CAMPOS MENSAJEROS LIGEROS OCULTOS.....	189
EFECTO DE CAOS ELECTROMAGNÉTICO EN UNA GUÍA DE ONDAS METÁLICA DE CRISTAL FOTÓNICO.....	194
ESTRUCTURAS DE BANDAS FOTÓNICAS DE UN LABERINTO DE FRACTAL DE KOCH.....	210
ESTUDIO NUMÉRICO DE LA RESPUESTA ÓPTICA DE UN SISTEMA DE MULTICAPAS USANDO EL MÉTODO DE LA ECUACIÓN INTEGRAL.....	220
ESTUDIO DE LA TRANSMISIÓN ÓPTICA DE LAS PREFORMAS OFTÁLMICAS A LA EMISIÓN DE LUZ DE LAS PANTALLAS DE LOS TELÉFONOS.....	230
DISEÑO DE UN MODELO PREDICTIVO SOBRE LA DESERCIÓN ESCOLAR UTILIZANDO LA TEORÍA BAYESIANA.....	238
UNA SEGUNDA OPORTUNIDAD DE ATENCIÓN DE RIESGOS ANTE EVENTOS DICOTÓMICOS EN CONDICIONES ESTÁTICAS.....	244
IMPLEMENTACIÓN DE UN REACTOR PARA LA OBTENCIÓN DE SILICIO POROSO LUMINISCENTE MEDIANTE IMPRESIÓN 3D POR ESTEREOLITOGRAFÍA.....	250
LA INVESTIGACIÓN ACCIÓN EN LA CAPACITACIÓN DEL PERSONAL, CONJUNTANDO LOS ESCENARIOS MEDIBLES A FIN DE TRANSFORMAR EN CADA CICLO UNA ACCIÓN PLANIFICADA PARTICIPATIVA.....	256
MODELO DE DISEÑO E IMPLEMENTACION DEL DIAGNOSTICO DE CIENCIAS BASICAS ...	264
ALUMINATOS MIXTOS CON ACTIVIDAD FOTOCATALITICA PARA REDUCCIÓN Y DEGRADACIÓN DE COMPUESTOS ORGÁNICOS.....	270
DIFERENCIA TOPOLOGÍA EN CONECTIVIDAD FUNCIONAL EN LA TAREA DE PROCESAMIENTO SEMÁNTICO.....	276
ECUACIÓN DE DIRAC EN UNA BOLSA ESFÉRICA.....	282
EXCITACIÓN DE PLASMONES DE SUPERFICIE EN SISTEMAS FOTÓNICOS 1D QUE CONTIENEN METAMATERIAL DISPERSIVO COMO MEDIO ABSORBENTE.....	286
SÍNTESIS DE $ZnAl_2O_4$ PARA FOTODEGRADACIÓN SOLAR DE CONTAMINANTES PERSISTENTES EN AGUA Y GENERACIÓN FOTOCATALÍTICA DE HIDROGENO.....	294
APLICACIÓN DE LA ESPINELA $ZnAl_2O_4$ EN LA DETECCIÓN DE GAS PROPANO.....	299
ÍNDICE DE AUTORES.....	304

## CUANTIFICACIÓN DE UN TRUCO DE MAGIA: ESTÁTICA DE FLUIDOS

María del Rayo A. Aparicio Fernández, Orto Elio Aparicio Flores, Evguenii Kourmychev,  
María Fernanda Ramírez Mendoza.

Centro Universitario de los Lagos, UDG, mdevasnik@yahoo.com.mx

### INTRODUCCIÓN

Un truco de magia poco utilizado consiste en llenar una botella con agua hasta cierta altura, después se cubre la boca de la botella con una malla de plástico (una coladera de cocina funciona bien) y se muestra al público que al voltear rápidamente la botella, hasta dejarla completamente invertida, el agua no se sale, siempre y cuando la boca de la botella tenga un buen contacto con la malla de plástico. ¿A qué se debe esto? En este trabajo se estudió el fenómeno descrito utilizando como equipo experimental botellas de refresco, frascos de vidrio, mallas de plástico, mallas metálicas y agua con diferentes densidades. Parte del objetivo del desarrollo del trabajo fue enseñar a los estudiantes del curso de fluidos, cómo plantear un modelo matemático que explique un fenómeno que parece ir en contra del sentido común.

Basados en el hecho de que en anillos de diámetros muy pequeños (uno o dos milímetros) pueden formarse películas de agua debido a la tensión superficial de la misma, se planteó una hipótesis: la tensión superficial del agua y la presión atmosférica trabajan en conjunto para contrarrestar la presión del agua contenida en la botella, evitando que esta atraviese la malla y se derrame. Para probar o descartar la hipótesis se planteó y desarrolló un modelo matemático y de esa manera se cuantificó el fenómeno descrito.

### MARCO TEÓRICO

El efecto descrito anteriormente es el resultado de la intervención de varios fenómenos propios de los fluidos: presión del aire, fuerzas de adhesión entre el líquido y el contenedor, y presión del líquido sobre la parte inferior del mismo.

En un líquido las fuerzas entre sus moléculas se llaman fuerzas de cohesión, mientras que las fuerzas entre las moléculas del líquido y otro material (como las paredes del contenedor) se llaman fuerzas de adhesión (Lane, 2002). Una medida relativa de las fuerzas de cohesión y adhesión la proporciona el ángulo de contacto ( $\theta_{cont}$ ). El ángulo de contacto es el ángulo que se forma entre la superficie en contacto con el líquido y la superficie de este (ver figura 1).

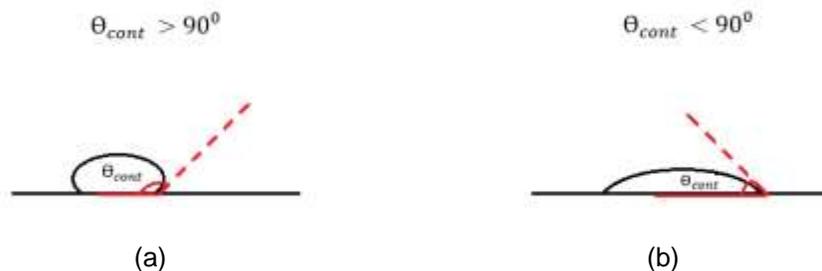


Figura 1 a) El líquido no moja la superficie, b) el líquido moja la superficie.

Cuando la magnitud de las fuerzas de cohesión es mayor que las fuerzas de adhesión se dice que el líquido no moja la superficie y  $\theta_{cont} > 90^\circ$ . En el caso contrario, cuando la magnitud de las fuerzas de adhesión es mayor que las fuerzas de cohesión, se dice que el líquido moja la superficie y  $\theta_{cont} < 90^\circ$ .

Si se tiene un líquido en contacto con un tamiz (malla muy cerrada) este puede o no mojar la superficie del tamiz. En el caso del “truco de magia” estudiado, el tamiz es la coladera que se usa y

el análisis del fenómeno se realizó suponiendo que el líquido (agua) no moja la superficie de la coladera, esta situación está representada en la figura 2.

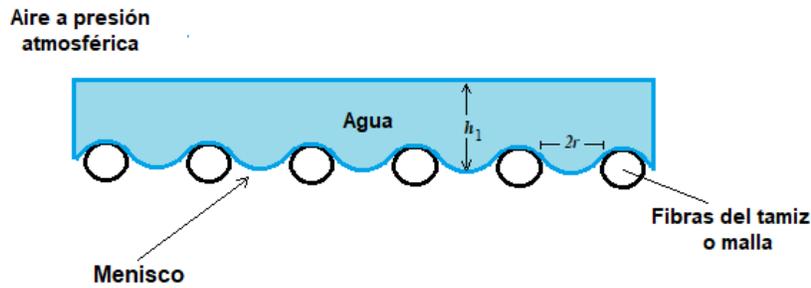


Figura 2. Líquido soportado por un tamiz. El líquido no moja el tamiz.

Para lograr un planteamiento de las ecuaciones que describen el comportamiento del agua que no escapa de la botella, primero se hizo el análisis de lo que sucede cuando se tiene agua sobre un tamiz y no lo moja (este es el caso del agua que queda "atrapada" en una coladera de cocina a la cual se le ha cubierto con cera, por ejemplo). En este caso el agua está en contacto con aire a presión atmosférica tanto en su superficie superior como inferior (ver figura 2).

En cada menisco que se forma entre las fibras del tamiz la presión  $\Delta P$  está dirigida al centro de la curvatura del mismo (Saveliev, 1984) y es igual a

$$\Delta P = \frac{2\gamma}{R} \quad (1)$$

donde  $R$  es el radio de curvatura del menisco y  $\gamma$  es el coeficiente de tensión superficial del líquido. En condición de equilibrio (el líquido está estático) esta presión es igual la presión hidrostática  $\rho g h_1$ , donde  $\rho$  es la densidad del líquido,  $g$  es la aceleración de la gravedad y  $h_1$  es el espesor de la capa de líquido sobre el menisco. Entonces

$$\rho g h_1 = \Delta P = \frac{2\gamma}{R} \quad (2)$$

que puede ser expresado por medio del ángulo de contacto  $\theta_{cont}$  y  $2r$ , que es la distancia promedio entre fibras del tamiz. Finalmente, la altura  $h_1$  del agua (Lane, 2002) es

$$h_1 = \frac{2\gamma}{\rho g r} \cos \theta_{cont} \quad (3)$$

Suponiendo el ángulo de contacto  $\theta_{cont}$  muy pequeño, se tiene  $\cos \theta_{cont} \approx 1$ ,

$$h_1 \approx \frac{2\gamma}{\rho g r} \quad (4)$$

Considerando la tensión superficial del agua igual a  $\gamma = 72.8 \times 10^{-3} \text{ N/m}$  ( $\text{J/m}^2$ ) y las aberturas del tamiz circulares, con diámetro promedio  $2r = 10^{-3} \text{ m}$  para el material que no se moja, de la ecuación (4) se obtiene que el nivel del agua que puede sostener el tamiz es  $h_1 \approx 0.03 \text{ m}$ . Este resultado se obtuvo bajo la suposición de que la forma de las aberturas del tamiz son circulares, las fibras no se superponen (el tamiz es plano) y el agua no lo moja (una malla encerada es un ejemplo de esta última suposición). El resultado significa que es posible recolectar agua sobre un tamiz hasta lograr una altura de aproximadamente 3 cm. Si no se cumplen las condiciones planteadas, la altura  $h_1$  disminuye significativamente.

Por otra parte, cuando el agua en una botella invertida, se sostiene por una malla de tamiz apretada contra la garganta de la botella, generalmente se tiene un volumen de aire encerrado en la botella (ver figura 3).

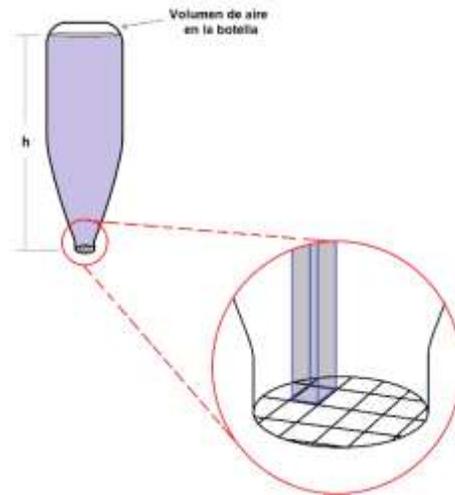


Figura 3. Esquema del experimento. La altura del agua es  $h$ .

El aire encerrado en la botella obedece la Ley de los gases ideales

$$PV = nRT \quad (5)$$

donde  $P$  y  $V$  son la presión y el volumen del gas respectivamente,  $n$  es el número de moles de gas,  $R$  es la constante universal de los gases y  $T$  la temperatura a la que se encuentra el gas. Se supuso que la temperatura del aire se mantiene constante durante la demostración del efecto, eso lo hace un proceso isotérmico. Para un proceso isotérmico de la ecuación (5) se tiene

$$PdV + VdP = 0 \quad (6)$$

La variación de la presión por el cambio del volumen del aire encerrado en la botella, se da por la fórmula (6). Entonces, la depresión causada por aumento del volumen del aire dentro de la botella será igual a

$$dP = -P \frac{dV}{V} \quad (7)$$

Con este resultado se llevó a cabo una valoración de la situación. Para una variación relativa del volumen del aire encerrado en la botella, igual a 0.0157, se obtuvo

$$dP = -P \frac{dV}{V} = -(1.01325 \times 10^5 \text{ Pa})(0.0157) = 0.01590 \times 10^5 \text{ Pa} \quad (8)$$

donde  $P = 1.01325 \cdot 10^5 \text{ N/m}^2$  es el valor de la presión atmosférica.

La condición de equilibrio de agua en una botella con la malla en la garganta es:

$$\rho gh = -dP + \Delta P = P \frac{dV}{V} + \frac{2\gamma}{R} \approx P \frac{dV}{V} + \frac{2\gamma}{r} \cos\theta_{cont} \quad (9)$$

De esta condición, usando los valores de ecuaciones (8) y (4) se obtiene la altura del líquido sostenido por la malla de la botella

$$h = \frac{1}{\rho g} \left( P \frac{dV}{V} + \frac{2\gamma}{r} \cos\theta_{cont} \right) \approx \frac{1}{\rho g} \left( P \frac{dV}{V} + \frac{2\gamma}{r} \right) = h_2 + h_1 = 0.162 \text{ m} + 0.03 \text{ m} = 0.192 \text{ m} \quad (10)$$

Nota: el valor de  $h_2 = \frac{1}{\rho g} \left( P \frac{dV}{V} \right) = 0.162 \text{ m}$  también se calculó previamente.

El resultado numerado con (10) predice que la altura del agua en la botella es aproximadamente 19.2 cm, lo que concuerda con los resultados experimentales.

### PARTE EXPERIMENTAL

Los materiales utilizados en los experimentos fueron una coladera de cocina y una botella de 600 ml llena con agua del grifo (ver figura 4).



Figura 4. Equipo utilizado para la reproducción del “truco de magia”.

Para el análisis del agua sobre un tamiz se utilizó la coladera y se vertía agua a gotas por la periferia de la misma.

Para el análisis del agua en la botella se llenó esta con agua del grifo y se llevó a cabo el experimento. Los resultados se muestran en la figura 5.

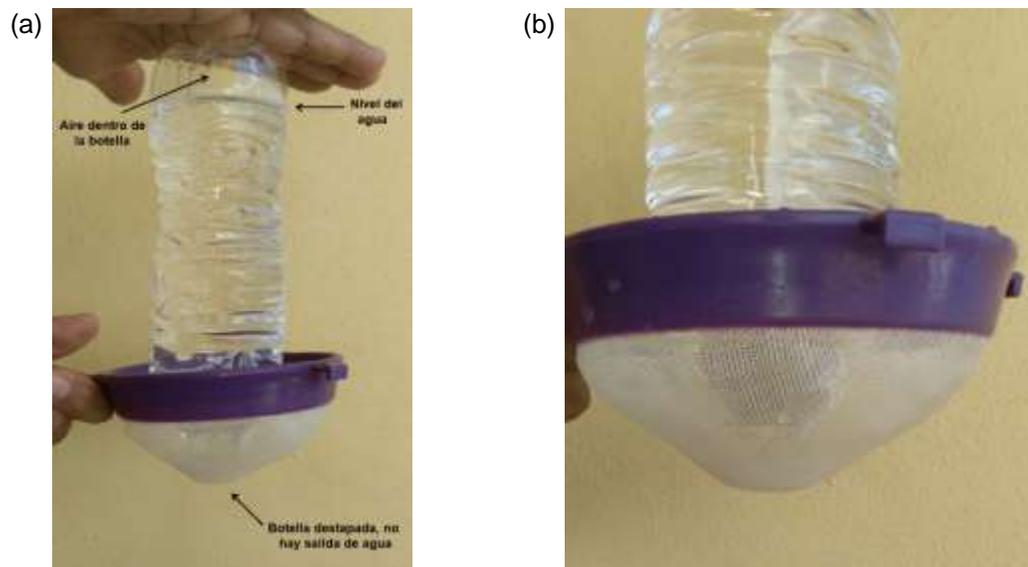


Figura 5. Resultados experimentales. a) Agua en la botella. b) Detalle de boca de la botella.

## CONCLUSIONES

Con base en el análisis de fenómenos involucrados en el “truco de magia” (tensión superficial, fuerzas de adhesión, y variación de la presión por la curvatura de meniscos de la interfase agua-aire-botella) se propuso el modelo y la explicación del fenómeno observado. Se establecieron las condiciones de equilibrio mecánico del agua en la botella con la garganta cerrada por un tamiz.

Apoyados por los resultados experimentales y las evaluaciones hechas con las expresiones matemáticas, resultado de la modelación del fenómeno, encontramos que el efecto que contribuye principalmente a que el “truco de magia” funcione, es la diferencia de presiones del aire encerrado en la botella y la presión atmosférica; la tensión superficial del agua participa de forma auxiliar en el efecto.

## REFERENCIAS

1. Lane, R. (2002). *Física Universitaria Vol. 2*. USA: International Thomson Editores.
2. Saveliev, I. (1984). *Física General Vol. 1*. URSS: MIR, pp. 393-404
3. [https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical\\_and\\_Theoretical\\_Chemistry\\_Textbook\\_Maps/Supplemental\\_Modules\\_\(Physical\\_and\\_Theoretical\\_Chemistry\)/Physical\\_Properties\\_of\\_Matter/States\\_of\\_Matter/Properties\\_of\\_Liquids/Surface\\_Tension](https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_(Physical_and_Theoretical_Chemistry)/Physical_Properties_of_Matter/States_of_Matter/Properties_of_Liquids/Surface_Tension)
4. <https://www.biolinscientific.com/blog/surface-tension-of-water-why-is-it-so-high>

## LA EVALUACIÓN ESPACIAL MULTICRITERIO COMO HERRAMIENTA PARA LA GESTIÓN DE RECARGA DE ACUÍFEROS

José Arturo Espinoza Bonilla, María Jesús Puy y Alquiza

Universidad de Guanajuato, División de Ingenierías, Campus Guanajuato.  
ja.espinozabonilla@ugto.mx

### RESUMEN

Ante la problemática global de la explotación intensiva de las aguas subterráneas, la Gestión de Recarga de Acuíferos (GRA), también denominado Manejo de Recarga de Acuíferos (MAR, por sus siglas en inglés de Managed Aquifer Recharge) representa una alternativa viable, económica y ambientalmente amigable para la recuperación de mantos freáticos sobreexplotados. Ésta consiste en un conjunto de técnicas que pretenden de manera general restringir la escorrentía superficial durante eventos de precipitación, favoreciendo así la infiltración del agua interceptada hacia los mantos acuíferos. Por su parte, la Evaluación Espacial Multicriterio (EMC) se fundamenta en un conjunto de operaciones espaciales encaminadas al logro de un objetivo particular, tomando en consideración de manera simultánea, todas las variables intervenidas<sup>1</sup>. Diversos autores como Matus, Bravo o Peñuela han utilizado con éxito la evaluación espacial multicriterio para la identificación y delimitación de zonas potenciales de recarga hídrica natural a partir del análisis sincrónico de indicadores superficiales<sup>2,3,4</sup>, siendo éste, un paso fundamental dentro de la metodología de aplicación de las técnicas MAR, permitiendo al investigador identificar las obras de recarga afines al terreno, así como los sitios óptimos para su instrumentación. En el presente trabajo se describen los fundamentos de la metodología EMC y dos ejemplos de su aplicación para la identificación de zonas de recarga hídrica natural. Dentro de estos, se reconocen siete factores biofísicos como relevantes para dicho proceso: pendiente del terreno; tipo de roca; tipo de suelo; uso de suelo y cobertura vegetal; densidad de fracturas, fallas y alineamientos y número de infiltración. Se enfatiza también en la utilidad e importancia de los Sistemas de Información Geográfica (SIG) para la optimización de los procesos EMC, permitiendo desarrollar, actualizar y gestionar mapas de potencial de recarga hídrica, brindando así un importante producto visual para el interesado, el cual será capaz de identificar con facilidad y un alto grado de certeza, sitios críticos para la implementación de un programa integral MAR, contribuyendo así a la recuperación de acuíferos sobreexplotados y/o degradados.

### INTRODUCCIÓN

La Revolución Industrial iniciada a mediados del siglo XVII en Gran Bretaña y extendida décadas después a América y al resto de Europa dio paso a un conjunto de transformaciones económicas, tecnológicas y sociales a nivel mundial, las cuales permitieron evolucionar de una economía rural a una economía de carácter urbano, industrializado y mecanizado. Dichas transformaciones, entre las que se incluyeron cambios en la alimentación, la generalización de la higiene y la sanidad, la difusión de medicamentos, la facilidad del comercio entre naciones y una mejora general en la calidad de vida, favorecieron el desarrollo de múltiples centros urbanos, los cuales pasaron a ser grandes y pobladas metrópolis. De acuerdo con la Organización de las Naciones Unidas<sup>5</sup>, la población mundial, la cual era de casi 1,000 millones en el año 1800, aumentó a más de 6,000 millones en el año 2000, alcanzando finalmente en el año 2020 los 7,700 millones de habitantes. Dicha situación, lejos de cesar o disminuir, se agrava continuamente, mismas estimaciones de la ONU pronostican para el año 2050 una población mundial de 9,700 millones de personas, pudiendo incluso llegar a un pico cercano a los 11,000 millones para el año 2100. Por su puesto, una sobrepoblación de tal magnitud, conlleva inevitablemente una serie de inconvenientes de diversa índole; seguridad, planeamiento urbanístico y distribución territorial, transporte, educación, salud, telecomunicaciones, obtención y abastecimiento de agua potable, gestión de los recursos naturales o protección de los ecosistemas son solo algunas de las diversas problemáticas que se deben de atender, cada vez con mayor dificultad, por parte del Estado para asegurar el bienestar

social de toda su población. Dentro de ellas, la obtención y el abastecimiento de agua potable sea posiblemente la más sensible e importante, esto por supuesto, debido al hecho de que el recurso hídrico es elemental para sustentar la vida, pero también, por su importancia económica, al tener aplicaciones directas o indirectas en prácticamente todas las actividades desarrolladas por el ser humano. La dificultad para gestionar el agua se ve condicionada de manera directa por su propia escasez, pues del total presente en el planeta tierra, poco menos del 3% es agua dulce apta para su consumo. A su vez, de este reducido porcentaje, más del 76% se encuentra permanentemente congelada en los polos terrestres, el 22% se encuentra como agua subterránea (acuíferos) y el restante como ríos, lagos, humedales y vapor atmosférico<sup>6</sup>. A causa de esto, resulta comprensible que el agua subterránea sea la principal fuente de abastecimiento para un elevado porcentaje de la población mundial. En el caso de México, el agua subterránea figura como la única fuente permanente de agua en regiones áridas y semiáridas (las cuales ocupan cerca del 50% del territorio nacional), representando cerca del 75% del volumen de agua utilizado en las ciudades y casi en su totalidad a la población rural del país<sup>7</sup>. Como consecuencia, 105 de los 653 acuíferos del país se han catalogado ya como sobreexplotados<sup>8</sup> (mayor extracción que recarga natural), condición que además ha contribuido al deterioro por intrusión marina y salinización en dieciocho de ellos.

Ante esta crítica situación cobra relevancia la denominada Gestión de Recarga de Acuíferos, antes llamada recarga artificial de acuíferos, la cual consiste en un conjunto de técnicas encaminadas a la recarga gestionada por el hombre de aguas subterráneas con aguas superficiales. Esto con el objetivo principal de recuperar los niveles freáticos de acuíferos sobreexplotados, así como para otros fines medioambientales como la mitigación de inundaciones, la reducción de erosión hídrica e intrusión salina, la recuperación de caudales base de ríos o la mejora en la calidad del agua de descarga mediante un tratamiento natural suelo-acuífero. Tanto en México como en el mundo se tiene evidencia de múltiples casos de éxito en la aplicación de las técnicas MAR. Un par de ejemplos serían la construcción, desde 1985, de miles de represas de tierra "johad" en la cuenca del río Arvari, India. Obras que a partir de 1995 han incrementado los niveles de agua subterránea, recuperando así un caudal permanente en el mencionado río<sup>9</sup>. A nivel nacional, destaca la implementación de un sistema constituido por un muro filtrante en el río Chuvíscar en el estado de Chihuahua, el cual permitió que, en el año 2017 tras 12 años ininterrumpidos de operación, se estabilizara el volumen de agua extraído del acuífero sin mayores abatimientos en sus pozos.

Así pues, dentro de las múltiples fases que integran los planes MAR, antes de dar paso a la elaboración de líneas estratégicas para la ejecución del proyecto o la definición de fuentes de financiación, será de nuestro interés conocer previamente el potencial de recarga natural presente en la zona de estudio, determinando desde una fase temprana del proyecto, la viabilidad y utilidad de incorporar un plan integral de manejo de recarga de acuíferos. Para ello resulta fundamental la ejecución de un análisis sistemático que evalúe la interacción del agua superficial y subterránea con el resto de los componentes biofísicos de la cuenca, los cuales determinarán en gran medida su dinámica y disposición en la corteza terrestre. Para el logro de dicho objetivo, la evaluación espacial multicriterio supone una herramienta sumamente útil que permite ponderar y combinar diversas variables del terreno, generando así índices de aptitud para, en este caso, identificar y delimitar las zonas con mayor aptitud para la recarga hídrica. Si bien, este proceso de ponderación y combinación se hacía antiguamente mediante la superposición manual de cartografía de papel, la evolución de los ordenadores, periféricos y elementos informáticos permitió el desarrollo de los potentes sistemas de información geográfica, softwares que facilitaron al investigador el almacenamiento, lectura, análisis, edición, y gestión de datos espaciales, así como la generación de resultados tales como mapas, informes o gráficos. De esta manera, con la integración de las técnicas de evaluación espacial multicriterio y la tecnología SIG, no solo se consigue optimizar el proceso de identificación de zonas de recarga hídrica para el investigador, sino que, la generación de resultados gráficos más intuitivos, como sería por ejemplo un mapa de potencial de recarga hídrica, facilita también la presentación y difusión de la información desarrollada y los resultados obtenidos a todas las partes interesadas que formen parte de un proyecto MAR. Estos resultados

permiten, además, la exposición sencilla del funcionamiento del ciclo hidrológico, el grado de interdependencia con el resto de los componentes biológicos, físicos y climáticos, y la situación de los recursos hídricos dentro de su localidad, facilitando con ello la identificación de amenazas y alternativas de solución durante etapas posteriores del proyecto de gestión y recarga. Por último, se debe de considerar la eficacia de la metodología EMC como herramienta participativa multisectorial, permitiendo definir y establecer de manera conjunta con todos los involucrados en el proyecto, las metas a cumplir de acuerdo con los problemas particulares presentes en el acuífero, los atributos biofísicos que deben de ser evaluados (así como su importancia relativa), y el conjunto de alternativas viables para dar solución al problema como parte de un plan integral de gestión de recarga de acuíferos.

## TEORÍA

### Manejo de Recarga de Acuíferos y su clasificación

El manejo de recarga de acuíferos es la introducción intencional y tratamiento de agua en los acuíferos para su subsecuente recuperación o un beneficio ambiental<sup>10</sup>. De manera general se podría describir como un conjunto de acciones y tecnologías encaminadas principalmente al almacenamiento de agua en el subsuelo para su uso futuro, sin embargo, otros beneficios comunes de las técnicas MAR son<sup>9</sup>: mitigación de inundaciones, reducción de la escorrentía y la erosión, mejora en la calidad del agua de las aguas costeras, control de subsidencia, aumento de los caudales mínimos en los ríos y la disminución en la fluctuación de la calidad del agua de recarga y su relación de abastecimiento oferta/demanda. Los procedimientos ideados para la ejecución de las técnicas MAR son múltiples, sin embargo, es común el establecimiento de dos grandes grupos<sup>11</sup>, los cuales se resumen en la tabla 1: las técnicas que infiltran agua y las que la interceptan; respecto a la técnica de infiltración, esta se subdivide en tecnologías de infiltración mediante la distribución del agua o la utilización de pozos. En el caso de la técnica de intercepción de agua, esta se divide en tecnologías de modificación de cauces de arroyos y ríos, y la captación de agua de lluvia.

Tabla 1. Clasificación de técnicas MAR. Recuperado de (Escolero, Gutiérrez, & Mendoza, 2017)<sup>11</sup>.

Técnica	Tecnología	Clasificación
INFILTRAR AGUA	Distribución	Infiltración inducida
		Cuencas y estanques de infiltración
		Tratamiento suelo-acuífero (TSA)
		Inundación controlada
	Pozos	Riego
		Pozos de recarga someros
		ASR
INTERCEPTAR AGUA	Modificación de cauce de arroyos y ríos	ASTR
		Estanques de percolación a represas de control, gaviones
		Presas de arena para almacenamiento
		Presas subsuperficiales (subterráneas)
		Filtro de bancos de río (RBF)
	Captación de agua de lluvia	Filtración inter-dunar
		Técnicas de ampliación de los cauces
		Recolección de agua de lluvia
		Zanjas de infiltración, tinas ciegas, surcos, anillos de agua, jaguey y terraplenes

Cabe reiterar que la implementación exitosa de una u otra técnica dependerá de las características geográficas y físicas de la región en la que se busca ejecutar, sus parámetros climáticos, su potencial natural de recarga hídrica, así como de la capacidad económica y técnica que se disponga para la adaptación e instrumentación de las distintas obras de recarga; por lo que el abanico de posibilidades en cuanto a técnicas disponibles es prácticamente ilimitado.

### **Evaluación Espacial Multicriterio**

La evaluación espacial multicriterio (EMC) supone una importante herramienta para la planificación territorial y la gestión de los recursos naturales, entre las que se puede incluir la implementación de obras de recarga hídrica. Las técnicas EMC se fundamentan en la ponderación y combinación de variables geoespaciales en un sistema de información geográfica (SIG), bajo un esquema que permite generar índices de aptitud para algún uso o actividad determinada. Los SIG resultan útiles por su capacidad de analizar los datos geográficos que definen el problema a tratar y a resolver mediante la planificación territorial y ambiental. Facilitan, además, la cartografía de los diferentes aspectos que inciden en la cuestión a conocer; y permiten, mediante la superposición y otras formas de manipulación de la información, combinar datos y observar alguna de sus interrelaciones<sup>12</sup>.

A este tipo de manipulaciones y combinaciones dentro de las técnicas EMC se les denomina álgebra de mapas. Las cuales consisten en el análisis de un conjunto de datos espaciales (capas de datos geográficos, tablas de datos, o escalares y vectores) mediante la combinación de un tipo único de datos o de varios a través de una operación o procedimiento concreto<sup>13</sup>. Por lo tanto, los distintos elementos con los que se trabaje dentro de una o varias capas de información geográfica cobrarán relevancia relacionándose entre sí, generando resultados en función de ellas. Las operaciones espaciales empleadas con mayor frecuencia son<sup>13</sup>: superposición (overlying), unión, intersección, generalización (disolver) extracción (cortar), buffer (áreas de influencia), análisis de proximidad y reclasificación<sup>14</sup>.

### **Regionalización ecológica e identificación y ponderación de atributos**

Una de las cuestiones centrales en las etapas de caracterización y diagnóstico en los diferentes esquemas de ordenamiento del territorio, y para este caso particular la implementación de técnicas de recarga de acuíferos, es la regionalización ecológica, que de manera general consistirá en delimitar espacios geográficos relativamente homogéneos en función del medio físico y biológico<sup>15</sup>, teniendo como objetivos la caracterización, análisis y discretización del medio biofísico a través del uso de cartografía, productos de la percepción remota, bibliografía y trabajo de campo<sup>15</sup>; siendo esto sumamente necesario para la evaluación de la aptitud del terreno de acuerdo a las necesidades u objetivos ambientales y territoriales que se hayan establecido previamente. Estas unidades espaciales y sus atributos deben describir tanto los componentes relativamente estables del terreno (roca, forma del relieve y suelos), como los menos estables, cuya tasa de cambio en el tiempo es más alta (vegetación y uso del suelo, fauna)<sup>15</sup>. Si bien no existe un procedimiento específico para seleccionar el conjunto de atributos de evaluación, como regla general, estos deberán de ser seleccionados considerando las propiedades que los atributos tienen para representar adecuadamente la naturaleza multiatributo del problema, de esta manera, los atributos serán específicos para cada problema, y podrán ser establecidos mediante una revisión de la literatura relevante, estudios analíticos (modelos de simulación) y opiniones del público<sup>15</sup>. Cualquiera sea el caso, se buscará que cada atributo sea comprensible y medible, y el conjunto de ellos, completo, operacional, descomponible, no redundante y mínimo<sup>15</sup>.

Así pues, una vez identificados los atributos, será necesario establecer la importancia relativa de cada uno de ellos. Entre los métodos que se pueden emplear para dicho objetivo se encuentran<sup>15</sup>: grupo nominal, Delphi, clasificación, proporción, Proceso Analítico Jerárquico y SMART. Estos métodos variaran por su puesto en su grado de dificultad, supuestos teóricos y rigor; y el método a utilizar deberá de ser elegido de acuerdo con los atributos que se vayan a evaluar, su número, y

finalmente con base en las propias preferencias de los participantes del proyecto. Un método fácil de emplear sería el de proporción, el cual consiste en estimar pesos con base en una escala predeterminada, por ejemplo, una escala de 0 a 100, donde 0 indica que el atributo puede ser ignorado y 100 representa la situación donde solo se necesita considerar un atributo para una decisión dada, es decir, se repartirán los 100 puntos entre los atributos de interés, indicando una importancia relativa mayor mientras más puntos reciba un determinado atributo.

### **Generación de mapas temáticos y sus operaciones espaciales en un SIG**

Una vez establecido el conjunto de atributos de decisión, cada atributo debe ser representado como una mapa en una base de datos de un Sistema de Información Geográfica (SIG). Estos mapas se denominan mapas de atributos y representan la distribución espacial de un atributo, generándose a partir de bases de datos que incluyen la distribución geográfica de los diferentes valores que adopta dicho atributo<sup>15</sup>, constituyendo así el insumo necesario para el análisis de decisión multicriterio. Respecto al proceso de análisis espacial raster utilizando dichos mapas temáticos, se le podría considerar como el conjunto de métodos que permiten al usuario del dato generar nueva información partiendo de la ya existente en función de un objetivo. Entre los métodos u operaciones analíticas empleados con mayor frecuencia en los análisis multicriterio para analizar los datos espaciales raster se encuentran la reclasificación y superposición de mapas.

La operación de reclasificación es una técnica de generalización utilizada para reasignar valores de una capa de entrada raster, como pueden ser la posición, el valor, la forma, el tamaño, la medida de los píxel o el grado de contigüidad y de esa manera crear una nueva capa de datos<sup>14</sup>. Esta operación se realiza sobre un solo mapa, posibilitando la búsqueda y recuperación selectiva de los datos raster almacenados en las bases de datos espaciales<sup>14</sup>, pudiendo crear a partir de una capa de valores continuos una capa de clases con información discreta y clasificaciones menos detalladas, agrupando clases similares en una única<sup>16</sup>. Un ejemplo común en la aplicación de esta operación sería la reclasificación de un Modelo Digital de Elevación (DEM por sus siglas en inglés), donde a partir de un mapa que contiene inicialmente valores continuos de alturas de terreno se realiza una generalización de estos, reclasificándolo así en un número específico de intervalos.

Por su parte el método de superposición de mapas consiste en la combinación de dos o más capas o mapas, en donde cada celda (píxel) referencia la misma localización geográfica y con la cual se genera una nueva capa o mapa que contiene la combinación de la información de las capas de entrada<sup>14</sup>. Un ejemplo de esta operación sería la superposición de un mapa de relieve (orografía) que contiene los valores de alturas del terreno, con un mapa de recursos eólicos que contiene los valores de velocidades del viento, con lo que se podrían identificar posibles zonas factibles para la ubicación de parques eólicos.

### **PARTE EXPERIMENTAL**

A continuación, se presentan dos ejemplos de metodologías en la aplicación de las técnicas de evaluación espacial multicriterio para la determinación de zonas potenciales de recarga hídrica subterránea.

#### **Identificación de zonas con potencial de recarga hídrica en la subcuenca del río Jucuapa, Nicaragua.**

En el trabajo realizado por Matus, Faustino y Jiménez<sup>2</sup> en el año 2009, los autores presentan un caso práctico en la aplicación de las técnicas de evaluación multicriterio para la determinación de zonas potenciales de recarga hídrica en la subcuenca del río Jucuapa en Nicaragua. Es importante hacer énfasis en la metodología propuesta por los autores, la cual es presentada como una guía conformada por diez pasos, facilitando así su replicación en otras áreas. De esta manera, atendiendo a la naturaleza participativa e integral de los proyectos de manejo de recarga de acuíferos, los pasos propuestos por los autores son los siguientes: 1) evaluación biofísica y socioeconómica de las cuencas de interés, definiendo así las zonas en las que se aplicará la

metodología, 2) capacitación de los habitantes de las comunidades con el objetivo de familiarizarlos con los conceptos involucrados en la identificación de zonas potenciales de recarga hídrica, 3) identificación y ubicación de las fuentes de agua como pozos o manantiales, 4) análisis teórico en colaboración con los habitantes del lugar para identificar las posibles zonas de recarga, 5) evaluación de los elementos biofísicos que condicionan la recarga hídrica, 6) determinación del potencial de recarga de las zonas evaluadas, 7) elaboración del mapa de zonas potenciales de recarga hídrica, 8) caracterización de las zonas identificadas, determinado así aquellas características que puedan estar afectando la recarga hídrica, 9) propuesta de recomendaciones para la implementación de estrategias y acciones que garanticen la sostenibilidad de los flujos de recarga y la calidad del agua, y 10) difusión de los resultados con el objetivo de mantener un ambiente de trabajo participativo entre habitantes de la zona, organismos e instituciones.

Entre estos pasos es posible identificar que el cinco, seis y siete corresponden a las técnicas de evaluación multicriterio que se han descrito anteriormente en el apartado teórico. Comenzando con el paso cinco, el cual busca la evaluación de los elementos biofísicos que condicionan la recarga hídrica, objetivo que se logrará mediante la elaboración y análisis en un SIG de los mapas temáticos o de atributos definidos para la zona, elaborándolos por completo a partir de trabajo de campo y fotointerpretación o desarrollándolos a partir de información digital preexistente. Los atributos biofísicos propuestos por los autores para dicha evaluación son: 1) pendiente del terreno y microrelieve, 2) tipo de suelo, 3) tipo de roca, 4) cobertura vegetal permanente y 5) usos del suelo. Así mismo, los autores proponen una ponderación de la posibilidad de recarga hídrica para cada uno de estos atributos, los cuales constan de cinco rangos de aptitud, a los que se les asigna una calificación de 1 (Muy baja), 2 (Baja), 3 (Media), 4 (Alta) y 5 (Muy alta) con base a la idoneidad que presentan al proceso de recarga hídrica, brindando de esta manera los intervalos y ponderaciones con los que será posible realizar la reclasificación de los mapas dentro del paso seis. A continuación, se muestran las ponderaciones de posibilidad de recarga hídrica para los distintos atributos:

a) Pendiente y microrelieve: de manera general en lugares con relieves planos, semiplanos o cóncavos se favorece el proceso de infiltración y recarga hídrica, ya que se tendrá un mayor tiempo de contacto agua-superficie, aumentando así la capacidad de infiltración. Por el contrario, en pendientes más fuertes se favorece el escurrimiento superficial, disminuyendo con ello la capacidad de infiltración. En la tabla 2 se muestra la ponderación propuesta por los autores<sup>2</sup> de la posibilidad de recarga hídrica según la pendiente del terreno y su microrelieve.

Tabla 2. Ponderación de la posibilidad de recarga hídrica según la pendiente del terreno. Recuperado de (Matus, Faustino, & Jiménez, 2009)<sup>2</sup>.

Descripción	Pendiente (%)	Pendiente (grados)	Posibilidad de recarga	Ponderación
Plano a casi plano, con o sin rugosidad	0 - 6	0° - 3.4°	Muy Alta	5
Moderadamente ondulado o cóncavo	6 - 15	3.4° - 8.5°	Alta	4
Ondulado/cóncavo	15 - 45	8.5° - 24°	Moderada	3
Escarpado	45 - 65	24° - 33°	Baja	2
Fuertemente escarpado	> 65	>33°	Muy Baja	1

b) Tipo de suelo: la infiltración de agua en el suelo estará determinada en mayor medida por su textura, porosidad, permeabilidad y compactación. Por lo tanto, para que exista una alta capacidad

de infiltración, los suelos deben ser permeables, es decir, suelos con textura gruesa y porosos. Por el contrario, suelos de textura fina, arcillosos, pesados y compactados dificultarán o inclusive impedirán la recarga hídrica. En la tabla 3 se muestra la ponderación propuesta por los autores<sup>2</sup> de la posibilidad de recarga hídrica según el tipo de suelo.

Tabla 3. Ponderación de la capacidad de recarga hídrica del suelo según su textura. Recuperado de (Matus, Faustino, & Jiménez, 2009)<sup>2</sup>.

Textura	Posibilidad de recarga	Ponderación
Suelos franco-arenosos a arenosos, con tamaño de agregados o partículas de gruesos a medios, con muy rápida capacidad de infiltración (más de 25 cm/h).	Muy alta	5
Suelos francos, con partes iguales de arena, limo y arcilla, con rápida capacidad de infiltración (12,7 – 25 cm/h).	Alta	4
Suelos franco-limosos, con partículas de tamaño medio a finas, con moderada a moderadamente rápida capacidad de infiltración (2 – 12,7 cm/h).	Moderada	3
Suelos franco-arcillosos, combinación de limo y arcilla, con partículas finas, suelos pesados, con muestras de compactación, con lenta a moderadamente lenta capacidad de infiltración (0,13 – 2 cm/h).	Baja	2
Suelos arcillosos, muy pesados, con partículas muy finas, compactados, con muy lenta capacidad de infiltración (menos de 0,13 cm/h).	Muy baja	1

c) Tipo de roca: los parámetros de porosidad y permeabilidad presentes en la roca determinarán su capacidad de recarga y almacenamiento. De manera general, las rocas compactas, con poros finos y sin facturación no favorecerán la recarga, por el contrario, las rocas más suaves o permeables, con poros grandes e interconectados, con presencia de fallas o fracturas si favorecerán el flujo y la recarga de agua a los acuíferos. En la tabla 4 se muestra la ponderación propuesta por los autores<sup>2</sup> de la posibilidad de recarga hídrica según el tipo de roca.

Tabla 4. Ponderación de la posibilidad de recarga hídrica según el tipo de roca. Recuperado de (Matus, Faustino, & Jiménez, 2009)<sup>2</sup>.

Roca	Posibilidad de recarga	Ponderación
Rocas muy permeables, muy suaves, constituidas por cristales o agregados gruesos, con macroporos interconectados; por ejemplo, arena gruesa, piedra pómez, grava o cascajo.	Muy alta	5
Rocas permeables, suaves, constituidas por cristales o agregados medianos, con poros interconectados; por ejemplo, arena fina o arenisca con poca cementación.	Alta	4
Rocas moderadamente permeables, semisuaves, con regular conexión entre poros.	Moderada	3
Rocas poco permeables, un poco duras, moderadamente compactadas, constituidas por partículas finas, con presencia de fracturas interconectadas; por ejemplo, la combinación de gravas con arcillas.	Baja	2
Rocas impermeables, duras, cementadas, compactadas, constituidas por partículas muy finas, sin presencia de fracturas	Muy baja	1

d) Cobertura vegetal permanente: consiste en el porcentaje de estratos vegetales perennes localizados sobre el suelo del área de estudio, pudiendo ser árboles, arbustos, hierbas o una combinación de ellos. De manera general una buena cobertura vegetal favorecerá la infiltración y disminuirá la erosión hídrica. En la tabla 5 se muestra la ponderación propuesta por los autores<sup>2</sup> de la posibilidad de recarga hídrica según el porcentaje de cobertura vegetal permanente.

Tabla 5. Ponderación de la posibilidad de recarga hídrica según el porcentaje de cobertura vegetal. Recuperado de (Matus, Faustino, & Jiménez, 2009)<sup>2</sup>.

Cobertura vegetal permanente (%)	Posibilidad de recarga	Ponderación
>80	Muy alta	5
70 – 80	Alta	4
50 – 70	Moderada	3
30 – 50	Baja	2
<30	Muy baja	1

e) Usos del suelo: este parámetro busca establecer la existencia de actividades que favorecen la infiltración hídrica, como los sistemas silvopastoriles y agroforestales, o los asociados de cultivo, y por otro lado las actividades que favorecen la compactación y erosión del suelo, mismas que potencian la evaporación hídrica, disminuyendo así la capacidad de infiltración del suelo. En la tabla 6 se muestra la ponderación propuesta por los autores<sup>2</sup> de la posibilidad de recarga hídrica según los usos del suelo

Tabla 6. Ponderación de la posibilidad de recarga hídrica según los usos del suelo. Recuperado de (Matus, Faustino, & Jiménez, 2009).

Uso del suelo	Posibilidad de recarga	Ponderación
Bosque donde se dan los tres estratos: árboles, arbustos y hierbas o zacate denso	Muy Alta	5
Sistemas agroforestales o silvopastoriles	Alta	4
Terrenos cultivados y con obras de conservación de suelo y agua	Regular	3
Terrenos cultivados sin ninguna obra de conservación de suelo y agua	Baja	2
Terrenos agropecuarios con manejo intensivo	Muy Baja	1

Establecidos los atributos y su ponderación, el siguiente paso de la evaluación multicriterio y sexto dentro de la metodología<sup>2</sup>, consiste en determinar el potencial de recarga de las zonas evaluadas. Para dicho objetivo los autores<sup>2</sup> proponen estimarlo mediante la ecuación 1, la cual han denominado *ecuación de recarga hídrica*, misma que consiste en la suma de los productos entre la ponderación definida para cada uno de los atributos y su peso relativo dentro de la evaluación, dando como resultado, al igual que las ponderaciones de los atributos, un número comprendido entre uno y cinco según la capacidad de recarga hídrica de la zona evaluada.

$$ZR = [0.27 (Pend) + 0.23 (Ts) + 0.12 (Tr) + 0.25 (Cve) + 0.13 (Us)] \quad (1)$$

La asignación de pesos relativos a cada atributo se ha determinado en función de la importancia de ese atributo en el proceso de infiltración del agua, lo que significa que los criterios que más condicionan la infiltración del agua en el suelo serán los de mayor importancia. En el caso de los indicadores presentes en la ecuación anterior, corresponden a los pesos relativos consensuados para una subcuenca particular en la región central de Nicaragua, de modo que estos no son únicos y deberán modificarse según las características de la cuenca que se esté estudiando. Como se ha mencionado anteriormente, el método de proporción es una alternativa sencilla para la asignación de pesos relativos, proceso en el que será conveniente contar con la experiencia de extensionistas locales, habitantes e instituciones, así como con una extensa consulta bibliográfica que permita tomar como referencia los pesos relativos establecidos en casos de estudio similares.

Cabe mencionar que, si bien la ecuación de recarga hídrica resulta sumamente útil para la determinación del potencial de recarga en sitios puntuales de la cuenca, la utilización de un Sistema de Información Geográfica permitirá la evaluación de mayores extensiones de terreno de manera semiautomática. Por ejemplo, en el caso del SIG ArcMap, se podrá realizar la reclasificación de las unidades de mapeo con la herramienta de análisis especial *Reclassify*, así mismo, se podrá aplicar el principio de la *ecuación de recarga hídrica* mediante la superposición ponderada de los mapas de atributos con la herramienta *Weighted Overlay*, herramienta en la que únicamente será necesario introducir como información las capas de atributos a evaluar y los pesos relativos establecidos para cada uno de ellos. Finalmente, mediante esta superposición ponderada, el SIG entregará como producto una nueva capa que mostrará la delimitación y distribución de los distintos potenciales de recarga hídrica dentro del área de estudio, concluyendo con ello la evaluación multicriterio de la zona y por lo tanto el séptimo paso dentro de la metodología propuesta por los autores<sup>2</sup>, la elaboración de un mapa de potencial de recarga hídrica. En la figura 1 se muestra dicho mapa desarrollado para la subcuenca del río Jucuapa, Nicaragua, en la que se observan los rangos de potencial de recarga hídrica, desde muy bajo a muy alto.

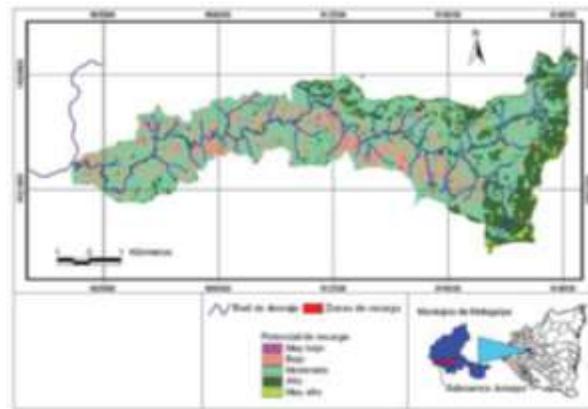


Figura 1. Mapa de potencial de recarga hídrica de la subcuenca del río Jucuapa. Recuperado de (Matus, Faustino, & Jiménez, 2009)<sup>2</sup>.

### **Identificación de áreas con potencial de recarga hídrica al acuífero Cuauhtémoc, Chihuahua.**

Para este caso práctico de aplicación, los autores Bravo et al<sup>3</sup> desarrollaron una evaluación multicriterio para ubicar áreas de recarga del acuífero Cuauhtémoc, uno de los acuíferos en condición más crítica del estado de Chihuahua. La metodología propuesta por los autores<sup>3</sup> para la EMC, guardando similitud con la metodología anterior, comienza con la identificación de factores o atributos y la generación de la cartografía temática. Para este caso los autores identifican y proponen seis atributos espaciales: 1) pendiente del terreno, 2) geología, 3) densidad de fracturas

y alineamientos, 4) edafología, 5) uso del suelo y 6) número de infiltración, mismos que fueron cartografiados a partir de información digital preexistente, fotointerpretación, procesamiento espectral y edición de bases de datos cartográficos. Continuando con la metodología, una vez establecidos y cartografiados los atributos, estos se subdividieron en rangos de aptitud con base a la capacidad que presentan al proceso de recarga hídrica, generando así los intervalos y ponderaciones necesarios para el proceso de reclasificación de los mapas. En la tabla 7 se muestran los rangos de aptitud por factor propuestos por los autores<sup>3</sup>.

Tabla 7. Grados de aptitud por factor. Recuperado de (Bravo, y otros, 2015).

<b>Factor</b>	<b>Aptitud</b>
<b>Pendiente °(Pe)</b>	
0 - 6°	5
6 - 15°	4
15 - 45°	3
45 - 65°	2
Mayor a 65°	1
<b>Geología (Ge)</b>	
Aluvial, Eólico	5
Arenisca, Conglomerado	4
Conglomerado	3
Andesita, Granodiorita, Riolita, Toba acida	2
Basalto	1
<b>Densidad de Fracturas y Alineamientos (km/km2)(Dfa)</b>	
2.59 y mayores	5
1.94 - 2.58	4
1.29 - 1.93	3
0.64 - 1.28	2
0 - 0.63	1
<b>Edafología (Ed)</b>	
Cambisol, Phaozem, Regosol, Umbrisol	3
Luvisol, Planosol	2
Durisol, Gleysol, Leptosol, Vertisol	1
<b>Uso de suelo y Vegetación (USV)</b>	
Bosques, matorrales y Vegetación riparia	5
Agricultura de perennes (huertas)	4
Agricultura de anuales	3
Asentamientos humanos	2
Cuerpos de agua	1
<b>Número de infiltración (If)</b>	
0 - 6.57	5
6.58 - 18.26	4
18.27 - 39.04	3
39.05 - 101.15	2
101.16 y mayores	1

Como ya se ha observado en la metodología anterior, una vez que se han clasificado los niveles de aptitud para cada parámetro y los mapas han sido reclasificados de acuerdo con dichos niveles, estos deben ser ponderados y superpuestos, asignando un peso numérico o jerarquía de importancia a cada uno de los mapas según su relevancia dentro de la evaluación. De la misma manera que Matus, Faustino, & Jiménez<sup>2</sup>, los autores<sup>3</sup> proponen ejecutar la evaluación multicriterio mediante una sumatoria lineal ponderada que integra los pesos de cada factor como se muestra en la ecuación 2, donde  $A_p$  será la aptitud para la recarga hídrica,  $w$  el peso del factor y  $x$  el factor, obteniendo como resultado una vez que se aplique la ecuación, un número entre uno a cinco según la capacidad de recarga hídrica de la zona evaluada. Resulta necesario insistir en que el peso de cada atributo dentro de la superposición deberá de modificarse según las características de la cuenca que se esté estudiando.

$$A_p = \sum w_i x_i \quad (2)$$

Finalmente, la aplicación de la sumatoria lineal ponderada para múltiples zonas evaluadas y la generación de un mapa de potencial de recarga hídrica se verán nuevamente optimizadas con la utilización de un SIG, el cual permitirá ejecutar dicha sumatoria de manera semiautomática mediante la superposición ponderada de los diferentes mapas temáticos reclasificados, introduciendo como única información a la herramienta de análisis los mapas a evaluar y su peso relativo. En la figura 2 se muestra el mapa de aptitud de recarga hídrica desarrollado por Bravo et al<sup>3</sup> para el área de captación del acuífero Cuauhtémoc, concluyendo con ello su análisis EMC en el área de estudio.



Figura 2. Áreas potenciales de recarga hídrica natural del acuífero Cuauhtémoc. Recuperado de Bravo et al, 2015<sup>3</sup>.

## RESULTADOS

A partir del estudio de bibliografía especializada en Sistemas de Información Geográfica, ordenamiento territorial, y gestión integral del agua, así como del análisis de los casos prácticos expuestos, se identifican y proponen tres pasos fundamentales dentro de la metodología para la aplicación de las técnicas de Evaluación Espacial Multicriterio (EMC) como herramienta para la determinación de zonas potenciales de recarga hídrica, siendo esta información indispensable dentro de un plan de Manejo de Recarga de Acuíferos. Los pasos propuestos son los siguientes:

1. Evaluación de los atributos biofísicos que condicionan la recarga hídrica en el área de estudio: para ello se deberán de identificar primero los atributos que condicionan la recarga hídrica en el área que se está estudiando. Se sugiere considerar los atributos de pendiente del terreno, tipo de suelo, tipo de roca, cobertura vegetal y uso del suelo, densidad de fracturas y alineamientos y número de infiltración, ya que estos factores han sido útiles y se han evaluado con éxito en diversos proyectos encaminados a la identificación y evaluación de zonas de recarga hídrica. Posteriormente, una vez identificados dichos atributos se realizará la regionalización ecológica de la zona y se desarrollarán, con ayuda de un SIG, los mapas temáticos para cada uno de ellos, elaborándolos completamente a partir de trabajo de campo y fotointerpretación o desarrollándolos a partir de información digital preexistente.

2. Ponderación de los atributos y reclasificación de los mapas temáticos: se comenzará por establecer una ponderación de la posibilidad de recarga hídrica para cada uno de los atributos, para ello se sugiere considerar los rangos propuestos tanto por Matus, Faustino y Jiménez<sup>2</sup> como por Bravo et al<sup>3</sup>, asignando a cada rango establecido una calificación de 1 (Muy baja), 2 (Baja), 3 (Media), 4 (Alta) y 5 (Muy alta) con base a la idoneidad que presentan al proceso de recarga hídrica, realizando posteriormente la reclasificación de cada uno de los mapas temáticos con estos mismos intervalos y ponderaciones. Para realizar dicha reclasificación de unidades de mapeo se sugiere utilizar algún SIG, en el caso del SIG ArcMap se dispone de la herramienta *Reclassify*.

3. Determinación del potencial de recarga hídrica de las zonas evaluadas: para dicho objetivo se sugiere también la utilización de un Sistema de Información Geográfica. En el caso de utilizar ArcMap, la herramienta espacial que permite realizar una sumatoria lineal ponderada es la de *Weighted Overlay*. Para ejecutar esta operación espacial, solo será necesario introducir como información las capas raster reclasificadas de los distintos atributos y el peso relativo establecido para cada uno de ellos. Para el establecimiento de los pesos relativos se sugiere el método de proporción, repartiendo 100 puntos entre los atributos de interés, indicando una importancia relativa mayor mientras más puntos reciba un determinado atributo. Para dicha tarea se aconseja realizar una consulta entre los extensionistas locales, habitantes e instituciones, así como una extensa consulta bibliográfica que permita tomar como referencia los pesos relativos establecidos en casos de estudio similares. Finalmente, una vez desarrollada esta superposición de mapas, el SIG entregará como resultado una nueva capa raster que contendrá los diferentes potenciales de recarga hídrica natural presentes en la zona evaluada. Si se ha utilizado el sistema de calificación propuesta, este nuevo mapa raster contendrá los valores de 1 (Muy baja), 2 (Baja), 3 (Media), 4 (Alta) y 5 (Muy alta) capacidad de recarga hídrica, permitiendo identificar así las zonas óptimas para la implementación de obras de recarga hídrica como parte de un plan de manejo de recarga de acuíferos.

## CONCLUSIÓN

La explosión demográfica acaecida a nivel mundial durante las últimas décadas ha generado un impacto negativo en la disponibilidad y gestión de los recursos hídricos, situación que, entre muchos otros problemas, a provocado que un gran número de acuíferos sean aprovechados hasta la sobreexplotación, sobre todo en zonas áridas y semiáridas. Ante esta crítica situación, la gestión de recarga de acuíferos se concibe como un conjunto de técnicas simples, económicas y efectivas de recarga hídrica artificial, reduciendo con ello su tiempo y dificultad de instrumentación frente a las obras civiles de recarga tradicionales. Dentro de la extensa metodología y múltiples etapas que componen la implementación de un plan integral de manejo de recarga de acuíferos, la identificación y delimitación de las zonas potenciales de recarga hídrica natural es sumamente importante, permitiendo redirigir los análisis espaciales posteriores y toma de decisiones a sitios concretos del área que se esté estudiando. Para realizar dicha delimitación, resulta útil la utilización de la técnica de Evaluación Espacial Multicriterio (EMC), la cual permitirá evaluar los distintos atributos biofísicos que condicionan la recarga hídrica de manera simultánea. Por lo tanto, a partir del análisis de bibliografía especializada y casos prácticos de aplicación, se proponen tres pasos o

etapas para la aplicación de las técnicas EMC para la identificación de áreas potenciales de recarga hídrica: 1) evaluación de los atributos biofísicos que condicionan la recarga hídrica en el área de estudio, 2) ponderación de los atributos y reclasificación de los mapas temáticos y 3) determinación del potencial de recarga hídrica de las zonas evaluadas. Finalmente se enfatiza la importancia y practicidad de utilizar un Sistema de Información Geográfica para la optimización de las operaciones espaciales necesarias dentro de las técnicas EMC, como sería la reclasificación de los mapas temáticos y la superposición ponderada de los mismos.

## BIBLIOGRAFÍA

1. Barredo, J. (1996). *Sistemas de información geográfica y evaluación multicriterio en la ordenación del territorio*. Madrid, España: Ra-Ma.
2. Matus, O., Faustino, J., & Jiménez, F. (2009). *Guía para la identificación participativa de zonas con potencial de recarga hídrica. Aplicación práctica en la subcuenca del río Jucuapa, Nicaragua*. Turrialba, Costa Rica: Centro Agronómico Tropical de Investigación y Enseñanza (CATIE).
3. Bravo, L., Sáenz, D., Alatorre, L., Priego, Á., Torres, M., & Granados, A. (2015). *Identificación de áreas potenciales de recarga hídrica al acuífero Cuauhtémoc (Chihuahua), mediante una evaluación espacial multi-criterio*. Ciudad Juárez, México: Memorias de resúmenes en extenso SELPER-XXI-México-UACJ-2015.
4. Peñuela, L., & Carrillo, J. (2013). *Definición de zonas de descarga de agua subterránea a partir de indicadores superficiales: centro-sur de la Mesa Central, México*. *Investigaciones Geográficas, Boletín del Instituto de Geografía, UNAM*, Núm. 81, 18-32.
5. Naciones Unidas. (Obtenido el 23 de Octubre de 2020). *Población*. Obtenido de <https://www.un.org/es/sections/issues-depth/population/index.html>
6. Guerrero, M. (2006). *El agua*. México: Fondo de Cultura Económica.
7. Arreguín, F. (2005). *Water Management in Mexico*. United States of America: IWA Yearbook.
8. Comisión Nacional del Agua. (2018). *Estadísticas del Agua en México, edición 2018*. Ciudad de México: Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales.
9. Gale, I. (2005). *Estrategias para la Recarga de Acuíferos (GRA) en zonas semiáridas*. Paris, Francia: UNESCO, UNESCO IHP, Paris, France.
10. Ward, J., & Dillon, P. (2012). *Principles to coordinate managed aquifer recharge with natural resource management policies in Australia*. *Hydrogeology Journal* 20: 943-956.
11. Escolero, O., Gutiérrez, C., & Mendoza, E. (2017). *Manejo de la recarga de acuíferos: un enfoque hacia Latinoamérica*. Jiutepec, México: Instituto Mexicano de Tecnología del Agua.
12. Bosque, J., & García, R. (2000). *El uso de los sistemas de información geográfica en la planificación territorial*. *Anales de Geografía de la Universidad Complutense*, 20, 49-67.
13. Castellanos, L. (2017). *Diplomado de Análisis de Información Geospacial. Álgebra de mapas con datos vectoriales*. Ciudad de México: CONACYT, Centro de Investigación en Ciencias de Información Geoespacial.
14. Jaime, E., Larín, R., & Garea, E. (2011). *Hacia métodos de análisis de datos espaciales raster en el nivel semántico*. *Computación y Sistemas* Vol. 15 No. 1, 91-106.
15. Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales. (2006). *Manual del Proceso de Ordenamiento Ecológico*. México, D.F.: Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales.
16. Olaya, V. (2016). *Sistemas de Información Geográfica*. Víctor Olaya.

## ESTUDIO DE LAS MICROFIBRAS DE CELULOSA HIDROFÓBICAS OBTENIDAS A PARTIR DE SOJA

Oxana V Kharissova y Blanca I. Montes Mejia

FCFM, Universidad Autónoma de Nuevo León, México

oxana.kharissova@uanl.edu.mx

### RESUMEN

La cáscara de soja se obtiene como subproducto del procesamiento de la soja para obtener aceite. En este trabajo se llevó a cabo un proceso de base alcalina para la obtención de celulosa a partir de cáscara de soja para su uso en la producción de papel de soja. Las fibras de celulosa obtenidas se sometieron a un proceso de sonicación mediante ultrasonidos durante 3, 6 y 12 horas, tras lo cual las fibras se filtraron y secaron a 30°C. Durante esta investigación utilizando nanopartículas de SiO<sub>2</sub> de 20 nm de tamaño fueron investigadas las propiedades de la hidrofobización de papel a base de celulosa Kraft y de celulosa obtenida a partir de fibras de soja. Para estudiar la hidrofobicidad, morfología y topografía del papel de los compuestos obtenidos se caracterizaron mediante microscopía electrónica de barrido (SEM), microscopía electrónica de transmisión (TEM), espectroscopía FTIR y mediciones del ángulo de contacto. Se observaron la morfología de celulosa de fibras en el papel de Kraft y de papel producido a partir de celulosa de soja. Fue posible recuperar del 60% del contenido de celulosa a partir de cascara de soja. Se encontró un aumento general del 23% en el número de microfibrillas en estas hojas de papel. La prueba de resistencia a la tracción de papel producido a partir de soja revela un refuerzo de fibra de hasta un 19%. A parte, aplicando las nanopartículas de SiO<sub>2</sub> permite que el papel obtiene las propiedades hidrófobas. Los hallazgos de esta investigación se pueden utilizar para desarrollar alternativas para la obtención de celulosa a partir de desechos orgánicos con aplicaciones en la industria del papel con potencial para reemplazar la celulosa de los árboles y reducir su uso, contribuyendo así al impacto en el medio ambiente para reducir la tala de árboles.

### INTRODUCCIÓN

Celulosa, celulosa (de Lat. Cellula - "célula") - un compuesto orgánico natural de alto peso molecular, carbohidrato, polisacárido con la fórmula (C<sub>6</sub>H<sub>10</sub>O<sub>5</sub>)<sub>n</sub>. La celulosa es la sustancia dura y resistente que constituye el principal componente estructural de la materia vegetal. Eso es uno de los materiales biológicos más abundantes de la Tierra.

La celulosa, el polímero natural más extendido en la tierra, es un objeto de investigación muy importante, ya que su campo de aplicación se amplía cada año, y las reservas disponibles, con un uso racional, pueden ser inagotables. Las propiedades fisicoquímicas de la celulosa se deben a la estructura de sus macromoléculas, que consta de residuos de D-glucosa, formando una estructura topológica lineal; numerosos enlaces de hidrógeno entre grupos hidroxilo de macromoléculas, grado de polimerización. Como resultado de las reacciones químicas (destrucción, reacciones de grupos funcionales, reticulación de cadenas, reordenamientos intramoleculares), se modifica la estructura de los biopolímeros y se adquieren por ellos nuevas propiedades valiosas que permiten encontrar áreas previamente desconocidas de sus propiedades. utilizar.

Actualmente, los materiales celulósicos se encuentran activamente utilizado para crear una variedad de nanoestructuras: nanocristales, nanofibras y nanocompuestos. Los nanocompuestos pueden estar completamente formado a partir de celulosa (mientras que fibras más largas sirven como matriz, y el relleno es nanocristales de celulosa), pueden contener nanopartículas metales y semiconductores, tienen una matriz orgánica de bacterias o químicamente modificadas celulosas. En composites, la celulosa también combinada con polímeros sintéticos.

Las plantas, algas y bacterias producen una cantidad estimada de celulosa cada año en alrededor de cien mil millones de toneladas. Desde el punto de vista medioambiental, y con el objetivo de crear procesos sostenibles para proteger la base de recursos naturales de cara al futuro, el reciclaje y la eliminación de residuos orgánicos son algunos de los mayores problemas que deben

afrontar los países. Las tendencias actuales en fibras de celulosa se centran en el desarrollo de materiales de papel con dimensiones micrométricas, debido a su comportamiento estructural y diversas aplicaciones.

Las propiedades del papel dependen fundamentalmente de la resistencia de la fibra y del grado de unión en la red fibrosa, así como de la calidad de los enlaces entre ellos. El papel se puede preparar no solo a partir de la madera sino también de una serie de plantas que contienen celulosa. A pesar de su disponibilidad, la principal desventaja es una considerablemente menor el contenido de celulosa en estas plantas [1, 2] se compara con árboles. Entre ellos, la cáscara de soja se forma como subproducto del procesamiento de la soja en la fabricación de aceite.

Fabricación de nanocompuestos [3] de materiales clásicos con nanopartículas puede conducir a una mejora de la mecánica propiedades y estabilidad química. En este trabajo, un alcalino

Se llevó a cabo un proceso basado en la obtención de celulosa a partir de cascarrilla de soja para su uso en la producción de papel de soja. Además, los nanocomposites se generaron agregando  $\text{SiO}_2$  nanopartículas de 20 nm de tamaño a una pulpa de celulosa tipo Kraft y celulosa derivada de la cáscara de soja, con el fin de generar un cambio en las propiedades del papel a la interacción entre

$\text{SiO}_2$  y las fibras de celulosa. Nos centramos en las nanopartículas de  $\text{SiO}_2$  para comprender el comportamiento de los materiales de papel [4], hidrofobizados con nanopartículas, en las condiciones de directa incapacidad del papel para interactuar con las moléculas de agua ya sea por

interacciones ion-dipolo o por enlaces de hidrógeno.

En este trabajo se llevó a cabo un proceso de base alcalina para la obtención de celulosa a partir de cáscara de soja para su uso en la producción de papel de soja.

## PARTE EXPERIMENTAL

En esta investigación, fue comparado la pulpa de celulosa Kraft hecha a partir de fibras secundarias que contienen celulosa con una densidad de  $0.711 \text{ g/cm}^3$  a  $25^\circ\text{C}$ , 1 atm. presión, y pH entre 6.5 y 7.2 y celulosa producida a partir de cascara de soja con una densidad de  $0.680 \text{ g/cm}^3$  a  $25^\circ\text{C}$ , 1 atm. de presión y pH entre 6.4 y 7.3. La pulpa de soja fue hecha de cascara de soja con la metodología utilizada por Blanca I. Montes Mejía [5]. Para hacer una muestra del nanocompuesto, se añadió a pulpa de celulosa Kraft o de pulpa de celulosa de Soya 100 ml de agua destilada y se dopó con nanopartículas de  $\text{SiO}_2$  de un tamaño de 20 nm en porcentajes en peso de 0.01% en peso, 0.03% en peso y 0.05% en peso, y se agitó uniformemente durante 15 min y se llevó a la filtración con una bomba de vacío y papel de filtro. La solución se secó a temperatura ambiente.

## RESULTADOS

El concepto de híbrido en la ciencia moderna de los materiales está presente en varios niveles de organización estructural. El grupo de estructuras macroporosas incluye materiales compuestos, que a menudo se denominan híbridos, ya que al obtener dichos materiales se mezclan sustancias que se diferencian entre sí en composición y naturaleza de fase. Es aún más correcto referirse a materiales híbridos solo compuestos con una interacción química bastante obvia entre componentes.

Como fue comentado la celulosa es uno de los biopolímeros más abundantes y renovables anualmente del planeta. En la naturaleza, la celulosa se obtiene como resultado de la biosíntesis, cuando las unidades de glucosa que atraviesan la membrana plasmática se forman en cadenas macromoleculares unidas por enlaces  $\beta$ -glucosídicos y de hidrógeno. Una molécula de celulosa se forma a partir de muchos (de varios cientos a decenas de miles) residuos de  $\beta$ -D-glucosa unidos por enlaces glicosídicos (hidrógeno).

Mediante los experimentos fue obtenido las hojas de papel basado a la celulosa obtenida a partir de cascara de soja y las hojas de papel obtenidos a partir de celulosa secundaria tipo Kraft. Para la obtención de las celulosa fue utilizado ultrasonido de 3 horas, 6 horas y 12 hora esto provoco

durante de sonicación obtenidas de la microcelulosa con enlaces de hidrogeno que a sus vez puede mejorar la unión de las nanopartículas de SiO<sub>2</sub> aplicadas a la fibriles de la celulosa.

Las hojas de papel fueron analizados a diferentes pruebas mecánicas tales como: resistencia a la tracción, resistencia a la compresión y ángulo de contacto. Los resultados obtenidos mediante esta investigación están en la Tabla 1 y Tabla 2. Como podemos ver la presencia de las nanopartículas mejoraron los resultados comparando con la hoja sin presencio a nanopartículas.

Tabla1. Resultados de las propiedades hidrofóbicas y mecánicas de la celulosa a partir de fibra de papel a base de celulosa tipo Kraft.

SiO <sub>2</sub>	Tensile strength	Mullen Test	Contact angle	Cobb Test
% wt	lbf/in <sup>2</sup>	lbf/in <sup>2</sup>	(°)	g/m <sup>2</sup>
Blanco	4.4	22	77	25
0.01	5.1	29	114	17.2
0.03	5.6	34	125	14.3
0.05	6.2	39	150	10.9

Tabla 2. Resultados de las propiedades hidrofóbicas y mecánicas de las fibras de celulosa de la cáscara de la soja.

SiO <sub>2</sub>	Tensile strength	Mullen Test	Contact angle	Cobb Test
% wt	lbf/in <sup>2</sup>	lbf/in <sup>2</sup>	(°)	g/m <sup>2</sup>
Blanco	3.5	18	69	28
0.01	4.2	23.2	105	19.5
0.03	4.4	25.5	123	16.3
0.05	5.1	28	135	12.2

Si comparamos en sentido figurado la celulosa con el hormigón armado, resulta que las fibras de celulosa con alta resistencia a la tracción son similares al refuerzo en el hormigón armado, y la lignina, con alta resistencia a la compresión, es como el hormigón. La hemicelulosa tiene la función de fortalecer las fibras de celulosa.

Podemos ver que la presencia de nanopartículas de SiO<sub>2</sub> uniéndose con fibrillas de celulosa están aumentando la resistencia a la compresión y resistencia a la tracción (Figura 1.).

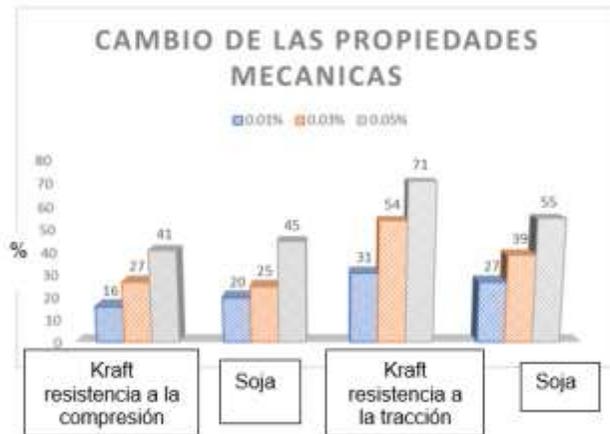
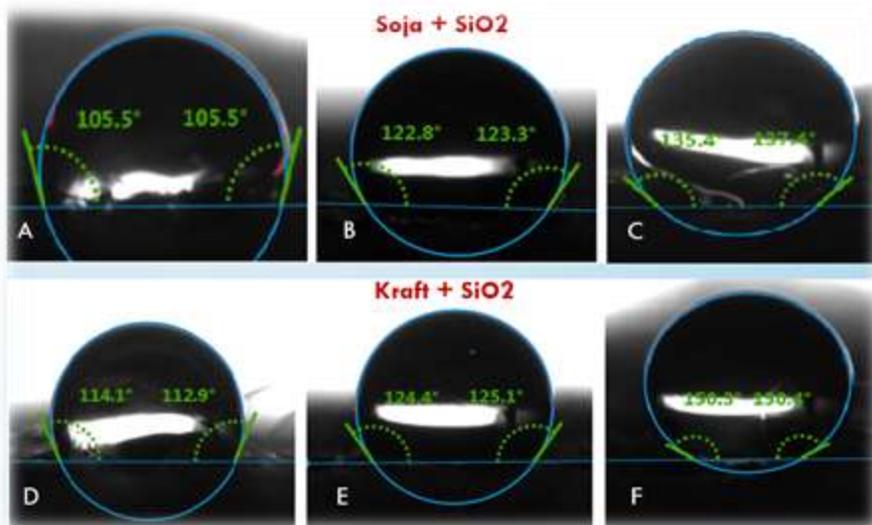


Figura 1. Porcentaje de cambio de las propiedades mecánicas de las celulosas de tipo Kraft y de celulosa obtenida a partir de cascara de soja.

Como podemos ver en la Figura 2 el ángulo de contacto fue aumentado para celulosa de Soja a 52%, 78% y 95% dopados con 0.01%, 0.03%, 0.05% respectivamente de nanopartículas de SiO<sub>2</sub> de 20nm.



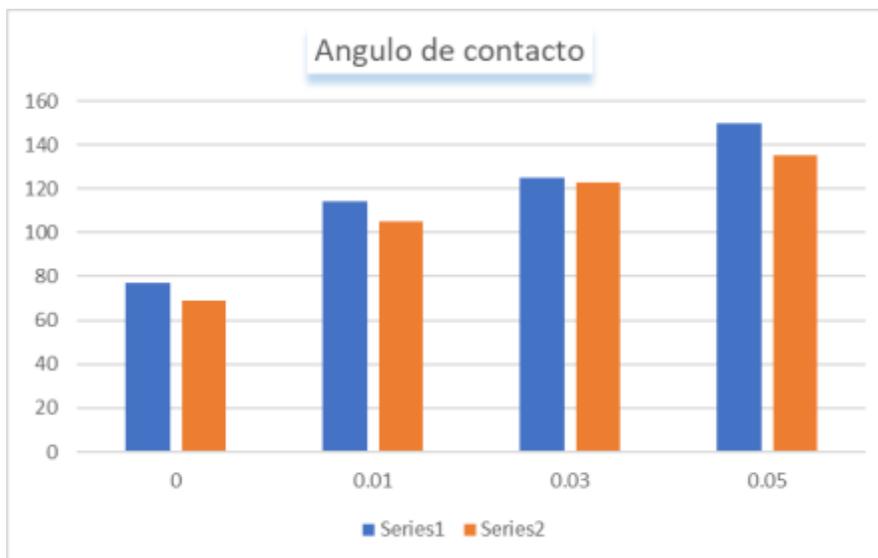


Figura 2. El ángulo de contacto del agua en las fibras de celulosa cáscaras de las semillas de soja con SiO<sub>2</sub> (A-C), (Serie 2): A) contiene 0.01% wt SiO<sub>2</sub> de 20 nm; B) contiene 0.03% wt SiO<sub>2</sub> de 20 nm y C) contiene 0.05% wt. SiO<sub>2</sub> de 20 nm; El ángulo de contacto del agua de celulosa de Kraft con SiO<sub>2</sub> (D-F) (Serie 1): D) contiene 0.01% wt. SiO<sub>2</sub> de 20 nm, E) contiene 0.03% wt. SiO<sub>2</sub> de 20 nm y F) contiene 0.05% wt. SiO<sub>2</sub> de 20 nm.

## CONCLUSIONES

Ha sido capaz de fabricar papel hidrofóbico basado en el uso de celulosa de cáscara de soja.

En el caso de la celulosa Kraft, el resultado del ángulo de contacto para las tres conexiones diferentes utilizadas en esta investigación para 0.01% wt.

del SiO<sub>2</sub> era de 114°, para un 0.03% wt. de SiO<sub>2</sub> era 124° y para 0.05% wt. de SiO<sub>2</sub> fue 150° y en el caso de la cáscara de celulosa de soja para las tres concentraciones utilizadas en esta investigación el resultado fue de 0.01% wt. de SiO<sub>2</sub> era 105°, para 0.03% wt. de SiO<sub>2</sub> era 123° y 0.05% wt. de SiO<sub>2</sub> era 135°.

Se observó que la hidrofobicidad ocurre con ángulos de contacto mayores de 120° y 150°.

En el caso de las fibras de celulosa Kraft dopada con nanopartículas de SiO<sub>2</sub> de 0.05%wt, la resistencia a la tracción aumentó en un 41% y la resistencia a la compresión aumentó en un 54-71%.

En las fibras de celulosa de soja dopada con nanopartículas de SiO<sub>2</sub> de 0.05%wt., se observó un aumento del 45% para la resistencia a la tracción y del 55% para la resistencia a la compresión.

## BIBLIOGRAFÍA

1. Natural Cellulosic Fiber Bundles from Cellulosic Sources and a Method for Making the Same. US Patent 20070199669A1, 2005.
2. Method for preparing insoluble fiber from soy hull. KR Patent 100785367B1, 2006
3. Henrique P, Camargo C, Satyanarayana KG, Wypych F. Nanocomposites: Synthesis, structure, properties and new application opportunities. Mater Res, Vol.12, 2009, pp.1-39.
4. Ogihara H, Xie J, Okagaki J, Saji T. Facile fabrication of colored superhydrophobic coatings by spraying a pigment nanoparticle suspension. Langmuir Vol.28, 2012, pp.4605-4608.
5. Blanca I. Montes Mejia, Oxana V. Kharissova and Boris I. Kharisov, Hydrophobization of Kraft-type Cellulose and Microfiber Cellulose Obtained from Soybean Husk in Ultrasonic Field, Recent Patents on Nanotechnology, Vol.13, 2, 2019, pp.151-159

## COMPARACIÓN ENTRE EL PROBLEMA CLÁSICO DE LA RUINA DEL JUGADOR Y SU VERSIÓN CON UN Oponente INFINITAMENTE RICO

Maria Cristina Medel Lopez<sup>1</sup>, Gladys Denisse Salgado Suárez<sup>2</sup>, Francisco Solano Tajonar Sanabria<sup>1</sup>, Fernando Velasco Luna<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla,

<sup>2</sup>Universidad de las Américas Puebla.

[maria.medell@alumno.buap.mx](mailto:maria.medell@alumno.buap.mx).

### RESUMEN

En el presente trabajo se plantea el problema clásico de la ruina del jugador, en el cual dos jugadores, A y B, se enfrentan, cada uno con un capital inicial finito, en rondas de un juego aleatorio sin posibilidad de empate. En cada ronda el ganador toma una unidad de su oponente, el juego termina cuando alguno de los dos se ha quedado sin más dinero que apostar. Por otro lado, se tiene el mismo problema salvo que, ahora el capital del oponente, el jugador B, es muy grande, tanto que se considera infinito. Para ambas situaciones, la forma en que evoluciona el capital del jugador A se modela como una caminata aleatoria simple, la cual es un caso particular de Cadena de Markov. Es de interés, por ejemplo, saber la probabilidad de ruina del jugador A, o el número de rondas esperadas antes de que termine el juego. Con la teoría de procesos estocásticos se responden dichas preguntas, de igual forma se hace una comparación sobre las diferencias entre sus respectivos modelos y de algunas de sus características más importantes. Además, se presenta una simulación en el lenguaje de programación Python para casos particulares de ambos problemas. Concluyendo con la interpretación de diversos escenarios y sus propiedades.

### INTRODUCCIÓN

El problema clásico de la ruina del jugador forma parte de una lista publicada en el tratado de Huygens en 1657 [1]. En el se plantea a dos jugadores, que se pueden identificar como jugador A y jugador B, se lanzan tres dados, si la suma es 11, el jugador A cede una unidad al jugador B, si la suma es 14, el jugador B cede una unidad al jugador A, al iniciar cada uno tiene 12 fichas, por lo que el total en juego es de 24 fichas. Seguirán jugando hasta que alguno de los participantes se quede sin más fichas que apostar y se cuestiona ¿cuál es la probabilidad de éxito de cada jugador? Este problema fue abordado con lo que en ese momento eran nuevos conceptos de combinación y árboles de probabilidad, de forma analítica. A pesar del tiempo distante en que fue presentado actualmente se encuentra enunciado de forma más general en libros de introducción a los procesos estocásticos. Esto porque un proceso estocástico, o proceso aleatorio modela un sistema que parte de un cierto estado y evoluciona en el tiempo de forma azarosa, eso es precisamente lo que ocurre con el capital del jugador A. El enunciado de forma más general plantea a dos jugadores, cada uno con un cierto capital  $k$  y  $a-k$  respectivamente, por lo que hay un total de  $a$  fichas, monedas o unidades en juego, además, en cada ronda el jugador A tendrá siempre la misma probabilidad  $p$  de ganar y se cuestiona por la probabilidad de ruina del jugador A, así como del número de juegos esperados antes de que termine el juego. Este problema puede ser modelado como un proceso estocástico, pero además como un tipo de proceso muy interesante, como una caminata aleatoria, las cuales son un caso particular de las cadenas de Márkov. Además de que este problema se ha presentado con distintas observaciones por parte de los autores que lo incluyen en sus textos también se ha mostrado con ciertas variaciones a las condiciones de juego, que hacen que el modelo clásico utilizado altere algunas de sus características, tal es el caso del problema de la ruina del jugador con un oponente infinitamente rico en el cual el jugador A tiene un cierto capital finito, pero su oponente, el jugador B, tiene un capital tan grande que se considera infinito [5]. En el presente trabajo se abordan ambos problemas como caminatas aleatorias resaltando sus características y mostrando los resultados obtenidos al implementar simulaciones de cada uno de ellos, para distintos valores del parámetro  $p$ .

## TEORÍA

Las siguientes definiciones se pueden consultar de forma más extensa y formal en [3,4,6]. Un proceso estocástico es una sucesión de variables aleatorias  $\{X_n\}$ , que comparten un mismo espacio de probabilidad, indexadas por un conjunto  $T$  que representa el tiempo y cuyos valores varían en un conjunto fijo  $S$  que se denomina el espacio de estados. Si el conjunto  $T$  es un intervalo, el proceso se denomina a tiempo continuo, por otro lado, si se trata de un subconjunto de los números enteros, se dice que el proceso es a tiempo discreto.

Una cadena de Markov, es un proceso estocástico a tiempo discreto que cumple la siguiente propiedad:

$$P(X_{n+1} = x_{n+1} | X_0 = x_0, X_1 = x_1, \dots, X_n = x_n) = P(X_{n+1} = x_{n+1} | X_n = x_n) \quad (1)$$

Donde  $X_n$  representa el estado del proceso estocástico al momento o etapa  $n$  y  $x_0, x_1, \dots, x_{n+1}, x_n$  pertenecen al conjunto de estados. Esta propiedad lo que quiere decir es que la probabilidad de encontrarse en algún estado en una etapa en específica dado que se conocen los estados en los que estuvo el proceso en todas las etapas previas es la misma que si solo se conociera el estado en que se estuvo previamente.

Una caminata aleatoria es un caso particular de las cadenas de Markov y consisten en que partiendo de un cierto estado inicial, el  $n$ -ésimo estado es el resultado de la suma de una sucesión de variables aleatorias independientes e idénticamente distribuidas hasta el elemento  $n$ .

Los generadores de números pseudoaleatorios adquieren un papel importante al momento de simular un fenómeno azaroso. Para las simulaciones del desarrollo del problema de la ruina del jugador en su versión clásica y en su versión con un oponente infinitamente rico, se empleó el lenguaje de programación libre Python, debido a su accesibilidad en el lenguaje. Python cuenta con un módulo que implementa un generador de números pseudoaleatorios para varias distribuciones, y utiliza Mersenne Twister como generador principal [8].

## PARTE EXPERIMENTAL

Se realizaron simulaciones del problema clásico y del problema con un oponente infinitamente rico, se identificaron al capital inicial (estado inicial), capital total (estado absorbente) y probabilidad de ganar en cada ronda como los parámetros que determinan el comportamiento del proceso. Por lo que se hace especial atención en casos con ciertos valores para el parámetro  $p$ . Obteniendo lo siguiente.

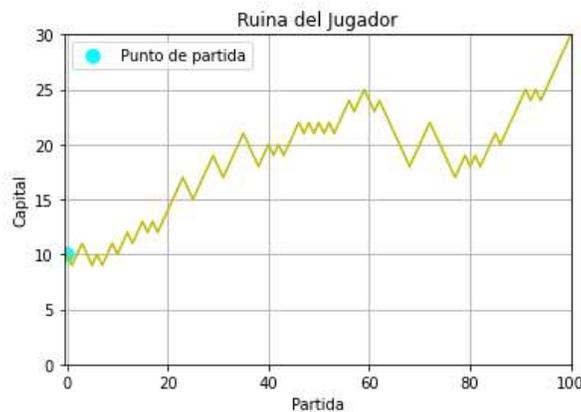


Figura 1

En la Figura 1 se tiene el resultado de una sola simulación para el problema clásico de la ruina del jugador, considerando un capital inicial de 10 unidades y un capital total en juego de 30 unidades.

Es de interés conocer la probabilidad de ruina y la duración esperada del juego por lo que se recurre a ejecutar un número grande de simulaciones para obtener una estimación de estos valores. Se tiene así el resultado que se observa en la Figura 2, en el que se implementaron 1000 ejecuciones del simulador de juego con los mismos valores para los parámetros utilizados para la simulación de la Figura 1.

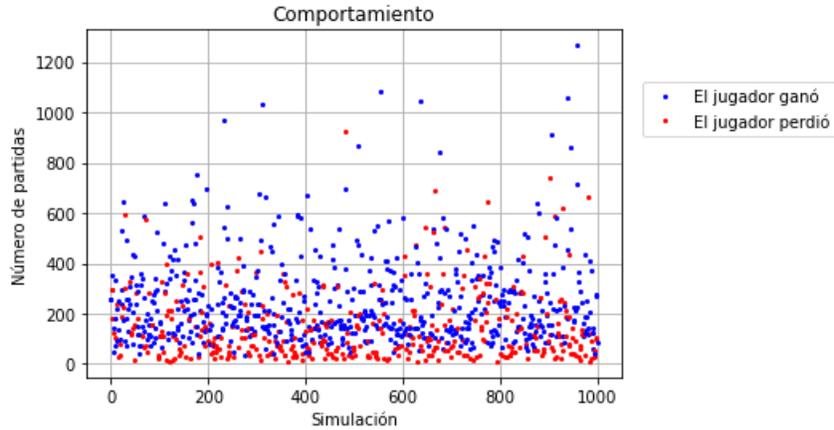


Figura 2

En cuanto al problema de la ruina del jugador con un oponente infinitamente rico, se hizo la diferencia entre tres diferentes casos, cuando el valor de  $p$  es mayor, menor o igual que 0.5, obteniendo así comportamientos distintos e interesantes que se aprecian en las Figuras 3, 4 y 5.

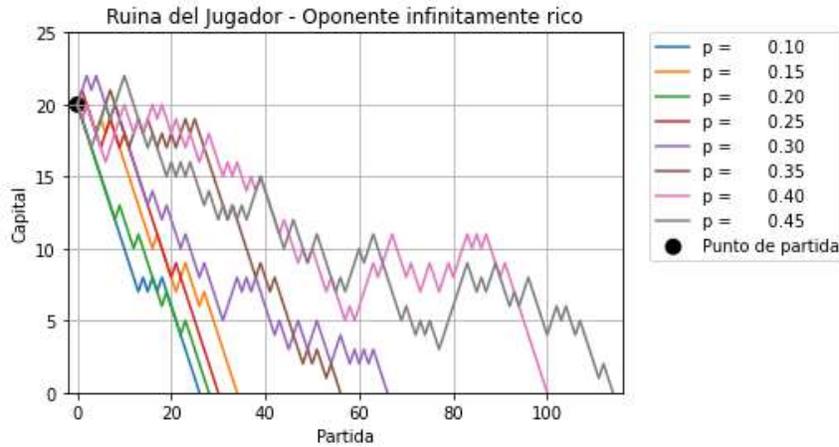


Figura 3

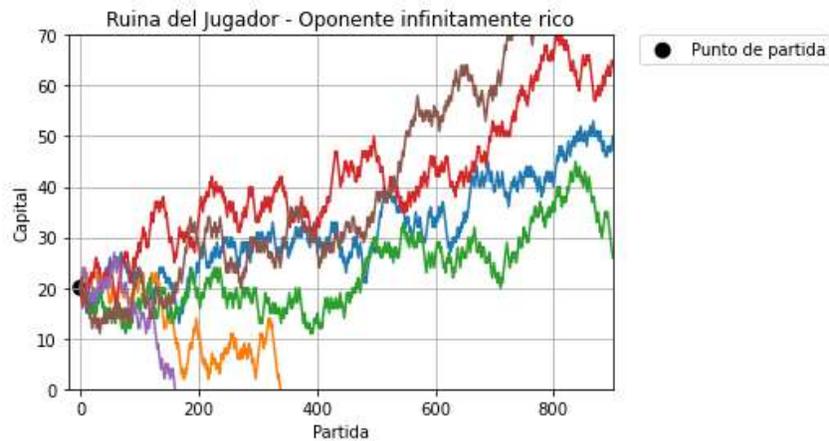


Figura 4

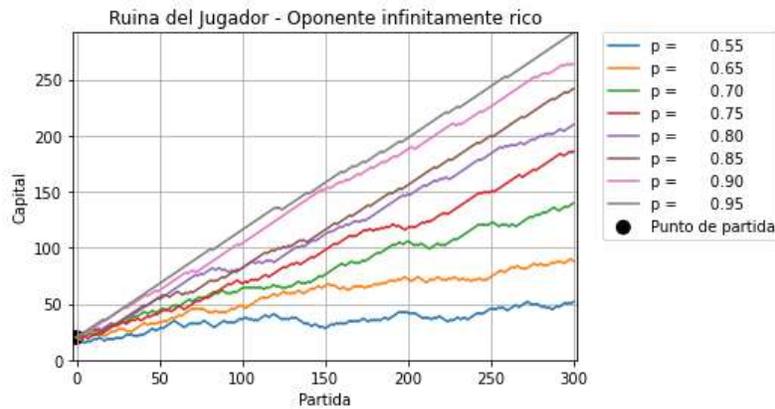


Figura 5

**RESULTADOS**

La forma en que se desarrolla el capital para el jugador A en el problema clásico y en el problema con un oponente infinitamente rico se modela como cuna caminata aleatoria, sin embargo, se tienen características diferentes, las cuales se presentan en la siguiente tabla. Donde  $a$  representa el capital total.

Problema clásico	Problema con un oponente infinitamente rico
Espacio de estados finito $\{0, 1, \dots, a\}$	Espacio de estados infinito $\{0, 1, \dots\}$
Dos estados absorbentes $\{0, a\}$	Un único estado absorbente $\{0\}$

Tabla 1

En la tabla 1 se ve que los dos tienen una diferencia entre la cantidad de estados, que una cadena de Markov tenga un espacio de estados finito implica que al menos uno de dichos estados sea recurrente, este es el papel que cumplen los dos estados absorbentes que representan el momento en que se ha terminado el juego, para el problema modificado el espacio de estados deja de ser finito, además de que ya no se tienen dos estados absorbentes, esto se interpreta como la posibilidad de que el problema modificado no termine, es decir que la única posibilidad para que el juego termine es que el jugador A pierda todo su capital, pero esto podría no ocurrir.

Utilizando la teoría de probabilidad condicional o la teoría de ecuaciones en diferencia se llega a que la probabilidad de ruina ( $u_k$ ) y la duración esperada ( $d_k$ ) del juego para el problema clásico son las siguientes, en donde  $p$  es la probabilidad de ganar en cada ronda,  $k$  es el capital inicial,  $a$  es igual al capital total en juego y  $s$  es igual al cociente  $\frac{1-p}{p}$ .

$$u_k = \begin{cases} \frac{s^k - s^a}{1 - s^k} & \text{si } p \neq 0.5 \\ \frac{a - k}{a} & \text{si } p = 0.5 \end{cases} \quad (2)$$

$$d_k = \begin{cases} \frac{a(1 - s^k)}{(1 - 2p)(1 - s^a)} + \frac{k}{1 - 2p} & \text{si } p \neq 0.5 \\ k(a - k) & \text{si } p = 0.5 \end{cases} \quad (3)$$

De donde se tiene que para la probabilidad de ruina y la duración esperada para el problema de la ruina del jugador con un oponente infinitamente rico es necesario calcular el límite de dichas expresiones cuando el valor del capital total tiende a infinito, de aquí se identifica que se tendrán tres casos diferentes, ya que para el caso en que la probabilidad de ganar en cada ronda no es igual a 0.5, el límite se ve afectado dependiendo si el cociente  $s$  mayor o menor que 1. Se reúnen los resultados obtenidos en la siguiente tabla.

Valor de p	Probabilidad de ruina ( $u_k$ )	Duración esperada ( $d_k$ )
$p < 0.5$	1	$\frac{1}{1 - 2p}$
$p = 0.5$	1	$\infty$
$p > 0.5$	$s^k$	$\infty$

Tabla 2

**CONCLUSIONES**

Para el problema clásico las simulaciones permitieron hacer observaciones no solo de la probabilidad de ruina y de la duración esperada del juego, también permitieron hacer observaciones sobre la dispersión en los tiempos en que termina el juego. La probabilidad de ruina en su versión clásica y en su versión con un oponente infinitamente rico tienen características interesantes al variar los valores de sus parámetros. Para ambas se cumple que el valor de la probabilidad de ganar en cada ronda representa un cambio en lo que se espera a largo plazo de la caminata aleatoria. Para el problema clásico, entre mayor es el capital total menos sensible es la probabilidad de ruina a las distintas opciones de capital inicial. Para el problema con un oponente infinitamente rico si la probabilidad de ganar en cada ronda es desfavorable, es segura la ruina, y también es posible encontrar una expresión para calcular el tiempo esperado para que termine el juego, no así para el resto de los casos, donde la duración esperada es infinita. El caso simétrico garantiza que se va a alcanzar el estado en que el jugador A quedará arruinado, pero esto podría tomar mucho tiempo, en especial si se inicia con un capital grande. Para el tercer caso la ruina no es segura y el complemento de dicha probabilidad de ruina es decir  $1 - s^k$ , representa la probabilidad de que el juego no termine.

**BIBLIOGRAFÍA**

1. Basulto S.J. y Pérez H.M.D., (2007) "La resolución de Montmort (1708, 1713) de los cinco problemas propuestos por Huygens en su tratado (1657)". En IV Congreso Internacional de Historia de la Estadística y de la Probabilidad (407-420), Sevilla: Universidad de Huelva.

2. Feller W., Higgins E., (1957) "An Introduction to Probability Theory and Its Applications", tercera edición, Princeton University.
3. Gallager R. G., (2013) "Stochastic Processes: Theory for Applications", Cambridge University Press.
4. Hoel P. G., Port S. C., Stone C. J., (1972) "Introduction to Stochastic Processes", University of California, Los Angeles.
5. Jones P.W., Smith P., (2010) "Stochastic Processes An Introduction", (2da ed.) Florida EUA, CRC Press.
6. Rincón L., (2002) "Introducción a los procesos estocásticos", Ciudad Universitaria UNAM.
7. Rincón L., (2007) "Curso Intermedio de Probabilidad", Ciudad Universitaria UNAM.
8. Módulos numéricos y matemáticos,(s.f.)random - Generar números pseudoaleatorios.Recuperado de: <https://docs.python.org/es/3/library/random.html> [26 Jul 2021]

## MÉTODOS DE SÍNTESIS DEL FOTOCATALIZADOR $\text{KBiO}_3$

Mariana Villagómez Mora<sup>1,2</sup>, Luis Armando Díaz Torres<sup>2</sup>, Christian Gómez Solís<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Centro de Investigaciones en Óptica, A.C., <sup>2</sup>Universidad de Guanajuato Campus León, División de ciencias e ingenierías.

marianavm@cio.mx

### RESUMEN

La fotocatalisis heterogénea es considerada como una serie de reacciones de oxido-reducción en la superficie de un semiconductor (fotocatalizador) que transforman la energía lumínica, idealmente solar, en energía química. Los semiconductores basados en bismuto han presentado un alto rendimiento en procesos fotocatalíticos bajo luz visible; en concreto, el  $\text{KBiO}_3$  ha mostrado una alta eficiencia en la degradación de tintas orgánicas y colorantes, por lo que se le prevé un buen desempeño en la reducción del  $\text{CO}_2$ . En este trabajo se buscó sintetizar  $\text{KBiO}_3$  mediante tres técnicas distintas: 1) precipitación, 2) inyección rápida (InR), y 3) sustitución química (SQ). Se realizaron pruebas de difracción de rayos X (DRX), espectroscopía UV-vis y microscopía SEM a las muestras obtenidas con lo que se recolectó información de las fases cristalinas, características de absorción, así como de superficie y morfología. En base a los resultados obtenidos, se puede concluir que, de las técnicas de síntesis realizadas hasta la fecha, la ruta por SQ presenta la mejor estrategia para la obtención del  $\text{KBiO}_3$ .

### INTRODUCCIÓN

La fotocatalisis es una técnica que intenta imitar los procesos fotosintéticos naturales para convertir al dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) y al agua en productos de valor energético como metano, ácido fórmico e hidrógeno molecular [1]. Uno de los objetivos principales en investigaciones fotocatalíticas es encontrar un material que sea eficiente bajo luz visible, presente alta estabilidad y un lento tiempo de envejecimiento. Uno de los materiales por demás estudiado en procesos fotocatalíticos es el  $\text{TiO}_2$  que, por su abundancia, bajo costo y estabilidad química, lo vuelven atractivo como objeto de estudio, sin embargo,  $\text{TiO}_2$  solo puede activarse bajo radiación UV-vis, siendo esta su principal desventaja.

$\text{KBiO}_3$  es un semiconductor tipo perovskita  $\text{Bi}^{+5}$  con una banda prohibida estimada en 2.1 eV lo que permite su activación en el rango del visible. Este compuesto ha sido estudiado en la degradación de colorantes, así, un estudio del 2011 evaluó la actividad fotocatalítica del  $\text{KBiO}_3$  en la degradación de colorantes catiónicos y aniónicos, demostrando que presenta una mejor adsorción con los colorantes aniónicos, presumiblemente atribuido a la diferencia de cargas en la superficie de los catalizadores [2]. Así mismo, se ha determinado que  $\text{KBiO}_3$  es un fotocatalizador efectivo bajo radiación de luz visible para la degradación de contaminantes orgánicos como rodamina B, cristal violeta, azul de metileno, y fenol donde, los primeros dos fueron completamente degradados por el alto efecto foto-oxidativo del semiconductor, mientras que el azul de metileno y el fenol se degradaron por la combinación del efecto foto-oxidativo del  $\text{KBiO}_3$  y la oxidación química del bismuto pentavalente [3]. Sin embargo, elegir el método de síntesis es fundamental puesto que afectará directamente a las propiedades del material dependientes de la morfología y la estructura como lo son el área superficial, la formación y distribución de defectos, las propiedades electrónicas e incluso la actividad fotocatalítica. La electrólisis, la sustitución química y la sonoquímica son técnicas sencillas con las cuales se ha reportado la síntesis del  $\text{KBiO}_3$  obteniéndose una estructura cúbica y distintos tipos de morfología. Así, por ejemplo, Montalvo-Herrera y colaboradores sintetizaron  $\text{KBiO}_3$  mediante las técnicas de sustitución química, hidrotermal y sonoquímica obteniendo siempre la estructura cúbica, sin embargo, la morfología de las partículas varió entre formas cúbicas (sustitución química), hojuelas (hidrotermal) y esféricas (sonoquímica); el área superficial de los materiales también mostró dependencia a su síntesis (hidrotermal > sonoquímica > sustitución química); así mismo, se evaluó la actividad fotocatalítica de estos materiales en la degradación de metil azul y ciprofloxacina, donde el metil azul fue

degradado casi al 100% con el  $\text{KBiO}_3$  sintetizado vía sonoquímica, mientras que los mejores resultados en la degradación de la ciprofloxacina (67%) se obtuvieron con el  $\text{KBiO}_3$  sintetizado hidrotérmalmente [4]. Estos resultados nos indican que el método de síntesis influye tanto en la morfología de los materiales como en su actividad fotocatalítica.

En este trabajo se presentan los resultados de la síntesis de  $\text{KBiO}_3$  mediante las técnicas de precipitación, inyección rápida (InR) y sustitución química (SQ), las primeras dos técnicas no han sido reportadas en la síntesis del  $\text{KBiO}_3$ , mientras que SQ ha sido previamente reportada como por ejemplo en [4]. Las muestras obtenidas fueron analizadas mediante DRX, Uv-vis y SEM.

## PARTE EXPERIMENTAL

### Síntesis por precipitación

En la síntesis por precipitación se disolvió  $\text{Bi}(\text{NO}_3)_3$  en  $\text{HNO}_3$  para posteriormente agregar  $\text{KOH}$ . Para neutralizar la solución se añadió  $\text{NH}_4\text{OH}$ , obteniendo un precipitado color blanco. La solución se filtró y secó a  $80^\circ\text{C}$  por doce horas, a continuación, la muestra se calcinó a  $500^\circ\text{C}$  por dos horas, obteniendo un polvo fino color amarillo.

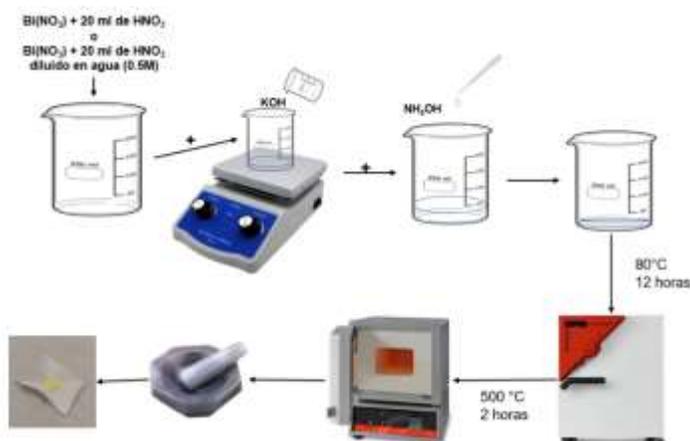


Figura 1. Diagrama de la síntesis de  $\text{KBiO}_3$  por el método de precipitación

### Síntesis por inyección rápida

En la síntesis por InR, se calentó una solución de  $\text{Bi}(\text{NO}_3)_3 + \text{HNO}_3$  en un matraz de tres vías, al mismo tiempo, se dejó una solución de  $\text{KOH} + \text{NH}_4\text{OH}$  en hielo. Cuando la solución de  $\text{Bi}(\text{NO}_3)_3 + \text{HNO}_3$  alcanzó los  $50^\circ\text{C}$  se burbujeó  $\text{He}$  al sistema por cinco minutos para crear una atmósfera inerte y seguidamente se inyectó la solución de  $\text{KOH} + \text{NH}_4\text{OH}$ , la solución final se dejó enfriar por aproximadamente media hora, se filtró y secó a  $80^\circ\text{C}$  por doce horas y finalmente se calcinó a  $500^\circ\text{C}$  por dos horas obteniendo un polvo fino color amarillo.

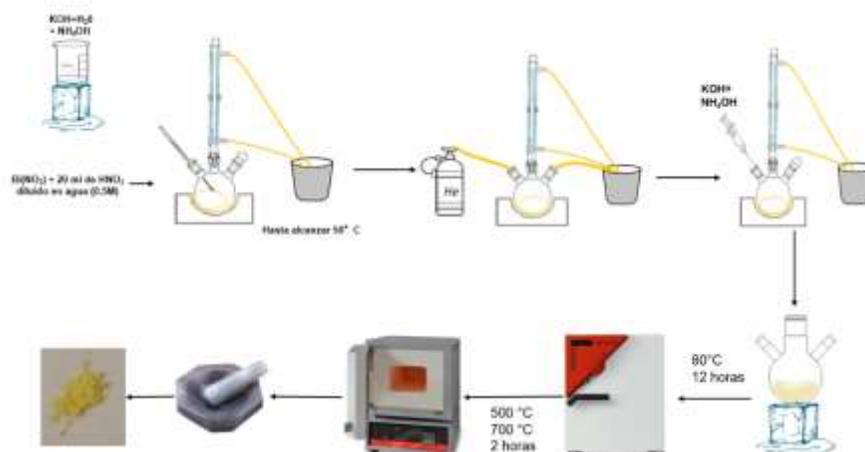


Figura 2. Diagrama de la síntesis de  $\text{KBiO}_3$  por el método de inyección rápida

#### Síntesis de sustitución química

Para la síntesis por sus SQ se preparó una solución de KOH al 50% a la cual se agregó  $\text{NaBiO}_3$ , la solución se calentó a  $\approx 100^\circ\text{C}$  por dos horas con agitación constante. El producto se lavó y centrifugó varias veces hasta obtener un pH de 8 para posteriormente secarlo a  $80^\circ\text{C}$  por doce horas obteniendo un polvo fino color rojo.

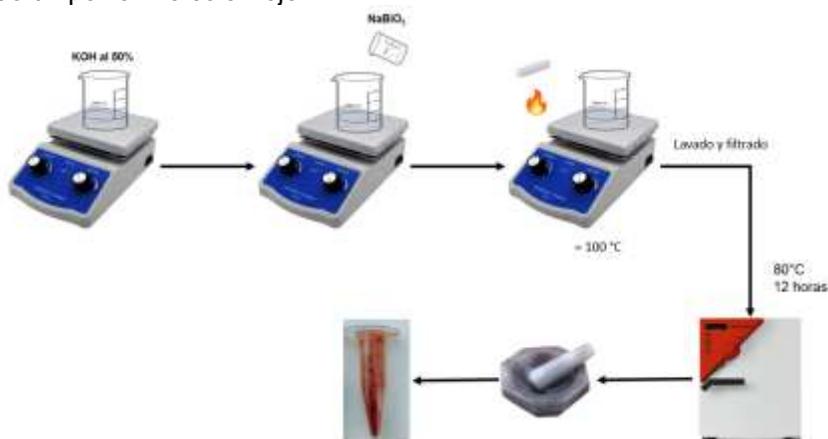


Figura 3. Diagrama de la síntesis de  $\text{KBiO}_3$  por el método de sustitución química

#### Caracterización

Los patrones de difracción de rayos X se obtuvieron con un equipo D2 phaser de la marca Bruker con fuente  $\text{CuK}\alpha$ , se usó el software Match! Versión 1.9a para analizar los patrones obtenidos. Los espectros de reflectancia difusa se obtuvieron con un espectrómetro Cary 5000 UV-VIS-NIR. La morfología y composición química de las muestras se determinaron mediante microscopía electrónica de barrido con detector (SEM-EDS) JSM-7800F de Jeol.

#### RESULTADOS

La figura 4 muestra los patrones de difracción para cada una de las muestras obtenidas por precipitación a), inyección rápida b) y sustitución química c). Los patrones fueron analizados con el software Match! Versión 1.9a con el cual se puede determinar que tanto el patrón de precipitación como el patrón de inyección rápida presentan una buena coincidencia con  $\text{Bi}_2\text{O}_3$  (ICDD PDF Card No. 01-071-0465) con estructura cristalina monoclinica, mientras que el patrón de sustitución química coincide con  $\text{KBiO}_3$  (ICDD PDF Card No. 01-081-228) con un tipo de estructura cristalina cúbica.

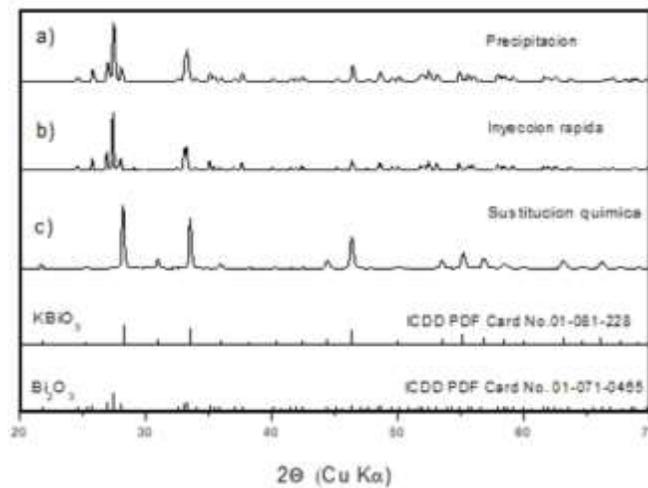


Figura 4. Patrones de difracción DRX para a) precipitación, b) inyección rápida y c) sustitución química

La figura 5 muestra los espectros de reflectancia difusa para las tres muestras, con estos espectros fue posible hacer el cálculo de band gap óptico con el cual se obtuvieron los valores de 2.81 eV (precipitación), 2.7 eV (InR) y 1.94 eV (SQ), este último valor es el más cercano al valor de band gap reportado para el  $\text{KBiO}_3$  (2.1 eV).

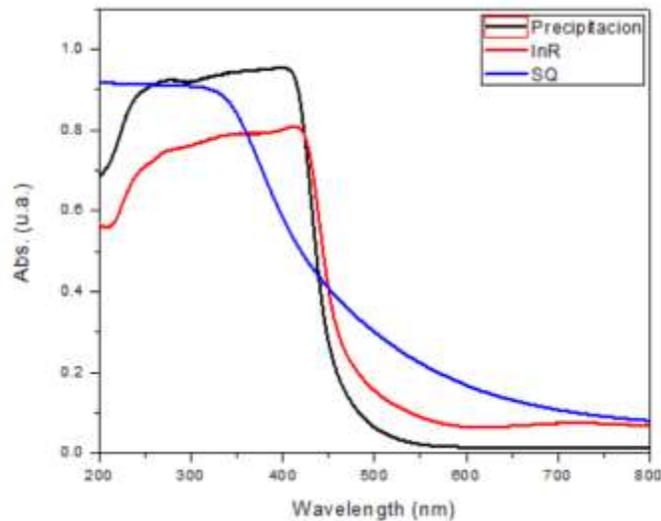


Figura 5. Espectros de UV-vis para los métodos de precipitación, InR y SQ.

Las micrografías electrónicas de barrido de las muestras se presentan en la figura 6, en estas se logra apreciar una diferencia significativa para cada una de las técnicas empleadas, por lo que, como es ya bien sabido, la morfología de las partículas depende de la síntesis. Las tres muestras presentaron una morfología homogénea, se observa además que la muestra de precipitación es la más amorfa de las tres, sin llegar a definir una morfología en específico, InR está más definida, pero sigue formando bultos mientras que SQ muestra una morfología cúbica bien definida como lo previamente reportado para  $\text{KBiO}_3$ .

Finalmente, las pruebas EDS indican un porcentaje de potasio menor al 1% tanto en precipitación como en InR, mientras que para SQ se obtuvo 9.3% de potasio.

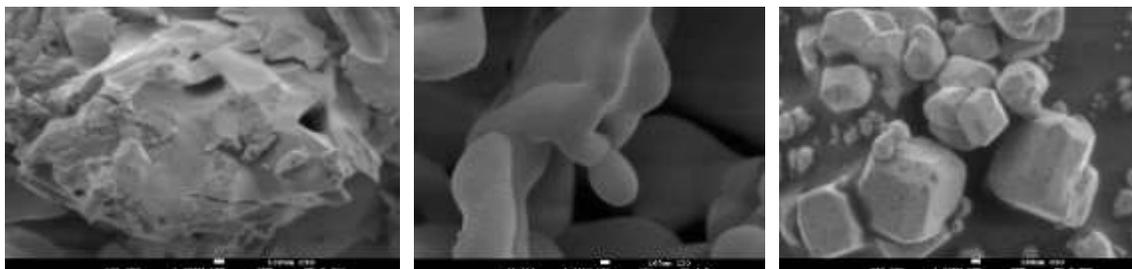


Figura 6. Imágenes SEM para a) precipitación, b) InR, c) SQ.

### CONCLUSIONES

En este trabajo se intentó sintetizar  $\text{KBiO}_3$  mediante las rutas de síntesis de precipitación, inyección rápida y sustitución química. Las caracterizaciones realizadas a las muestras fueron DRX, espectroscopía de reflectancia difusa y SEM donde, de acuerdo con estas, el material obtenido a partir de la técnica de sustitución química presenta una estructura cristalina cúbica, se estimó su band-gap en 1.9 eV y posee una morfología cúbica bastante similar a lo previamente reportado para  $\text{KBiO}_3$  en [4], por lo que, es la única técnica de las presentadas en este trabajo con las que se logró sintetizar  $\text{KBiO}_3$ .

### BIBLIOGRAFÍA

1. E. Grudner Carranza (2016). Tecnologías en desarrollo para la reducción del dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) ambiental, Rev. Tec. v.12 n.18.
2. Rajalakshmi R., Sathiya M., Ramesha K., Prakash A.S, Giridhar M., Shukla A.K. (2011). Photocatalytic properties of  $\text{KBiO}_3$  and  $\text{LiBiO}_3$  with tunnel structures. J. Chem. Sci. Vol. 123, No. 4, pp. 517–524.
3. Kunada K., Takahashi N., Kinomura N. (1996). Preparation and crystal structure of a new lithium bismuth oxide:  $\text{LiBiO}_3$ . Journal of solid-state chemistry 126, pp. 121-126.
4. Montalvo H.T., Sánchez M.D., Herández U.D., Torres M.L. (2018). The role of the reactive oxygen species and the influence of  $\text{KBiO}_3$  synthesis method in the photodegradation of methylene blue and ciprofloxacin. Reac Kinet Mech Cat 126, 561–573

## ESTUDIO DE LOS HÁBITOS EN EL USO DE TECNOLOGÍAS DE COMUNICACIÓN INTELIGENTES EN LA POBLACIÓN DE NUEVO INGRESO A ESTUDIAR INGENIERÍA EN LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITA-UNIDAD AZCAPOTZALCO

Armando Gómez Vieyra, Mauro Sergio Hernández Aguilar, Sonia Hernández Mota

División de Ciencias Básicas e Ingeniería, Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Azcapotzalco  
agyte@azc.uam.mx

### RESUMEN

Actualmente observamos una tendencia en el aumento de personas que requieren el uso de lentes oftálmicas, lo cual es atribuido al uso, en algunas ocasiones excesivo, de las tecnologías inteligentes por parte de la población joven. Si bien existen normas que limitan y regulan las emisiones de estos dispositivos, así como recomendaciones emitidas por los fabricantes acerca de los hábitos personales, las tecnologías de fabricación de las pantallas de los teléfonos celulares son determinantes en el impacto al sistema ocular. Para poder visualizar la tendencia de marcas, tecnologías, hábitos y ametropías, se realiza una encuesta entre los estudiantes de primer trimestre de ingeniería de la Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Azcapotzalco. Se procede con un levantamiento estadístico y un análisis de los resultados obtenidos de los datos recopilados. A partir del análisis de resultados, se definen las características y modelos de celulares a evaluar para correlacionar con los datos subjetivos. La caracterización objetiva de la emisión se presenta en el trabajo "Estudio de la emisión óptica de los teléfonos inteligentes", presentado en este mismo evento. Los resultados encontrados, muestran que los celulares que usa la población estudiada son de gama media, de las marcas Apple®, Huawei®, Motorola®, Samsung® y Xiaomi®, principalmente. La mitad de esta población, aproximadamente, usa lentes oftálmicas. El rango promedio de uso es entre 4 h y 8 h al día. Es de destacar que un alto porcentaje de los encuestados usan el celular al menos 2 h en condiciones de oscuridad parcial o total, lo cual, se ha demostrado, no es lo más conveniente para la salud ocular y un adecuado ritmo circadiano. Esto nos proporciona un panorama desalentador para nuestra sociedad y revela la necesidad de impulsar políticas públicas para el correcto uso de las tecnologías inteligentes, así como la necesidad de la revisión de las normas autorizadas en la fabricación de estos dispositivos.

### INTRODUCCIÓN

En los años 70's se realiza la primera llamada utilizando un teléfono móvil, por parte de un ingeniero de Motorola®; el teléfono de gran tamaño [1], generó un cambio significativo en la forma de comunicación, pero debido a su alto costo los primeros ejemplares eran objetos de lujo. Fue hasta los años 90's que el uso de estos dispositivos empezó a ser más accesible para la población de clase media. Del mismo modo, el tamaño del dispositivo fue disminuyendo y agregándoles funcionalidades; desde la pequeña pantalla monocromática hasta las pantallas cromáticas táctiles, una o varias cámaras CMOS, una fuente de iluminación, etc. En este mismo intervalo de tiempo, las costumbres y los apegos a los teléfonos celulares han evolucionado al grado de ser indispensables en la vida cotidiana de un gran sector de la población mundial. Pero, así como tienen sus ventajas y beneficios, también han venido a influir en un cambio social y psicológico de la población.

Con el avance en la tecnología celular, los usuarios empiezan a depender cada vez más de las aplicaciones desarrolladas para estos dispositivos, a tal grado que el simple hecho de recordar un número telefónico se ha vuelto trabajo del dispositivo, cuando anteriormente se memorizaban o escribía en pequeñas agendas de bolsillo y con este acto se ejercitan los mecanismos cognoscitivos del cerebro. El desarrollo de las diferentes aplicaciones se ha diversificado principalmente en las orientadas al entretenimiento, redes sociales y demás fetiches han ocasionado un cambio en los hábitos psicosociales, de la conducta y del bienestar en la salud (sedentarismo principalmente).

En este trabajo se presentan los resultados y el análisis estadístico sobre el uso y preferencia de teléfonos celulares en un sector acotado y controlado de población: estudiantes de nuevo ingreso de la universidad en un rango de edad de los 17 a los 24 años.

## TEORÍA

Lo humanos tienen una gran capacidad para entender y explicar los fenómenos que pasan a su alrededor y la herramienta principal para lograrlo es la observación. La vista nos da las bases para la comprensión de dichos fenómenos y es auxiliar en la búsqueda de soluciones a diversos problemas; igualmente, la mayor parte de lo que aprendemos es a través de la vista. El ojo y el sistema neurológico son una herramienta poderosa, pero a la vez frágil y sensible, que, al cambiar de condiciones, tiende a adaptarse. Sin embargo, para bien y para mal, el sistema neurológico puede alterarse por los cambios de hábitos cognoscitivos, ambientales y costumbristas relacionados directamente con la salud, como el sueño. El uso excesivo de las nuevas tecnologías celulares, así como sus aplicaciones, inciden directamente en la falta de sueño, sedentarismo y aislamiento social.

La ausencia de sueño conduce a un deterioro de la memoria y una reducción de las capacidades cognoscitivas, con un cambiante estado de ánimo, alterando completamente los ritmos circadianos. La existencia de ritmos circadianos se conoce desde el siglo XVIII, cuando el astrónomo francés Mairan se percató de los diferentes comportamientos de las plantas en su desarrollo diurno y nocturno. Desde entonces se han estudiado para gran parte el reino animal y vegetal. Se ha planteado que la evolución ha desarrollado biológicamente los ritmos circadianos para mantener períodos apropiados de sueño y vigilia, interviniendo en el control de otros ritmos diarios a pesar de la cantidad variable de luz diurna y oscuridad en diferentes estaciones del año y en distintos lugares del planeta. El control de este reloj biológico y la codificación de la luz ambiente es responsabilidad de las células ganglionares que contienen un fotorpigmento llamado melanopsina, el cual es activado por la luz despolarizada.

Al integrar a nuestra vida cotidiana el uso intenso de nuevas tecnologías como los celulares inteligentes, las computadoras, aplicaciones móviles, entre otras, se han modificado consistentemente los procesos psicosociales, el sueño, los hábitos cotidianos (aumento del sedentarismo), etc. Estos cambios provocan una evolución, que puede manifestarse como un deterioro en la salud, principalmente en los jóvenes desde los 12 hasta los 35 años aproximadamente. Sin embargo, no existen datos de los hábitos actuales de toda esta población y menos aún en nuestro país. Por lo cual se decidió iniciar esta investigación con un grupo acotado de estudiantes de nuevo ingreso a los programas de ingeniería.

## METODOLOGÍA

Actualmente los teléfonos inteligentes presentan como principal característica una pantalla táctil con alta resolución y un gran tamaño (comparado con los celulares de finales de los 1990's y principios de los 2000's), logrando eliminar el teclado físico y sustituyendo una computadora en algunas actividades. Aunado a esto, su practicidad para ser llevado a muchos lugares, las diversas aplicaciones creadas para estos dispositivos y la cada vez mayor capacidad de tiempo de operación, ha repercutido en el uso en condiciones no favorables para conservar un ritmo circadiano adecuado, así como para alterar psicofísicamente los hábitos de los usuarios.

Para poder tener un análisis de los usos y costumbres de la población de nuevo ingreso (personas ente 18 y 24 años aproximadamente) se diseñó una encuesta para conocer de manera general los hábitos en el manejo de los teléfonos inteligentes.

Los campos de interés son los siguientes:

- Licenciatura

- Edad
- Sexo
- Marca y modelo de teléfono
- Tiempo promedio de uso en horas al día
- Tiempo promedio de uso en oscuridad en horas al día
- Uso de lentes (sí/no)
- Material de las micas (dato no obligatorio)

La opción del material de las micas solo es de carácter informativo para saber qué tan involucradas están las personas con el tipo de lentes que usan, así como el uso de recubrimientos o filtros que se ofrecen en el mercado.

La encuesta se aplicó a grupos de nuevo ingreso en la UEA Taller de Física, a los cuales se les explicó el motivo de la encuesta y fue contestada de forma anónima.

### RESULTADOS

En la Figura 1 se muestra el porcentaje de personas que utilizan lentes, mientras que en la Figura 2 se comparan las diferentes marcas.

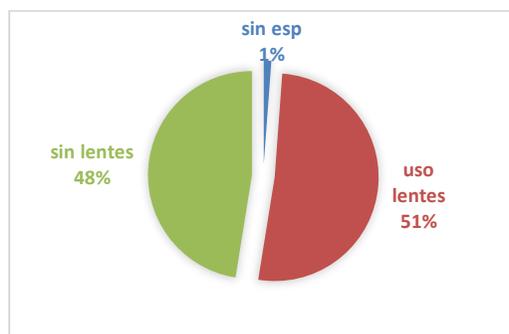


Figura 1. Gráfica del porcentaje de personas que emplean lentes.

Con un total de 257 alumnos encuestados de primer ingreso, en la Figura 3 se muestra la distribución de alumnos por ingeniería, con una mayoría en las siguientes: Química con el 15%; seguida de Física y Ambiental, ambas con el 14%; mientras que Eléctrica es la que tiene menor cantidad de alumnos, representando solo el 3% del total encuestado, esto puede deberse a los procesos de ingreso de la institución.

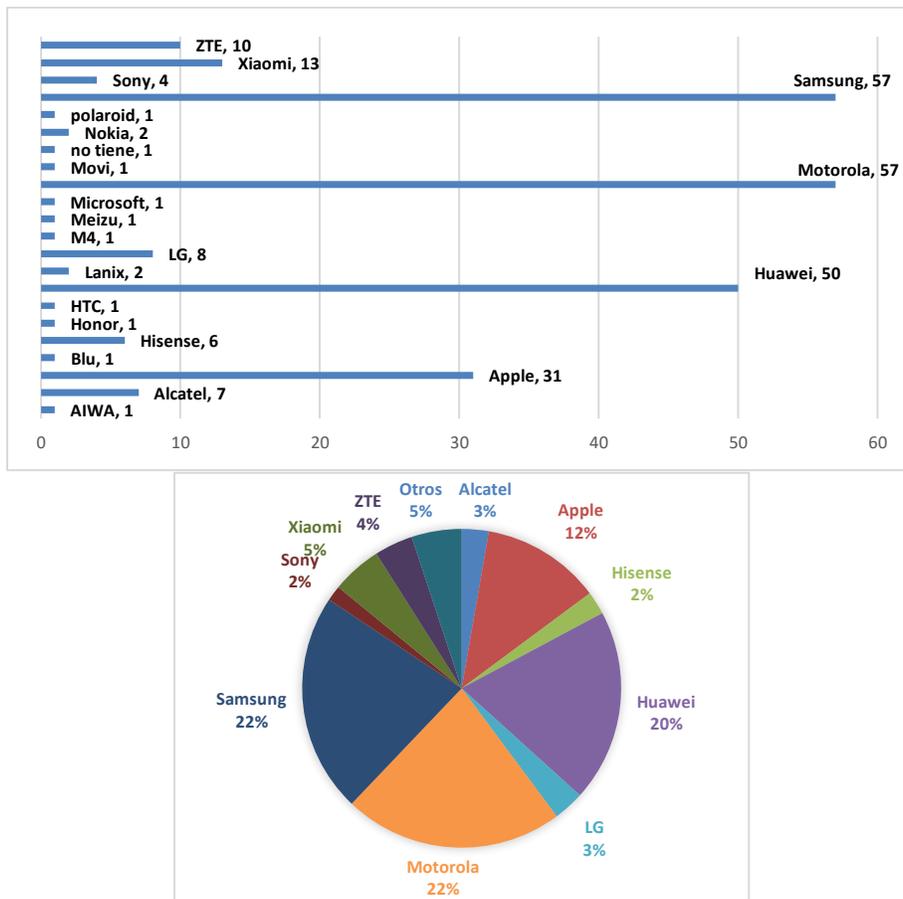


Figura 2. Gráfica cantidad de usuarios por marca de teléfono y gráfica porcentual.

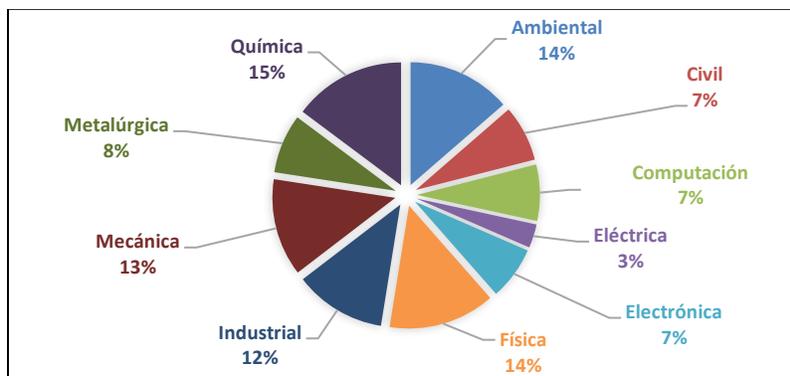


Figura 3. Gráfica del porcentaje de alumnos por ingeniería.

En la Figura 4 se presenta la distribución de edad de los encuestados, estando la mayoría en un rango entre los 18 y 21 años (78%); aproximadamente el 19% de los encuestados tienen entre los 22 y 30 años; se presenta un caso aislado con 16 años y 6 casos con 17 años. Finalmente, notamos que aproximadamente el 39% de los alumnos tienen 18 años, es decir, son adultos jóvenes.

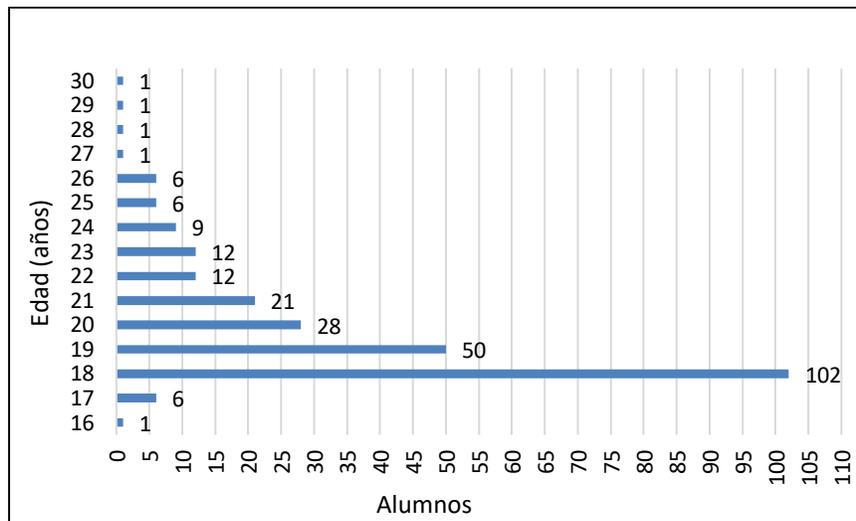


Figura 4. Distribución de alumnos por edades.

En la Figura 5a, se presenta una comparativa entre los usuarios de lentes y los que no (donde tampoco tenemos la información si los necesitan), mostrando el uso de lentes por género de forma separada y destacando que en los hombres es menor la cantidad de personas con lentes con solo el 46% de usuarios. Por el contrario, en las mujeres es mayor la cantidad de individuos con lentes con el 54%, dentro de los datos. Mientras que en la Figura 5b, se muestran las personas que requieren lentes por ingeniería, destacando los alumnos de Física y electrónica con el 61% de personas con lentes, seguidos de ambiental con un 58.8%, al final Metalúrgica con solo el 21% de los alumnos.

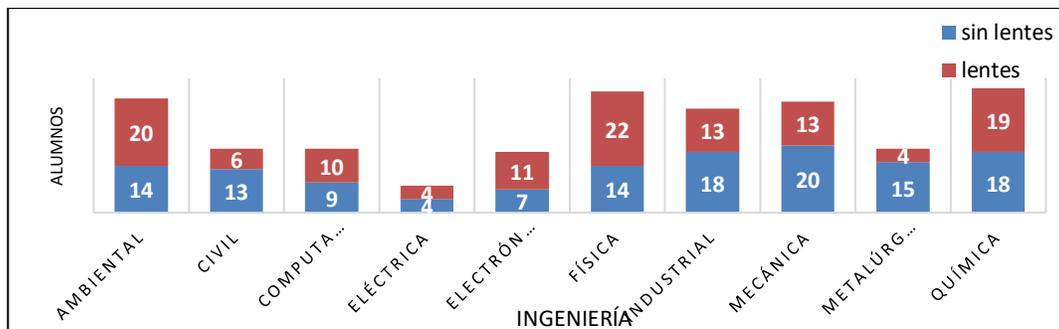
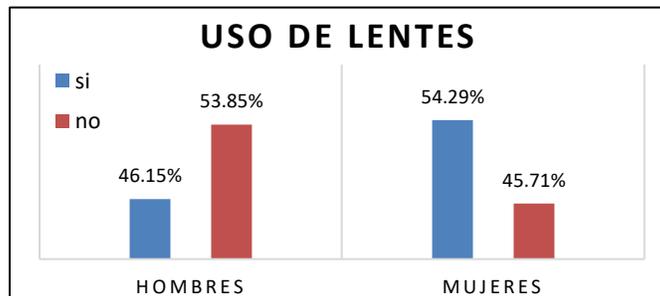


Figura 5. a) por género, b) Uso de lentes por ingeniería.

Respecto a la información de los teléfonos inteligentes de esta población, en la Figura 6 se presentan las marcas empleadas, así como la cantidad de usuarios para cada uno. Las marcas que lideran el número de usuarios son Samsung y Motorola, seguido Huawei, Apple y Xiaomi, que no discrepa mucho de la realidad nacional (Figura 6a). En la Figura 6b, solo se muestran los equipos con uno o dos usuarios, al cual llamamos “Grupo B”. Dentro de estos se encuentra la marca Nokia®, que llegó a dominar el mercado antes de la entrada de los teléfonos inteligentes, y en la actualidad solo unas cuantas personas adquieren un teléfono de dicha marca.

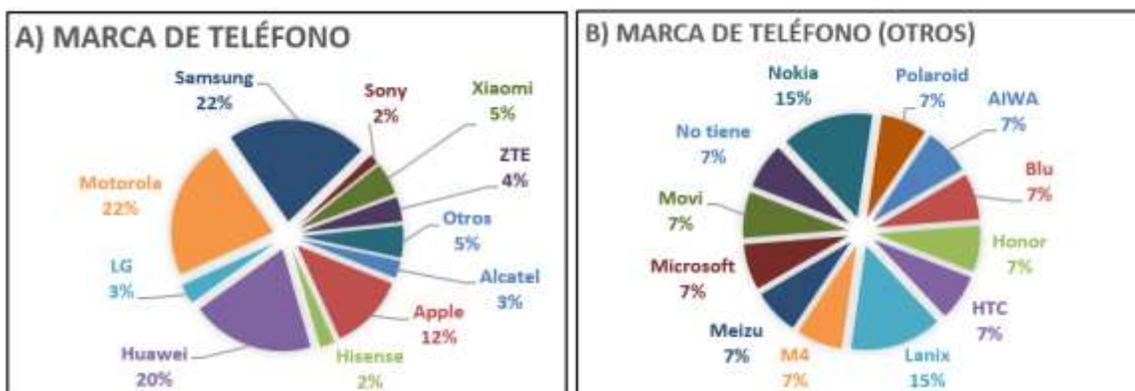


Figura 6. a) Usuarios por marca de teléfono con mínimo 4 usuarios (Grupo A), b) Usuarios por marca de teléfono con máximo 2 usuarios (Grupo B).

La Figura 7 nos muestra de forma general el tiempo que los alumnos encuestados invierten en el uso de teléfonos inteligentes, donde la mayor de nuestro universo destina entre 4 y 8 horas diarias en actividades que involucran el uso de teléfonos inteligentes (es importante señalar que esta encuesta se aplicó en el primer día de la clase Introducción a la Física en la Universidad y antes de esta pandemia). Asimismo, se observa una gran parte de los alumnos encuestados entre las 5 y 6 horas diarias uso; un pequeño porcentaje afirma que el tiempo que destina es mayor a 10 horas y una persona asegura que dedica 18 horas de forma cotidiana al uso del teléfono móvil.

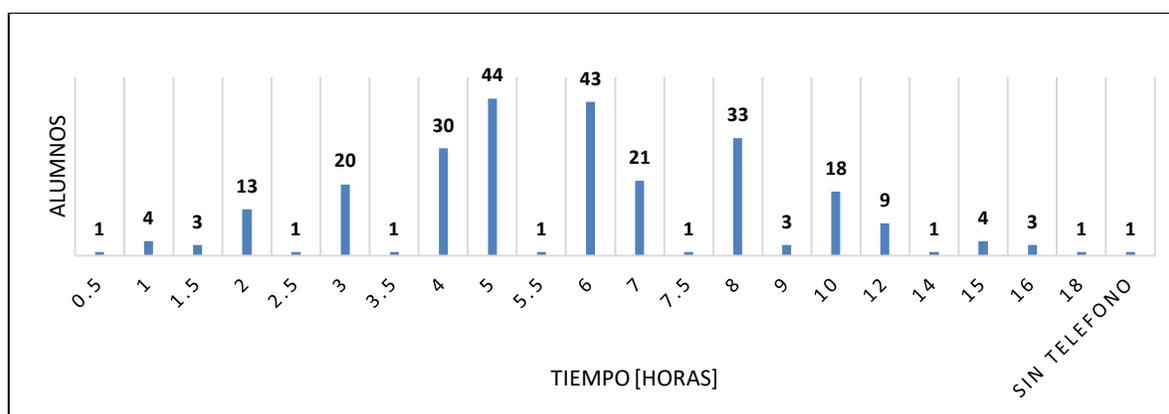


Figura 7. Tiempo promedio de uso de teléfonos por día en horas.

Tomando en cuenta la Figura 7, se observa que la mayor cantidad de usuarios de celular en oscuridad se concentra entre aquellos que lo emplean durante 4, 5, 6 y 7 horas diarias. La Figura 8

muestra la distribución en horas de uso bajo estas condiciones para cada uno de los grupos anteriores.

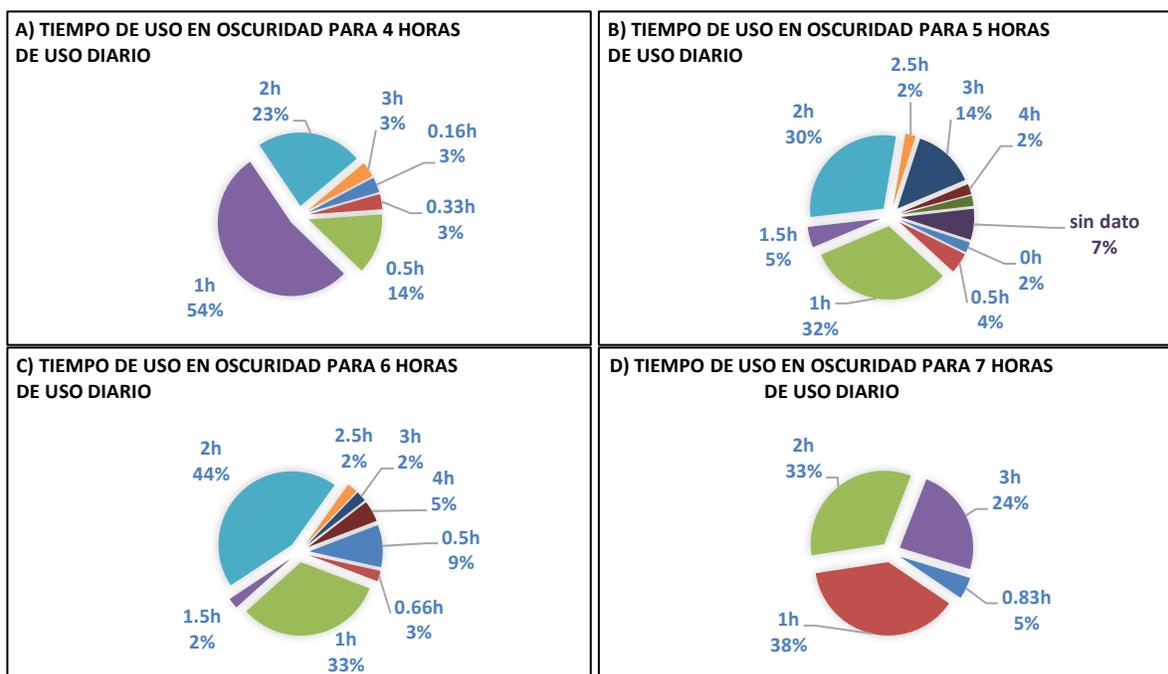


Figura 8. Porcentaje de uso de teléfonos inteligentes en oscuridad: a) 4 horas diarias, b) 5 horas diarias, c) 6 horas diarias, d) 7 horas diarias.

En la Figura 8a se muestra el grupo de personas que utilizan su teléfono 4 horas al día. Del total, un 20% de las personas encuestadas aseguran que el uso del teléfono es menor a una hora diaria en la oscuridad, desde 20 min a media hora. Mientras que más de la mitad lo mantiene en uso por lo menos 1 hora; solo una pequeña parte hasta 3 horas de uso.

En la Figura 8b, con un tiempo de uso diario igual a 5 horas, se tiene un grupo que dedica el tiempo en oscuridad de una forma más variada, pero hay una parte que afirma no usar el teléfono en oscuridad, así como personas que no llenaron el campo requerido. Es posible que no pudieron dar una cantidad exacta o pasan demasiado tiempo con su dispositivo en oscuridad y evitan dar el tiempo real de uso. Además, sobresale el uso de 1 a 2 horas en la mayoría de casos.

Pasando a la Figura 8c, se observa que los alumnos empiezan a incrementar las horas de uso en oscuridad. Casi la mitad del grupo dedica alrededor de 2 horas a esta actividad y otra gran parte invierte 1 hora; otra pequeña fracción menciona destinar un tiempo mayor a 2 horas. Además, se observa un incremento en la cantidad de estudiantes que dedican 4 horas al uso del celular en oscuridad, pasando de un 2% en la gráfica b) a un 5%. Los tiempos menores a 30 min desaparecen.

Por último, en la Figura 8d, vemos regiones bien definidas donde el tiempo menor a 1 hora prácticamente desaparece con solo un 5%, dejando 3 grupos con muy poca diferencia entre sí. En contraste con las Figuras 8b y 8c, en esta no se presentan alumnos con 4 o más horas de uso, dominando los usuarios que permanecen 1 hora en la oscuridad y con una diferencia mínima respecto a los que pasan 2 horas. Es notorio el incremento de los usuarios de 3 horas con un 24%, en comparación con la gráfica 8a, donde se tenía solo el 3%; dando un salto en 8b, hasta un 14% y en 8c bajando al 2%. Lo anterior nos da un indicio de problemas para dejar a un lado el teléfono,

ya que la mayor parte del uso en oscuridad ocurre antes de dormir, lo que puede estar causando insomnio o una dependencia al dispositivo.

De los datos de las encuestas se obtiene el tiempo promedio de empleo al día por marca telefónica para el Grupo A, como se muestra en la Figura 9, donde el uso de estos dispositivos de comunicación es superior a las 4 horas diarias. De esta Figura, es posible observar que la marca SONY es la que presenta menor tiempo de uso, con 4.5 horas al día, seguido de Alcatel y ZTE, llegando a las 5 horas diarias. De forma considerable tenemos a los usuarios de Apple, los cuales invierten más de 7 horas al día en el uso del teléfono; seguido de los teléfonos LG; mientras las tres marcas con más usuarios (Huawei, Motorola y Samsung), tienen un promedio de uso cercano, con una diferencia de apenas 1 hora, pero manteniéndose por debajo de las 7 horas diarias. El promedio de uso diario para el Grupo A es de aproximadamente 6 horas.

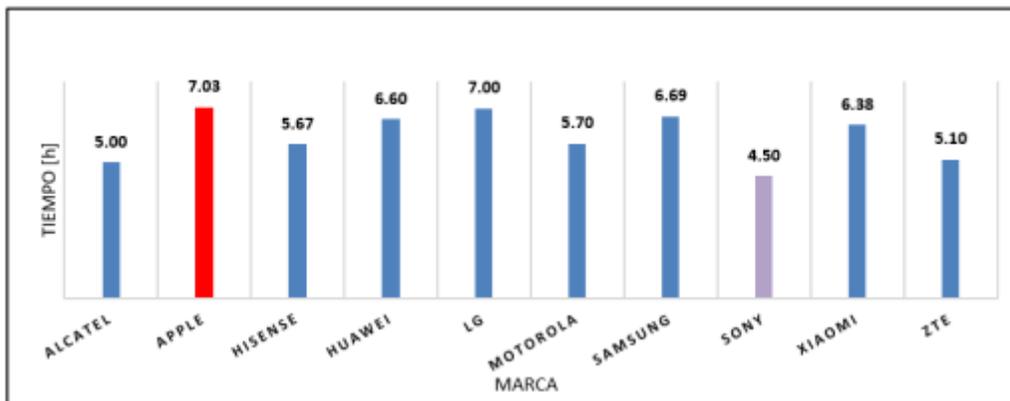


Figura 9. Tiempo de uso de teléfonos inteligentes al día, en horas, en el Grupo A.

El parámetro más importante para esta investigación, dentro de la encuesta aplicada, es el uso de estos dispositivos en oscuridad. Esto debido a que dicha práctica se realiza antes de dormir: cuando las luces de la habitación están apagadas y teniendo como única fuente de iluminación la pantalla del teléfono; la cual aun en modalidad de lectura nocturna también altera al organismo de forma física (por ejemplo, síndrome de ojo seco temporal) y psicológica; además, modifica patrones habituales de sueño y del ritmo circadiano. Los resultados se muestran en la Figura 10, siendo nuevamente iPhone® la marca con mayor tiempo de uso bajo estas condiciones, llegando a 3 horas promedio, seguido igualmente por LG®, como en la Figura 9. Por otro lado, los teléfonos inteligentes de la marca SONY y Huawei pasan a ser los menos utilizados en promedio en oscuridad, con una diferencia mínima. Es importante notar que nuestra juventud está pasando un promedio de 2 horas diarias en el uso a oscuridad y, muy posiblemente, nocturno de estos dispositivos. Habría sido muy provechoso preguntar en esta misma encuesta cuántas horas duerme esta población.

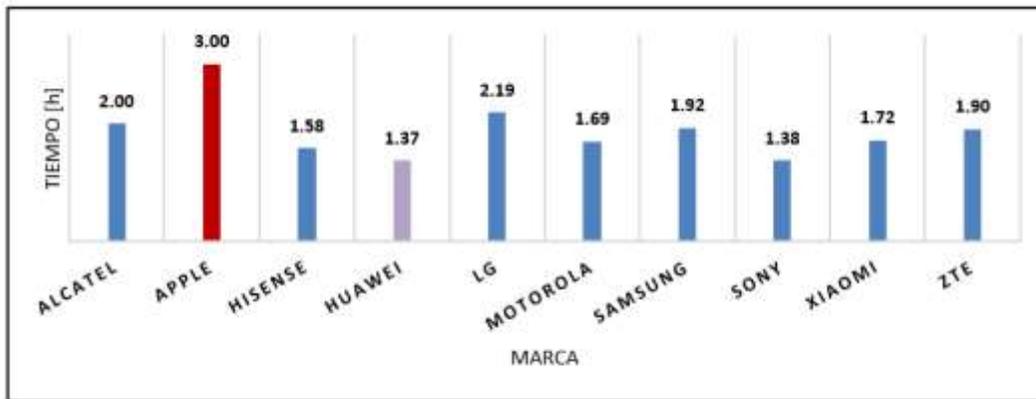


Figura 10. Tiempo de uso de teléfonos inteligentes en oscuridad total, en horas, en el grupo A.

Otra de las preguntas que omitimos y también nos daría un panorama importante sobre este cambio de hábitos, es la pregunta sobre el uso de filtro azul o modo nocturno, así como el nivel de brillo en la pantalla al utilizarlo en horas de oscuridad.

Toda esta información recopilada y presentada nos da pie a reformularnos si en México estamos conscientes de los posibles daños por la adicción al uso de los teléfonos celulares. Aunque muchos de los datos proporcionados por el universo de participantes en esta encuesta son cualitativos, nos presenta suficiente información para preguntarnos cuál sería la forma adecuada para enseñar a los niños (el futuro de nuestra población) a utilizar un celular como una herramienta que beneficie y no cree una dependencia nociva o se vuelva un agente externo de decremento en la calidad de vida de todos los usuarios.

## CONCLUSIONES

Los hábitos personales en una población de estrato económico media baja o baja que estudia una licenciatura (entre los 17 y 28 años aproximadamente) con las nuevas tecnologías, se han visto modificados de gran manera, sobre todo en personas jóvenes, con una gran cantidad de horas de uso y, sobre todo, en oscuridad parcial o total, alterando significativamente los ritmos circadianos dado que estos responden principalmente a la luz. Lo anterior provoca problemas para conciliar el sueño, así como problemas visuales al forzar la vista en la oscuridad. Sumando a todo esto, la distancia entre el ojo y el dispositivo, que se coloca próximo al “punto cercano” (10 cm). Otro factor importante es la lubricación, el prestar atención al dispositivo puede disminuir el pestañeo (mecanismo natural de lubricación) lo que provoca resequedad e irritación en el globo ocular. Esto nos lleva a considerar un estudio mayor para poder redefinir qué normas debemos seguir en la población infantil, ya que la tecnología de pantallas inteligentes apenas llegó hace 15 años y ya estamos viendo las posibles consecuencias a largo plazo.

## BIBLIOGRAFÍA

1. Y. Kuse, K. Ogawa, K. Tsuruma, M. Shimazawa, Hara H, “Damage of photoreceptor-derived cells in culture induced by light emitting diode-derived blue light”, *Sci. Rep.*, Vol. 4, 5223, 2014. <https://doi.org/10.1038/srep05223>
2. A. Wenzel, C. Grimm, M. Samardzija, C.E. Reme, “Molecular mechanisms of light-induced photoreceptor apoptosis and neuroprotection for retinal degeneration”, *Prog Retin Eye Res.*, Vol. 24, 2, 2005, pp. 275-306.
3. D.T. Organisciak, D.K. Vaughan, “Retinal light damage: mechanisms and protection”, *Prog Retin Eye Res.*, Vol 29, 2, 2010, pp. 113-34.

4. J. Mouland, F. Martial, A. Watson, R. Lucas, T. Brown, "Cones Support Alignment to an inconsistent World by Suppressing Mouse Circadian Responses to the Blue Colors Associated with Twilight", *Current Biology*, Vol. 29, 24, 2019, pp. 4260-4267.
5. S. Chokroverty, "Medicina de los trastornos del sueño. Tercera edición", (Elsevier, Impreso en España, 2011), pp. 5-26.
6. D. Purves, G. J. Augustine, D. Fitzpatrick, W.C. Hall, A.S. Lamantia, J. O. McNamara, S. M. Williams, "Neurociencia. Tercera edición", (Ed. Panamericana, México, 2007), pp. 733-760.

## ESTUDIO DE LA EMISIÓN ÓPTICA DE LOS TELÉFONOS INTELIGENTES

Armando Gómez Vieyra, Mauro Sergio Hernández Aguilar, Sonia Hernández Mota

División de Ciencias Básicas e Ingeniería, Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Azcapotzalco  
agyte@azc.uam.mx

### RESUMEN

El uso de teléfonos inteligentes se ha vuelto una necesidad en la sociedad moderna, pasando de solo realizar llamadas y mensajes hasta convertirse rápidamente en un medio de entretenimiento, comunicación y una herramienta versátil para cuestiones laborales y académicas. En este sentido, hemos iniciado un trabajo de investigación, presentado en este mismo evento, titulado “Estudio de los hábitos en el uso de tecnologías de comunicación inteligentes en la población de nuevo ingreso a estudiar ingeniería en la Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Azcapotzalco”, el cual se enfoca a analizar los efectos en el cambio de hábitos y, por lo tanto, en la modificación del ritmo circadiano de los individuos jóvenes. Tomando en cuenta los resultados de este trabajo y considerando que las empresas tienden a crear su propia tecnología bajo el acotamiento de las normas que establece cada gobierno, nos dimos cuenta de que en realidad desconocemos el tipo de luz que emana de las pantallas de estos dispositivos, su intensidad, polarización, región de emisión, etc. Por lo que, en este trabajo nos enfocamos en manipular los colores aparentes de emisión de cinco teléfonos inteligentes de las marcas Apple®, Huawei®, Motorola®, Samsung® y Xiaomi®, con el objetivo de analizar la emisión de estos. Para esto se consultaron las hojas técnicas de cada dispositivo evaluado. Se encontró el probable uso de un led azul con tratamiento de fósforo, aun cuando los fabricantes no lo especifican. La luz azul emitida por estos dispositivos, especialmente iPhone® (que emite intensamente en la región azul sin importar el color que proyecte), contribuye a alterar el ciclo circadiano y, en menor medida, afecta biológicamente al sistema ocular. Los demás modelos presentan una emisión más cercana al violeta, aumentando el riesgo de generar daño fotoquímico. Las emisiones en el límite del infrarrojo encontradas en estos modelos son muy bajas, pero pueden ocasionar daño térmico y síndrome de ojo seco, por el uso excesivo en oscuridad. Estos resultados nos llevan a concordar con los reportados anteriormente, donde se ha mostrado que el uso excesivo de estos dispositivos puede alterar nuestro ciclo circadiano y a largo plazo acelera algunas alteraciones propias del envejecimiento humano natural.

### INTRODUCCIÓN

Los humanos tienen una gran capacidad para entender y explicar los fenómenos que suceden a su alrededor y la herramienta principal para lograrlo es la observación. En años recientes, la llegada de los teléfonos inteligentes ha cambiado la forma de llevar a cabo el proceso de aprendizaje. Esto debido al acceso de una gran cantidad de recursos informáticos que se tienen a la palma de la mano, entre los que desatan los videos, las páginas web, las redes sociales, etc. Es relevante mencionar el cambio en el comportamiento social debido al desarrollo de juegos en línea que han evolucionado desde los años ochenta y que ahora se pueden instalar en los teléfonos inteligentes o jugarlos en línea, así como el desarrollo de redes sociales en la red que han cambiado la forma de interrelacionarse entre las personas más jóvenes. Lo anterior ha desatado una feroz guerra comercial entre las empresas fabricantes de estos dispositivos que son ofertados en distintas gamas, para distintos estratos sociales o necesidades tecnológicas. Entre compañías fabricantes de teléfonos inteligentes, una de las características más sobresalientes es la pantalla, que año con año va mejorando y adquiriendo diferentes funciones, tales como optimizar la precisión en la parte táctil, brillo, contraste y últimamente el incremento en la resolución. Cada compañía desarrolla y fabrica su propia pantalla, pero respetando las normas vigentes de la emisión de estos dispositivos. Sin embargo, como usuarios finales no tenemos información clara sobre la cantidad de luz, los anchos de emisión y los efectos de estos en nuestra salud biológica o psicológica.

## TEORÍA

El ojo y el sistema neurológico es una herramienta poderosa, pero a la vez frágil y sensible, que, al cambiar de condiciones, tiende a adaptarse. Sin embargo, para bien y para mal, el sistema neurológico puede alterarse por los cambios de hábitos cognoscitivos, ambientales y de hábitos, como el sueño. El uso excesivo de las nuevas tecnologías celulares, así como sus aplicaciones, inciden directamente en la falta del sueño, sedentarismo y aislamiento social.

El desarrollo de los teléfonos móviles inició en los años 70's, pero pasaron casi 20 años hasta que fueron accesibles para el público en general. En los años 90's, los teléfonos habían disminuido drásticamente de tamaño y solo constaban de un teclado mecánico, una pantalla de cristal líquido monocromática, carcasa y elementos internos para realizar su función. Sin embargo, el tiempo, el mercado y el avance tecnológico nos han entregado en la actualidad teléfonos inteligentes con un peso de 200 g aproximadamente, con pantallas táctiles y un gran desarrollo de software. En este mismo intervalo de tiempo, las costumbres y los apegos a los teléfonos celulares han evolucionado, al grado de ser indispensables en la vida cotidiana de un gran sector de la población. Pero, así como tienen sus ventajas y beneficios, también han venido a influir negativamente en un cambio social y psicológico de la población.

Las pantallas del mercado actual tienen tres tecnologías TFT-LCD, IPS-LCD y AMOLED, estas últimas son empleadas en los teléfonos inteligentes de gama alta. La tecnología LCD es la más empleada por la población en general, presentando la desventaja que todos sus píxeles siempre estarán activos, aun cuando se busque un color o tonalidad específica. Por lo cual es importante analizar los espectros de emisión de las diferentes tecnologías, así como correlacionarlas para poder predecir sus ventajas y desventajas.

## METODOLOGÍA

Para este trabajo se consideraron los resultados del trabajo “Estudio de los hábitos en el uso de tecnologías de comunicación inteligentes en la población de nuevo ingreso a estudiar ingeniería en la Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Azcapotzalco”, por lo que se evaluaron cinco celulares de gama media-baja que se presenta en la Tabla 1, donde también se presentan sus características de cada pantalla.

Tabla 1 Especificaciones de pantalla para cada modelo analizado.

MARCA	MODELO	TIPO DE PANTALLA	TAMAÑO [in]	RESOLUCIÓN N [píxeles]	COLORES EN PANTALLA	RELACIÓN DE ASPECTO	DENSIDAD DE PÍXELES [ppp]	PROTECCIÓN	OTROS	AÑO DE LANZAMIENTO
HUAWEI	Y9 2019	IPS LCD	6.5'	1080 X 2043 Full HD+	16 M	19: 5 : 9	~396	-	Cristal 2.5D	2018
IPHONE (APPLE)	5s	IPS LCD	4'	1136 X 640	16 M	16 : 9	~326	Corning gorilla glass	oleofóbica	2013
MOTOROLA	G6 Plus	IPS LCD	5.9'	1080 X2160 Full HD+	16M	18: 9 Max Vision	~409	Corning gorilla glass 3	oleofóbica	2018
SAMSUNG	Grand Prime (SM-G531H)	TFT LCD	5'	540 X 960 (qHD)	16 M	16: 9	~220	-	-	2014
XIAOMI	Redmi Note 7	IPS LCD	6.3'	1080 x 2340 Full HD+	16 M	19: 5 : 9	~409	Corning gorilla glass 5	-	2019

Para realizar la caracterización, se eligieron cuatro colores base que se pueden observar en el celular (blanco, azul, rojo y verde), obtenidos a partir de la aplicación Pure Solid Color Wallpaper ®, Ver 1.2, desarrollado por VALVRAVE1234.

Por la baja intensidad de luz de las pantallas, los teléfonos se caracterizaron con un monocromador automatizado con tubo fotomultiplicador en el laboratorio de docencia del Departamento de Ciencias Básicas de la UAM Azcapotzalco. El arreglo experimental se muestra en la Figura 1.

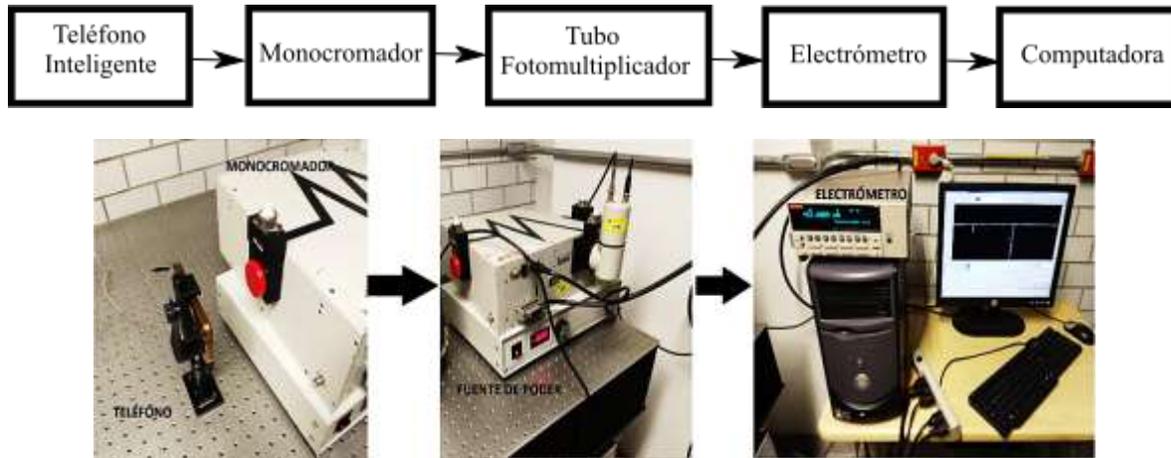


Figura 1. Arreglo experimental para la caracterización de la emisión en teléfonos inteligentes.

Cada teléfono inteligente se coloca en un adaptador para soporte trípode DESS para celular y monturas optomecánicas para lograr la estabilidad y altura necesaria. La luz entra por la rendija del monocromador y sale por un puerto al cual está acoplado un tubo multiplicador con una fuente de alimentación ajustada a 601 V para todas las mediciones. La adquisición de la señal de corriente es adquirida por un electrómetro Keithley y, finalmente, mediante comunicación GPIB se transfieren los datos a la computadora, usando el programa tracq32 Ver 3.2, de la empresa Oriel Instrument, para el control completo del arreglo experimental.

El procesamiento de datos se realiza con el programa SciDAVis®, Ver 1.26, de Free Software Foundation®. En el software de control del monocromador se fija a una configuración de muestreo que va de los 300 nm a los 800 nm, con una resolución de 1 nm. Para el análisis de la emisión de las pantallas se divide por color cada modelo, dejando la intensidad en unidades arbitrarias normalizadas (u. a.).

Cada teléfono se configuró con el máximo brillo posible, deshabilitando la opción de brillo automático y el mayor tiempo de espera para el bloqueo de pantalla, evitando así variaciones en la intensidad de emisión de las pantallas.

## RESULTADOS

En la Figura 2 se muestra la comparación de la emisión de todos los modelos evaluados en este trabajo, proyectando una pantalla totalmente blanca y utilizando la opción de suavizado proporcionada por el programa SciDAVis, dándole así una mayor definición a cada espectro.

En la Figura 2, destaca una emisión bastante semejante todos los modelos a excepción del iPhone®, por lo que al realizar un acercamiento en la región del violeta y azul (Figura 3) se observa la diferencia de emisión debida a las diversas tecnologías y diseños.

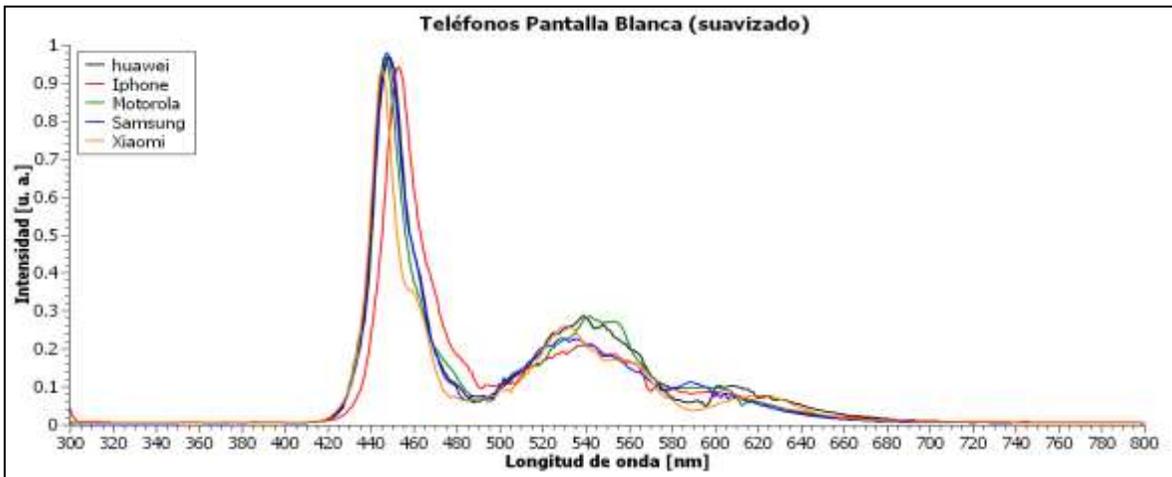


Figura 2. Emisión suavizada de los teléfonos con pantalla blanca.

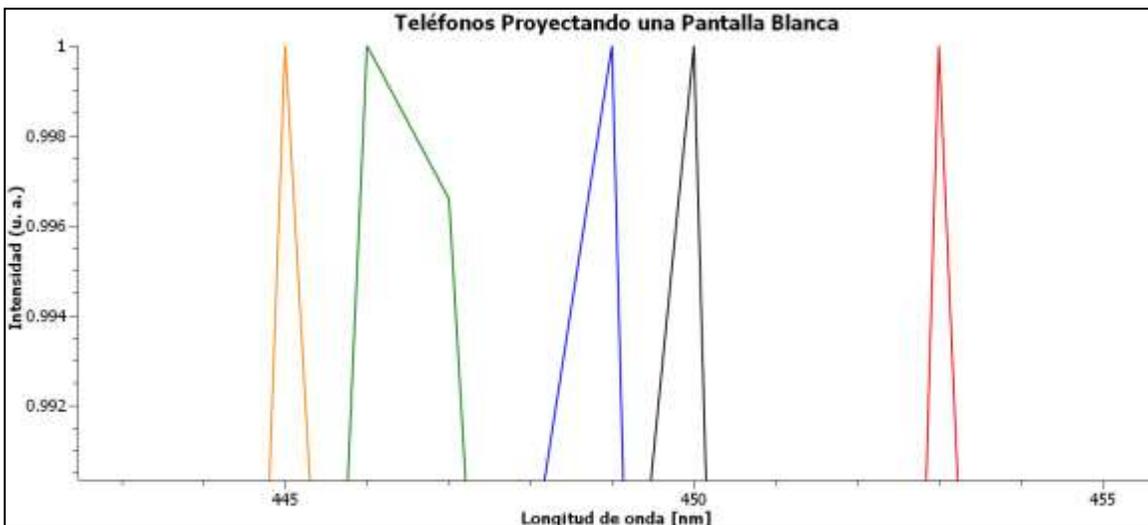
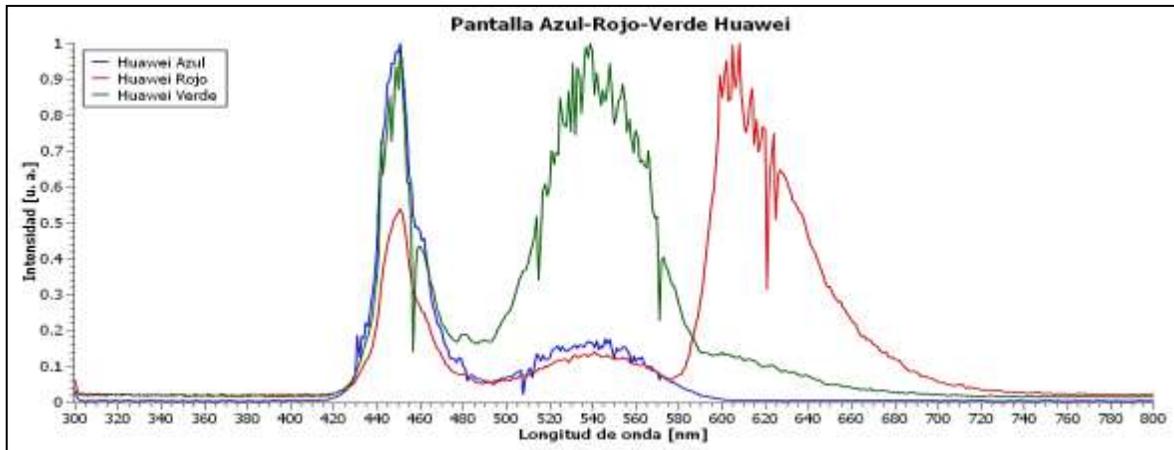


Figura 3. Acercamiento de la emisión suavizada de los teléfonos con pantalla blanca en la región de los 440 nm a 455 nm.

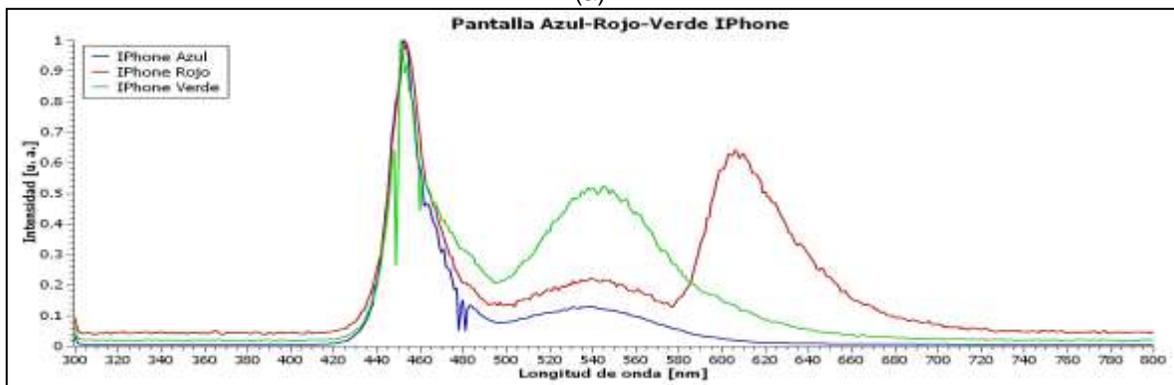
El primer pico de emisión lo proporciona el modelo de la marca Xiaomi®, seguido de Motorola®, Samsung®, Huawei® y al final iPhone®, con una diferencia de 14 nm entre el primero y el último, y un ancho espectral semejante entre las marcas, pero ligeramente más ancho por parte de Motorola®.

De la Figura 2 se puede observar que la emisión al infrarrojo es prácticamente inexistente en todos los casos presentados. Por lo cual no tendría ningún efecto en las personas que sufren síndrome de ojo seco. La diferencia más notable se observa con la pantalla tipo retina de iPhone® respecto a la de los demás modelos que utilizan una IPS LCD estándar y Samsung®, que utiliza una TFT LCD.

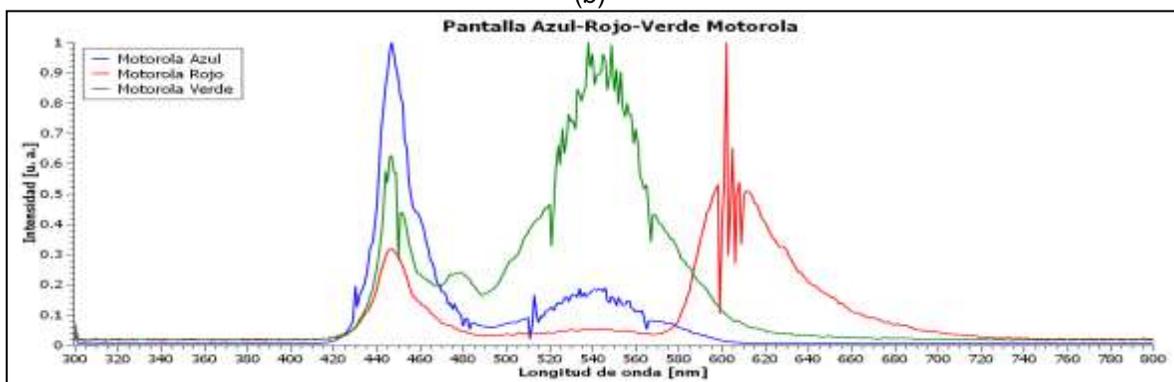
En la Figura 4 se presentan las emisiones de la proyección de pantallas roja, verde y azul en todos los modelos evaluados en este trabajo. La gráfica se ha suavizado para poder realizar una comparación adecuada.



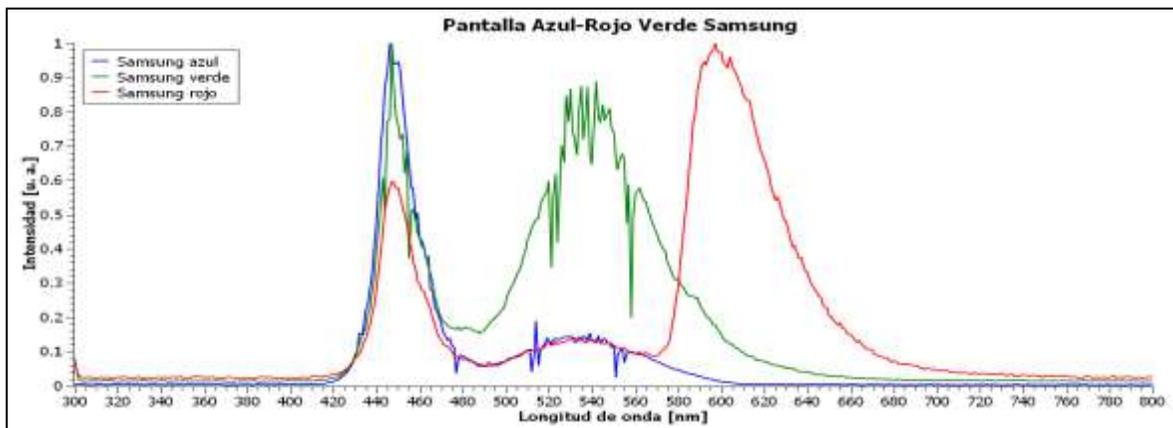
(a)



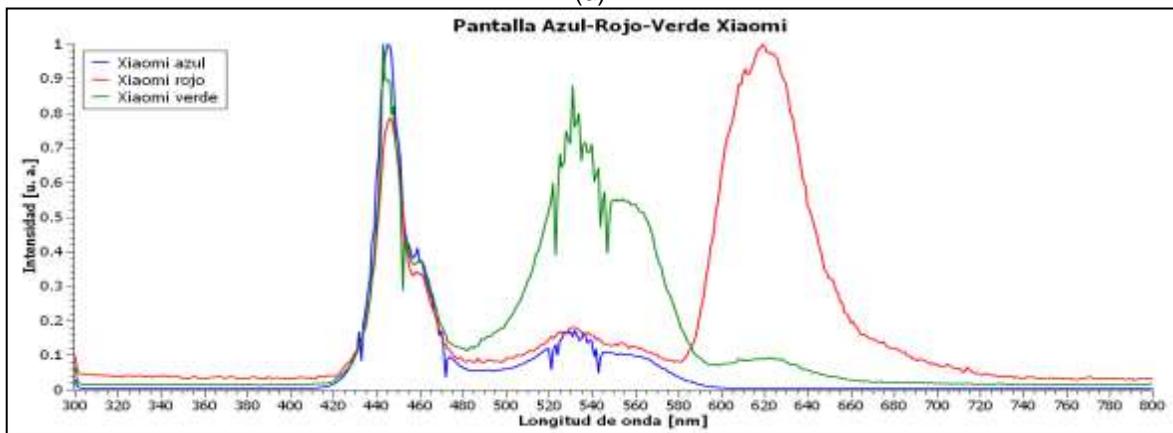
(b)



(c)



(d)



(e)

Figura 4. Emisión de las pantallas de las diversas marcas en proyección total de azul, rojo y verde. a) Huawei. b) iPhone. c) Motorola. d) Samsung. e) Xiaomi.

En la Figura 4 se observa que debido a la tecnología LCD, aun cuando no se desee, se emite siempre en la región de violeta-azul. La diferencia radica en la emisión relativa que se emite al proyectar un rojo o un verde. En algunas marcas es muy notorio que se emite casi la misma cantidad de luz azul-violeta que la cantidad de rojo y azul. Mientras en otras marcas es muy notorio que la cantidad relativa de luz azul-violeta disminuye comparada con la emisión de rojo y verde.

Es importante considerar que el ojo está biológicamente diseñado para tener una mejor respuesta a los colores verdes, mientras los colores azules-violetas tienden a alterar biológica y psicológicamente nuestros ritmos circadianos. Por lo que sería importante no emplear el celular en la oscuridad y considerar el uso de gafas que mitiguen las componentes no deseadas en la región de los violetas-azules. Las emisiones están muy lejos de producir una alteración biológico-molecular; es decir, no alterarían la estructura ocular. Sin embargo, no se puede decir lo mismo de nuestra parte neurológica, donde se ve que pueden alterar los ciclos circadianos, produciendo efectos en la forma de convivencia social y alteraciones en la salud pública.

## CONCLUSIONES

Los hábitos personales en una población estrato económico medio bajo o bajo que estudia una licenciatura (entre los 17 y 28 años aproximadamente), con las nuevas tecnologías, se han visto modificados de gran manera debido al uso excesivo de los teléfonos inteligentes. En este trabajo se evaluaron cinco modelos de celular de clase media a baja, donde se encontró que su

funcionamiento es adecuado y seguro para no producir un daño biológico a la salud. Sin embargo, es importante notar la gran cantidad de componentes en el violeta-azul pueden alterar significativamente los ritmos circadianos dado que estos responden principalmente a la luz. El principal grupo en riesgo de sufrir dicha alteración es la población joven debido a la gran cantidad de horas de uso y sobre todo en oscuridad parcial o total. Lo anterior provoca problemas para conciliar el sueño, así como problemas visuales al forzar la vista en la oscuridad, sumando a todo esto la distancia entre el ojo y el dispositivo, que se coloca próximo al "punto cercano" (10 cm). Otro factor importante es la lubricación, el prestar atención al dispositivo puede disminuir el pestaño (mecanismo natural de lubricación), lo cual provoca resequedad e irritación en el globo ocular; sumando a esto, la radiación infrarroja del dispositivo completo, puede ocasionar ojo seco temporal. Toda esta información recopilada y presentada nos da pie a reformularnos si en México estamos conscientes de los posibles daños por la adicción al uso de los teléfonos inteligentes.

#### BIBLIOGRAFÍA

1. Y. Kuse, K. Ogawa, K. Tsuruma, M. Shimazawa, Hara H, "Damage of photoreceptor-derived cells in culture induced by light emitting diode-derived blue light", *Sci. Rep.*, Vol. 4, 5223, 2014. <https://doi.org/10.1038/srep05223>
2. A. Wenzel, C. Grimm, M. Samardzija, C.E. Reme, "Molecular mechanisms of light-induced photoreceptor apoptosis and neuroprotection for retinal degeneration", *Prog Retin Eye Res.*, Vol. 24, 2, 2005, pp. 275-306.
3. D.T. Organisciak, D.K. Vaughan, "Retinal light damage: mechanisms and protection", *Prog Retin Eye Res.*, Vol 29, 2, 2010, pp. 113-34.
4. J. Moulard, F. Martial, A. Watson, R. Lucas, T. Brown, "Cones Support Alignment to an inconsistent World by Suppressing Mouse Circadian Responses to the Blue Colors Associated with Twilight", *Current Biology*, Vol. 29, 24, 2019, pp. 4260-4267.
5. S. Chokroverty, "Medicina de los trastornos del sueño. Tercera edición", (Elsevier, Impreso en España, 2011), pp. 5-26.
6. D. Purves, G. J. Augustine, D. Fitzpatrick, W.C. Hall, A.S. Lamantia, J. O. McNamara, S. M. Williams, "Neurociencia. Tercera edición", (Ed. Panamericana, México, 2007), pp. 733-760.

## REJILLAS DE DIFRACCION COMPUESTAS DE MICROCANALES DONDE FLUYEN LIQUIDOS OPTICAMENTE ACTIVOS

Sergio Calixto Carrera<sup>1</sup>, Jose Luis Garcia Cordero<sup>2</sup>, Diana Cedillo alcantar<sup>2</sup>, Izabela Naydenova<sup>3</sup> y Guillermo Garnica<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Centro de Investigaciones en Optica a.c., Loma del bosque 115, Leon, Gto.c.p. 37150, Mexico,

<sup>2</sup>Centro de Investigacion y de Estudios avnzados del Instituto Politecnico Nacional, Unidad Monterrey, Via del Conocimiento 201, Parque PIIT, Apodaca Nuevo Leon, c.p.66628, Mexico,

<sup>3</sup>Centre for Industrial and Engineering Optics, School of physics & Clinical & Optometric Sciences, College of Sciences and Health, TU Dublin, Kevin Street, D08 NF82, Ireland.  
scalixto@cio.mx

### RESUMEN

Normalmente las rejillas de difraccion están fabricadas con materiales que no cambian con el tiempo. Se escogio el material silicona para fabricar rejillas con una estructura en forma de serpentin donde los microcanales tenían 200  $\mu\text{m}$  de ancho, 500  $\mu\text{m}$  de profundidad y distancia entre canales de 200  $\mu\text{m}$ . El perfil de los microcanales fue rectangular. En estos canales fluían líquidos ópticamente activos por lo que las características de la rejilla podían ser cambiadas al utilizar líquidos diferentes. A estas rejillas se les llama optofluidicas. Por estos canales se hizo pasar una mezcla liquida compuesta de penicilina y agua que presentaba actividad óptica. La rotación especifica del liquido fue estudiada teniendo como parámetros su concentración y la longitud de onda de varios haces de luz. Por otro lado para conocer las propiedades ópticas de los ordenes difractados por la rejilla optofluidica se ilumino secuencialmente con 3 laseres que tenían polarización lineal emitiendo a 632.8 nm, 543 nm y 468 nm. Despues del laser se coloco una placa  $\lambda/2$  para rotar el plano de polarización a  $0^\circ$  o  $45^\circ$ . La polarización del primer orden difractado fue estudiada al colocar un polarizador lineal (analizador) en su trayectoria. Un detector recibió la luz que atravesaba el analizador. Asi se obtuvieron graficas polares donde el angulo del analizador era la coordenada polar y la coordenada radial era la intensidad del primer orden difractado. Se encontró que cuando la polarización del haz de entrada era lineal los ordenes difractados también presentaban una polarización lineal no importando la longitud de onda de la luz. Aunado a esto se mando luz polarizada circularmente y se noto que el primer orden difractado poseía una polarización circular. Se hizo un estudio de la eficiencia de difracción de la rejilla con luz polarizada lineal, elíptica y circular.

### INTRODUCCION

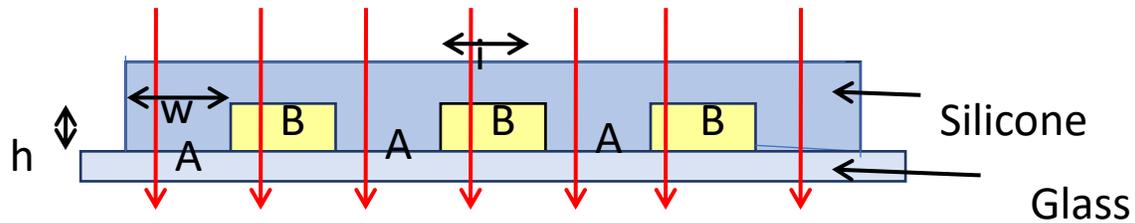
En el pasado se han hecho estudios de rejillas de polarización que han sido fabricadas al registrar el patrón de interferencia de dos haces coherentes con polarizaciones ortogonales y lineales. Las rejillas introducen un cambio periódico del estado de polarización sobre un frente de onda incidente. El registro muestra una modulación espacial birrefringente que se repite periódicamente. Algunos autores han desarrollado teorías y experimentos para explicar el fenómeno<sup>1</sup>.

En los últimos 15 años una nueva disciplina ha sido desarrollada y se le llama optofluidos que comprende elementos ópticos e instrumentación. Los elementos optofluidicos son huecos y pueden ser sintonizados al insertar líquidos con diferente densidad, índice de refracción y color, por ejemplo. Este proceso nos permite cambiar sus características ópticas y aplicarlos a instrumentos como refractómetros, medidores de presión, scanners y mas. Entre los elementos optofluidicos se ha mostrado que canales microfluidicos, con la forma de un serpentin, se comportan como rejillas de difracción. Asi, sus características se pueden cambiar al hacer fluir por sus canales líquidos diferentes<sup>2</sup>.

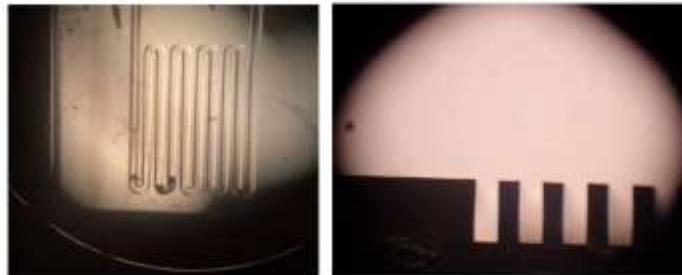
Aquí proponemos las rejillas optofluidicas con líquidos ópticamente activos para formar rejillas de polarización.

### MATERIAL DE FABRICACION DE LAS REJILLAS

Las rejillas que proponemos están compuestas por dos conjuntos de rejillas, Figura 1. El primer conjunto contiene unas rendijas de relieve, conjunto A, que tienen un ancho  $w$  (200 micras) y altura  $h$  (500 micras). Entre las rendijas del conjunto A están otras rendijas de ancho  $i$  (200 micras). Este conjunto de rendijas lleva el líquido birrefringente. Cuando se envía luz a la rejilla compuesta aparecen los órdenes difractados. El material para fabricar la rejilla fue  $\text{silicona}^3$  que es transparente, hidrofóbico presenta poca rugosidad, índice de refracción de 1.41 y otras buenas características.



a)



b)

Fig. 1. a) Rejilla compuesta que muestra dos conjuntos de rejillas, el A y el B. b) fotografías de una de las rejillas fabricadas.

### EL LIQUIDO BIRREFRINGENTE

Se escogió a la penicilina como líquido birrefringente. Su Rotación Específica es  $[\alpha]_{\lambda}^T = \alpha / (l \times \rho)$  donde  $\alpha$  es la rotación en grados,  $l$  es la trayectoria óptica,  $\rho$  la densidad,  $T$  la temperatura (20 °C),  $\lambda$  la longitud de onda. El valor para penicilina es  $[\alpha]_{\lambda}^T = +290^\circ$  a 20°C para la línea D del sodio. Es común que la rotación óptica decaiga cuando la longitud de onda aumenta. Esto se probó al hacer un experimento donde se usaron tres láseres con longitud de onda 632.8 nm, 543 nm y 468 nm. Los resultados se muestran en la Figura 2a. También es común que mientras el camino óptico aumente el ángulo de rotación sea mayor, Figura 2b.

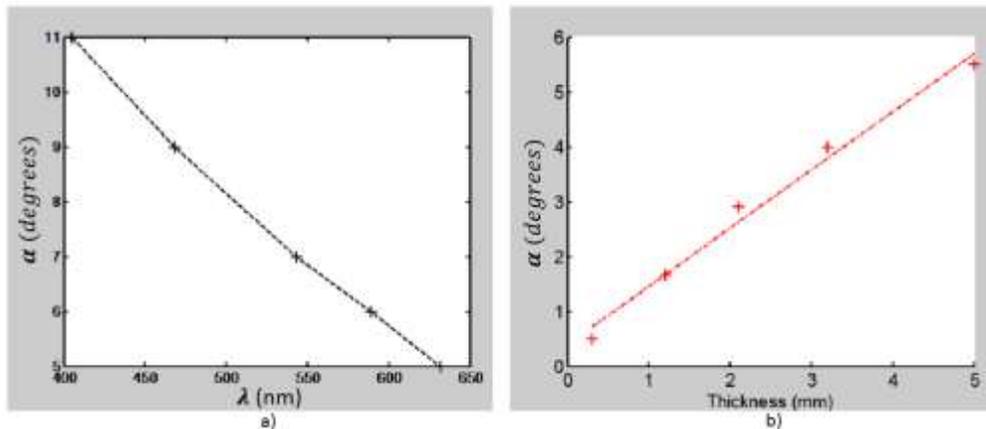


Fig. 2. Comportamiento experimental de la rotación óptica en función a) de la longitud de onda y b) del camino óptico.

### POLARIZACIONES DE LOS ORDENES DIFRACTADOS.

Para estudiar los órdenes difractados se usó la configuración mostrada en la Figura 3. Se inyectó en los canales primeramente agua, líquido isotrópico, y luego el líquido anisotrópico que es una mezcla de penicilina 1.2 g y agua 1.5 ml. La placa  $\lambda/2$  se colocó en dos posiciones. Primero  $0^\circ$  y luego  $45^\circ$ . El ángulo del analizador se varió de  $0^\circ$  a  $360^\circ$ . Los resultados para cuando se tenía agua se muestran en la Figura 4. La Figura 5 muestra el comportamiento del primer orden cuando se inyectó la mezcla penicilina/agua.

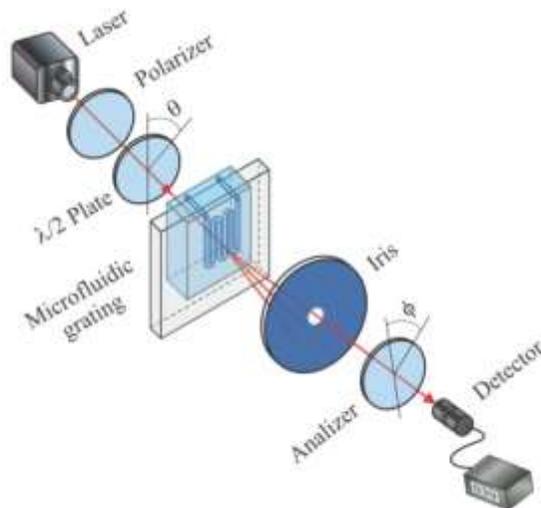


Figura 3. Configuración óptica usada para estudiar el comportamiento respecto a la polarización del primer orden difractado.

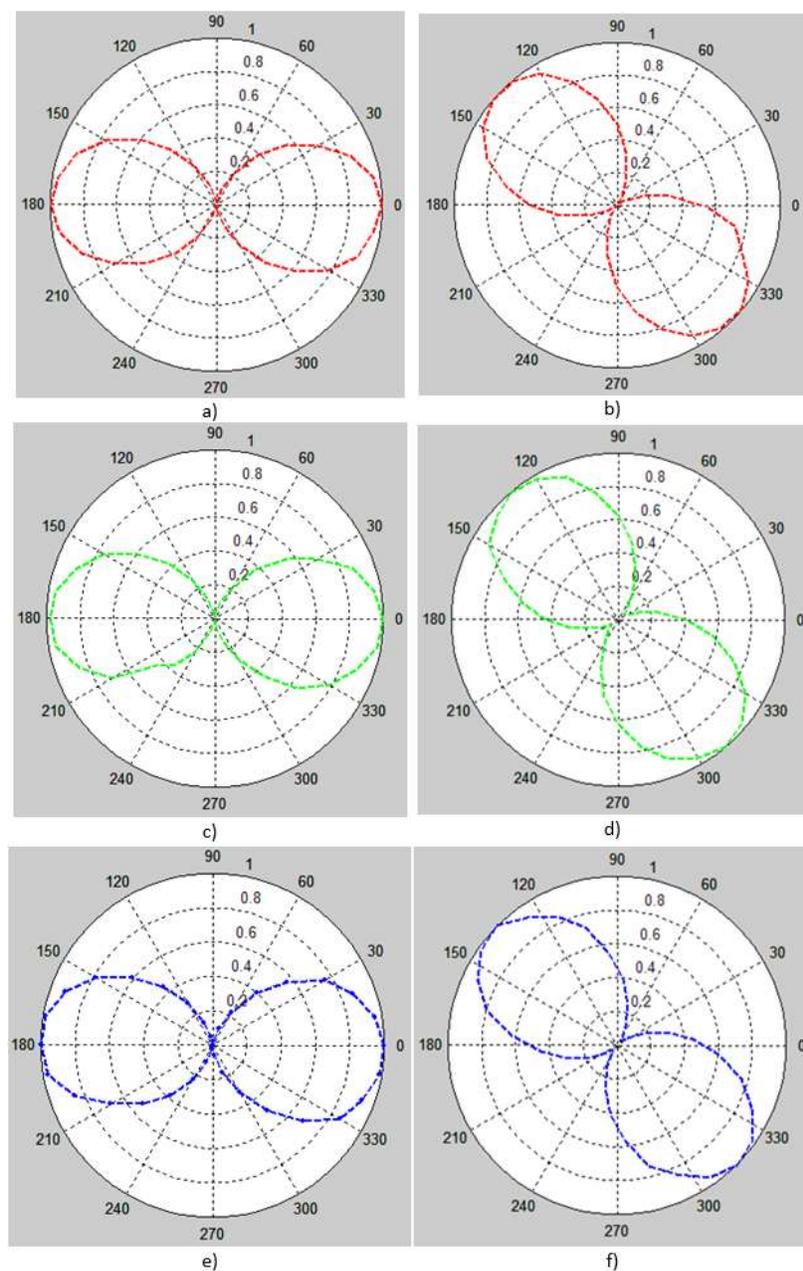


Figura 4. Graficas polares que muestran el comportamiento de la intensidad y polarización del primer orden difractado cuando se inyecta agua en los canales de la rejilla optofluidica. Para las graficas en el primer renglon se uso luz de 632.8 nm en el segundo de 543 nm y en el tercero de 468 nm.

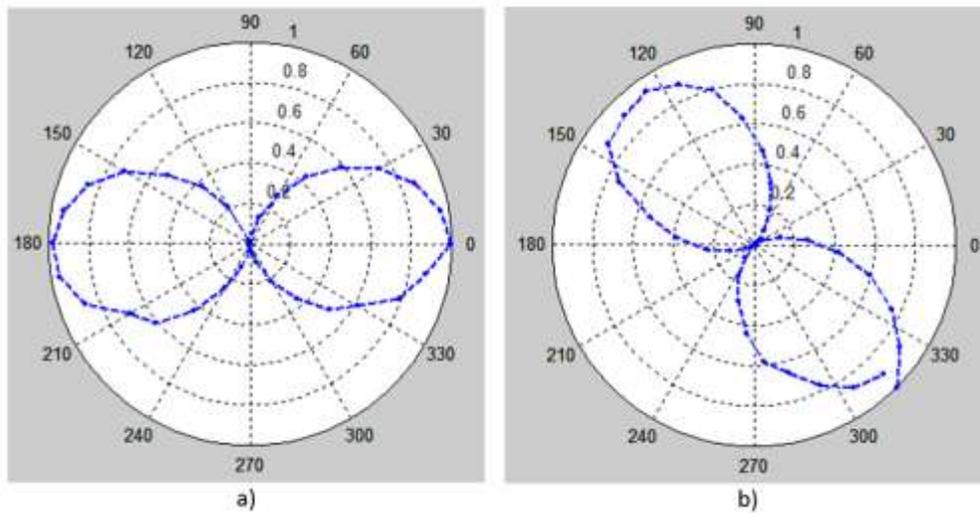


Figura 5. Graficas polares que muestran el comportamiento de la intensidad del primer orden cuando en los canales de la rejilla se inyecta la mezcla penicilina/ agua.

Como podemos deducir de las graficas los ordenes difractados muestran polarización lineal aunque se cambie el ángulo de polarización lineal de la luz de entrada ( $0^\circ$  o  $45^\circ$ ), la longitud de onda de la luz o la substancia dentro de los canales de la rejilla. También se estudio el estado de polarización cuando se envío luz polarizada circularmente con longitud de onda de 632.8 nm. Los resultados se ven en el Figura 6. Deducimos que también la polarización del primer orden difractado es polarizada circularmente.

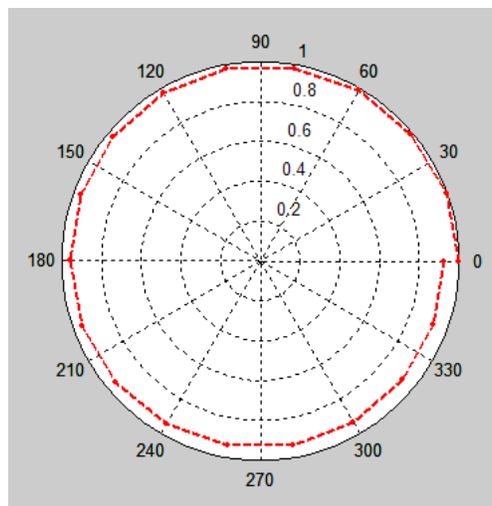


Figura 6. Comportamiento de la intensidad del primer orden difractado cuando se envío luz polarizada circularmente.

Finalmente estudiamos la eficiencia de difracción cuando la luz incidente cambiaba de lineal a elíptica y circular. Los resultados se ven en la Figura 7.

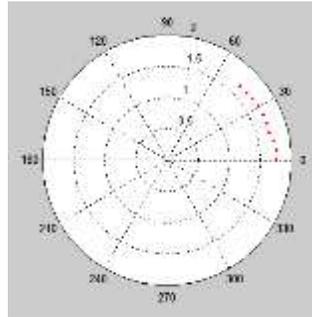


Figura 7. Comportamiento de la intensidad del primer orden difractado, o eficiencia de difracción, cuando la luz de entrada cambiaba de lineal a elíptica y finalmente circular.

### CONCLUSIONES

Hemos mostrado las características con respecto a la polarización de la luz del primer orden difractado cuando se tiene una rejilla optofluidica con canales de unas 200 micras de ancho y 500 micras de profundidad. La luz de entrada fue lineal, circularmente polarizada, elíptica, y de varias longitudes de onda.

### BIBLIOGRAFIA

1. I. Naydenova, L. Nikolova, T. Todorov, N.C.R. Holme, P.S. Ramanujam, S. Hvilsted, "Diffraction from polarization gratings with Surface relief inside chain azobenzene polyesters," J. of Opt. Soc. Am. B Vol. 15 (4), 1998, 1257-1265.
2. D. Psaltis, S.R. Quake and C. Yang, "Developing optofluidic technology through the fusion of microfluidics and optics," Nature Vol. 442, 2006, 381-386.
3. Dow corning

## EFFECTO DEL MEDIO SOBRE LA DISTRIBUCIÓN DE TAMAÑO DE NANOPARTÍCULAS COLOIDALES UTILIZANDO EL MODELO PAC.

M. Bárcenas<sup>1</sup>, F. J. Pérez-Ramírez<sup>1</sup>, M.L. Delgadillo<sup>1</sup>, A. Quirós<sup>1</sup>, V.A. Castellanos<sup>2</sup>

<sup>1</sup>División de Ingeniería Química y Bioquímica, Tecnológico de Estudios Superiores de Ecatepec,

<sup>2</sup>Tecnológico Nacional de México / Instituto Tecnológico de Tlalnepantla.

[mbarcenas@tese.edu.mx](mailto:mbarcenas@tese.edu.mx)

### RESUMEN

Las nanopartículas (NP's) se definen como una clase de material muy extensa que incluyen sustancias particulares y poseen una dimensión menor a 100nm. De acuerdo al tipo de material que contienen o del que están conformadas, poseen determinadas propiedades y características particulares que les permiten una aplicación versátil en diversas áreas de la ciencia e ingeniería. Las nanopartículas coloidales (NPC's) tienen características que dependen de la química de su superficie, estas pueden cambiar debido a la agregación y aglomeración causada por la autoasociación (característica propia de las NPC's), ya que la agregación o aglomeración conduce a un incremento en el área de la superficie para los ensamblajes, pero resulta en un decremento de la superficie de las nanopartículas individuales, así como nuevas características físicas y químicas para las distintas partículas y estructuras formadas. Por lo tanto, se han realizado importantes esfuerzos por estabilizar este tipo de sistemas y evitar y/o controlar la formación de agregados de nanopartículas. Para su aplicación las nanopartículas se pondrán en contacto e interaccionarán con diferentes materiales, sometiéndose a ambientes y procesos que tienden a cambiar las características de la superficie de la nanopartícula, en algunos casos provocando la formación de agregados y aglomerados, cambiando la distribución de tamaño de las estructuras, siendo esta última de gran relevancia, ya que la forma de dicha distribución puede afectar diversas propiedades. En este sentido, en el presente trabajo se utiliza un modelo simple de dos fluidos asociativos de valencia limitada (NPC con funcionalidad de 4 e inhibidor con un solo sitio asociativo) para estudiar el efecto del alcance de potencial sobre la distribución de tamaños de NPC's. Se utilizó simulación Monte Carlo para estudiar una amplitud de potencial en un intervalo de  $1.15 \leq \lambda \leq 1.40$  a una temperatura adimensional de 0.25 y densidad constante, utilizando una caja cubica con condiciones de frontera en las tres direcciones. Para los cálculos de tamaño de agregado se usó el algoritmo de Sevick. Se consideraron diversos alcances de potencial con el fin de emular diferentes medios y tipos de nanopartículas coloidales. Se reportan distribuciones de tamaño de nanopartículas donde se observa que a mayor alcance de potencial se favorece la aglomeración de NPC's. La formación de enlaces con 4 NPC's se favorece provocando agregados de gran tamaño (casi el doble entre el menor y mayor alcance de potencial) y la concentración de monómeros en solución disminuye. Las distribuciones presentan un cambio en el comportamiento de las curvas entre el que presenta  $\lambda = 1.15$  respecto a los demás alcances de potencial. En este caso se presenta un máximo en la curva para aglomerados conformados por dos NPC's (dímeros), concentrando la mayor frecuencia en agregados de menos de 10 NPC's. Para  $\lambda = 1.40$ , se observa un máximo que corresponde a la formación de aglomerados conformados por 5 NPC's (pentámeros), en este caso hay formación de aglomerados de más de 50 NPC's.

### INTRODUCCION

Las nanopartículas se definen como una clase de material muy extensa que incluyen sustancias particulares y tienen una dimensión menor a 100nm. De acuerdo al tipo de material que contienen o del que están conformadas, poseen determinadas propiedades y características particulares que les permiten una aplicación versátil en diversas áreas de la ciencia e ingeniería como la medicina, electrónica, biología, química, bioquímica, mecánica, física, industria alimentaria, farmacéutica, petrolera, entre otras. (Khan et al. 2017; Bárcenas y Orea et al. 2011)

Las nanopartículas coloidales tienen características que dependen de la química de su superficie, esas características pueden alterarse debido a la agregación y aglomeración causada por la

autoasociación (característica propia de las nanopartículas). Esta particularidad se presenta durante el proceso de síntesis y/o purificación y aplicación de las nanopartículas coloidales, constituyendo en algunos casos una desventaja y en otros una característica utilizada para formar ciertas estructuras. Es decir, durante su aplicación en el área de medicina, por ejemplo, ya sea como agentes de diagnóstico o medicamentos, la agregación y aglomeración pueden cambiar la toxicología de las nanopartículas coloidales, convirtiéndose en un peligro para la salud. Por lo tanto, la necesidad de controlar el proceso de agregación y aglomeración en cualquiera de las etapas es de suma importancia.

Se han realizado esfuerzos en entender el fenómeno de agregación y aglomeración de nanopartículas coloidales desde dos enfoques: utilizando técnicas experimentales y técnicas de simulación y modelación. En ambos casos se ha generado información puntual sobre ciertas nanopartículas coloidales, sin embargo, no ha podido generalizarse el cambio en sus propiedades. En este sentido, se han propuesto diversos modelos teóricos que tratan de explicar la fenomenología y que además funcionen como herramientas que predican y representen la aglomeración de nanopartículas coloidales como proteínas, ADN, partículas Janus, nanopartículas de oro, etc. (Khan et al 2017)

Se han propuesto modelos para describir el proceso reversible de agregación y aglomeración de nanopartículas coloidales, que permitan comprender el complejo mecanismo y la representación de comportamientos experimentales. Estos modelos complementados con diversas técnicas de simulación han sido utilizados para describir la fenomenología descrita. Las técnicas más usadas son simulación Monte Carlo (MC) y Dinámica molecular (DM), y han demostrado reportar experimentos computacionales robustos y confiables.

En este sentido, en el presente trabajo se estudia el proceso de aglomeración de nanopartículas coloidales utilizando inhibidores como medio control, a través del cálculo de distribuciones de tamaño, mediante el modelo PAC (por sus siglas en inglés: particle agglomeration control) con la técnica de Monte Carlo, con respecto al alcance de potencial. Se estudia el alcance de potencial en un intervalo de  $1.15 \leq \lambda \leq 1.40$  con el objetivo de representar diversos medios donde se encuentran inmersas las nanopartículas coloidales.

### MODELO PAC.

El modelo consiste en dos especies, una nanopartícula coloidal con valencia limitada igual a cuatro y un inhibidor; las nanopartículas coloidales interactúan a través de un potencial de pozo cuadrado con límite en valencias de acuerdo a la ecuación 1.

La simplicidad matemática y flexibilidad en los cálculos se ve mejorada en el potencial de pozo cuadrado. Al ser más flexible, cuenta con tres parámetros ajustables: diámetro ( $\sigma$ ), altura del pozo ( $\epsilon$ , *minimo de energía potencial*) y amplitud (anchura) del pozo ( $\lambda$ ). En la figura 1 se muestra el modelo de potencial de pozo cuadrado.

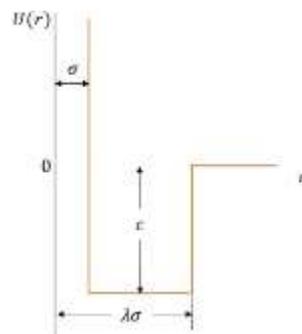


Figura 1. Potencial de Pozo Cuadrado

El modelo de potencial de pozo cuadrado está definido por la siguiente expresión.

$$u(r_{ij}) = \left\{ \begin{array}{ll} \infty & \text{si } r_{ij} \leq \sigma_{NC} \\ -\varepsilon_{NC} & \text{si } \sigma_{NC} \leq r_{ij} \leq \lambda\sigma_{NC} \\ y (f_{NC}(k) + f_I(k)) < F; & \\ & k = i, j \\ 0 & \text{si } r_{ij} > \lambda\sigma_{NC} \end{array} \right\} \quad (1)$$

Donde  $r_{ij}$  es la distancia de centro a centro entre la partícula  $i$  y  $j$ ,  $\varepsilon_{NC}$  y  $\lambda$  son la profundidad y anchura del pozo, respectivamente,  $f_{NC}(k)$  son los números de conexiones de la nanopartícula coloidal  $k$  con otras NPC's e  $I$  respectivamente. Los inhibidores y las nanopartículas coloidales interactúan a través de un modelo de potencial de Smith - Nezbeda. La interacción (atracción asociativa) entre el centro de las NPC's y el sitio asociativo de las partículas  $I$  esta dado por la ecuación 2.

$$u_{NC-1}(z, w) = \left\{ \begin{array}{ll} \varepsilon_I & \text{si } 0.5\sigma_{NC} \leq z \leq w \\ 0 & \text{si } z > w \end{array} \right\} \quad (2)$$

Donde  $w$  denota la orientación de partículas  $I$  (definido por la localización del sitio asociativo en la superficie de la partícula) y  $z$  es la distancia entre el centro de la partícula NPC y el sitio de la partícula  $I$  dada de centro-centro. (Bárceñas y Orea et al. 2011)

#### DETALLES DE SIMULACION

La simulación Monte Carlo del modelo PAC fue hecha con un ensamble canónico en una caja cubica de dimensiones  $L_x = L_y = L_z = 22.86$ . Fueron usadas condiciones periódicas de frontera en las tres direcciones. Una simulación comienza con una colección de partículas  $N_{NPC}$  y  $N_I$  dispersas aleatoriamente en la caja cubica, la superposición no está permitida. En la figura 2 se muestra una imagen instantánea de la caja de simulación de una configuración inicial, donde se colocaron las partículas aleatoriamente.

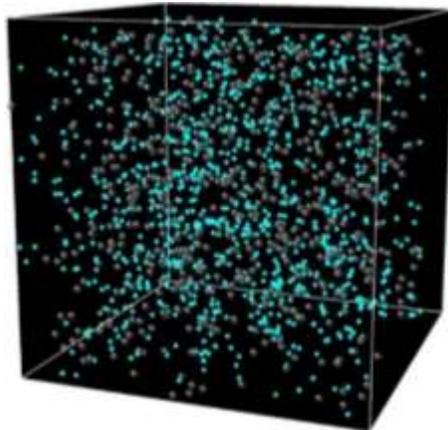


Figura 2: Imagen de una caja de simulación con una configuración inicial (las esferas color gris representan a las NPC's y las esferas color azul corresponden a las partículas de inhibidor).

El modelo PAC acoplado al método MC hace movimientos de ambas especies y rotaciones de partículas  $I$ , los cuales son aceptados o rechazados de acuerdo con el algoritmo tradicional de metrópolis. El desplazamiento máximo permitido para los aglomerados es representado por  $\Delta =$

$L/3$ , si una partícula NPC tiene conexiones con uno o más inhibidores, este se mueve junto con ellas. Para acelerar el equilibrio, se lleva a cabo movimiento traslacional con probabilidad de 10%. Durante la simulación, una NPC puede abandonar un grupo y pasar a otro o permanecer como un monómero, las partículas I pueden abandonar y pasar a otra partícula NPC, siendo un proceso reversible. Para algunas nanopartículas coloidales el proceso de aglomeración es reversible y esto ocurre en lugar de agregación irreversible.

La configuración inicial se equilibra con  $5 \times 10^5$  pasos de simulación MC y los resultados reportados son el producto de  $3 \times 10^7$  pasos de simulación. Todos los resultados son promediados sobre al menos dos corridas de simulación independientes del mismo sistema. El estudio fue desarrollado para varios sistemas con valores de  $\lambda$  en un intervalo de  $1.15 \leq \lambda \leq 1.40$ . Todos los sistemas contienen  $N_{NPC} = 600$  y  $N_I = 900$  con una densidad  $\rho_{NPC} = 0.05$  y una concentración de inhibidor de  $K = 1.5$ . Los resultados son reportados en unidades adimensionales.

## RESULTADOS

En la primera parte, se presenta un análisis de la distribución de tamaño de nanopartículas coloidales (NFD), que es una propiedad primordial para el desarrollo y aplicación de las NPC's (Dahman, 2017; Zhu y Mason, 2014). La figura 3 muestra las NFD con respecto al alcance de potencial. Se observa un cambio en la forma de las curvas entre  $\lambda = 1.15$  y el resto de los valores del alcance de potencial. En este caso se aprecia un máximo en la curva para aglomerados de dos nanopartículas coloidales (dímeros). Para este alcance de potencial existe la formación de pequeños aglomerados, la mayor frecuencia de formación de aglomerados son formaciones con menos de 10 NPC's. Se puede apreciar que el comportamiento de las curvas NDF de los diferentes alcances de potencial es similar en todo el intervalo de valores estudiados. Se observa una disminución en la formación de aglomerados con menos de 5 NPC's conforme incrementa la amplitud del potencial de interacción.

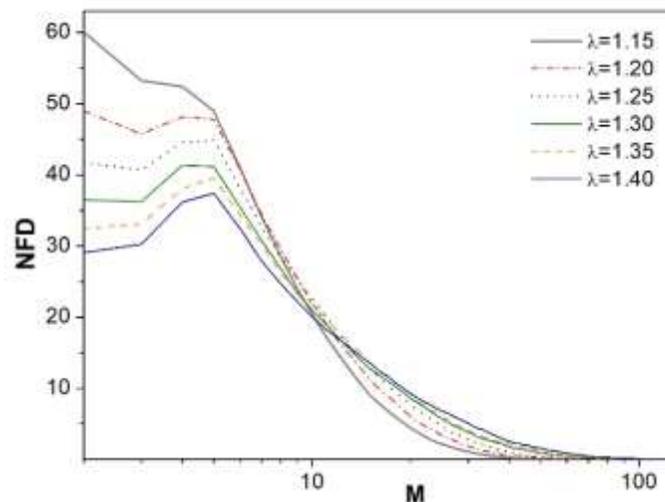


Figura 3: distribución de tamaño de aglomerados, NFD.  $T^* = 0.25$ ,  $K = 1.5$  y  $\rho_{NPC} = 0.05$ .

En la figura 4 se presenta una imagen de las cajas de simulación con alcance de potencial de  $\lambda = 1.2$  y  $\lambda = 1.4$  respectivamente, donde se puede observar que para el mayor alcance de potencial ( $\lambda = 1.4$ ) se presenta una disminución en la formación de dímeros y un aumento de formación de aglomerados con un gran tamaño. En este caso hay aglomerados con más de 50 nanopartículas coloidales y se aprecian unos cuantos monómeros, dímeros y trímeros, acorde con lo mostrado por

las NFD's (figura 3). En cambio, para el alcance de potencial menor ( $\lambda = 1.2$ ) se puede observar que las partículas están más dispersas dentro de la caja de simulación, formando aglomerados más pequeños y teniendo menos contacto entre partículas.

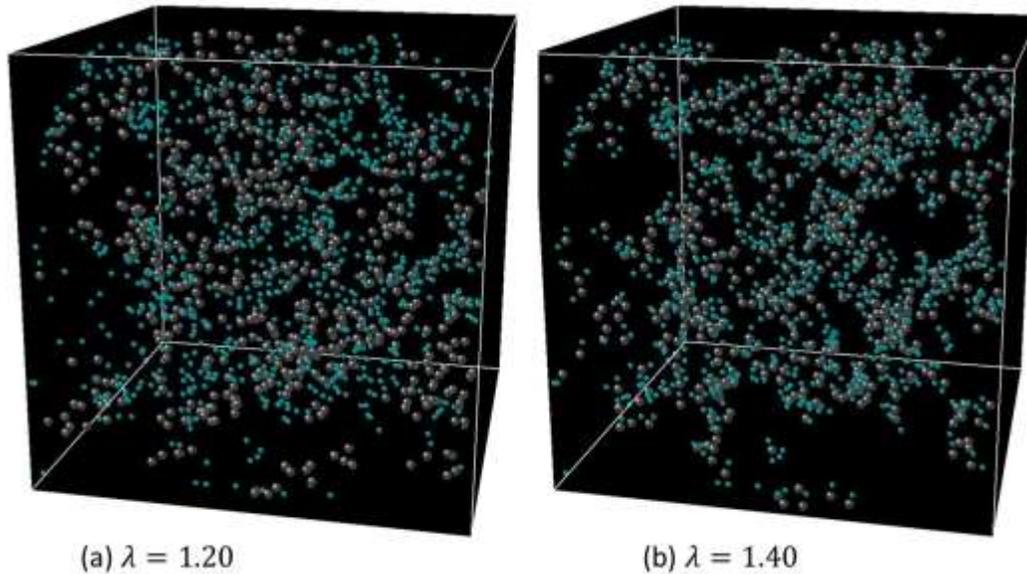


Figura 4: instantánea de una simulación MC para un sistema NPC con diferentes alcances de potencial

Finalmente, en la figura 5 se presenta la proporción de nanopartículas coloidales con diferente número de enlaces entre las NPC's como función de la amplitud del potencial. Las curvas confirman el comportamiento presentado en las curvas NFD. Para  $\lambda = 1.15$  muchas nanopartículas se mantienen como monómeros y hay una gran formación de dímeros. La concentración de formación de dos enlaces es casi constante para todo el intervalo de  $\lambda$ , en cambio la concentración de formación de cuatro enlaces incrementa con respecto al aumento de  $\lambda$ .

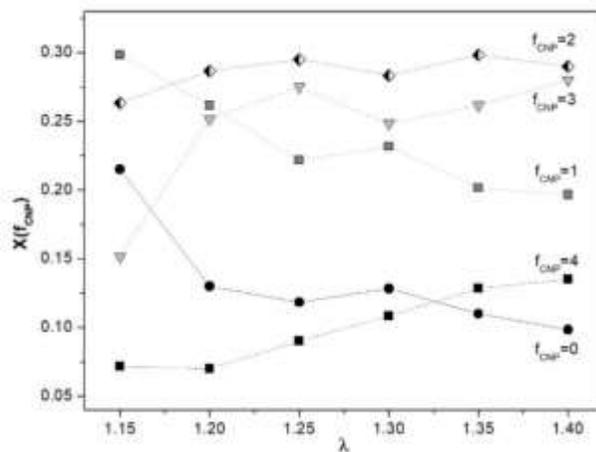


Figura 5: Proporción de nanopartículas coloidales con diferente número de enlaces NPC.

## CONCLUSION

se hizo un estudio de mecanismo de aglomeración de nanopartículas coloidales usando un modelo de fluido simple de dos componentes asociativos con funcionalidad igual a cuatro, en presencia de inhibidores como partículas de control, para un intervalo de alcance de potencial de 1.15 a 1.40 a temperatura y densidad constante. Se encontró que el aumento en el alcance de potencial provoca la aglomeración en las NPC, mostrando que la formación de enlaces con otras cuatro NPCs aumenta. Observamos un cambio en el comportamiento del mecanismo de aglomeración entre el alcance de potencial 1.15 y los otros valores del parámetro  $\lambda$ . Los comportamientos reportados son interesantes por su aplicación en el desarrollo y descripción de nanomateriales, donde el control de la aglomeración mediante moléculas inhibitoras define sus propiedades.

## BIBLIOGRAFÍA

1. Barcenas, M.; Orea, P. (2011). Molar-mass distributions of asphaltenes in the presence of inhibitors: Experimental and computer calculations. *Energy and Fuels*. Vol. 25, 2100-2108.
2. Behzadi, S.; Serpooshan, V.; Tao, W.; Hamaly, M.A.; Alkawareek, M.Y.; Dreaden, E.C.; Brown, D.; Alkilany, A.M.; Farpkhzad, O.C; Mahmoud, M.(2017). Cellular uptake of nanoparticles: journey inside the cell. *Chem. Soc. Rev.* Vol. 46, 4218-4244.
3. Khan, I.; Saeed, K.; Khan, I. (2017). Nanoparticles: properties, application and toxicities. *Arabian J. Chem.* Vol. 12 (7), 908-931.
4. X. Zhu and T. Mason, J. (2014). *Coll. Int. Sci.* 435, 67–74.5
5. Y. Dahman, "Chapter 5: Nanoparticles by Vaser Dahman, Hoda Javaheri, Jiafu Chen, and Basel al-Chikh Sulaiman". (2017). Elsevier pp. 93–119.

## CONSTRUCCIÓN DE MODELOS GEOTÉCNICOS MEDIANTE LA APLICACIÓN DE MÉTODOS GEOFÍSICOS: ANÁLISIS DE ESTABILIDAD DE LADERAS.

José de Jesús Torres García<sup>1</sup>, Norma Liliana Cruz Ortiz<sup>1</sup>, Norma Claudia Calderón Rosas<sup>1</sup> y David Calva Hernández<sup>2</sup>

<sup>1</sup>CIATEC, A.C., <sup>2</sup>Consultor independiente  
[igarcia@ciatec.mx](mailto:igarcia@ciatec.mx)

### RESUMEN

Una labor permanente de las instituciones gubernamentales reside en la prevención de riesgos, que puedan causar algún daño a la población e infraestructura. Todo análisis parte de conocer el detalle, y para el caso del estudio de la estabilidad de laderas naturales, conocer el medio ambiente del sitio incluye temas como la topografía, antecedentes geológicos, tipos de suelo presentes, régimen de la hidrología superficial y subterránea, infraestructura existente, etc.; con el análisis en conjunto de esta información se realiza un planteamiento inicial, al cual es necesario agregar las propiedades mecánicas de los materiales que subyacen y en ciertos escenarios, es necesario conocer la fisicoquímica de los materiales. Todo ello permite al investigador entender los mecanismos de acción existentes y las fuerzas externas que comprometen la estabilidad de la ladera; esta concepción del medio se define como un modelo geotécnico.

Para conocer las propiedades de los materiales existentes en el subsuelo se preferencia la aplicación de métodos geotécnicos directos (pozos a cielo abierto, perforaciones mecánicas, etc.), los cuales requieren una inversión de tiempo y recursos para la ejecución de las labores de campo y laboratorio. Como respuesta práctica a los estudios de laderas, se han aplicado exitosamente métodos geofísicos en campo, las cuales permiten la toma de datos en tiempo real y/o mediante un post proceso rápido; que permite inferir las variables de estudio para las metodologías de análisis.

La aplicación de estos métodos en campo cuenta con la ventaja de no ser invasivos o destructivos, por lo que la infraestructura existente no suele ser un impedimento, además de no requerir el traslado de equipos pesados o voluminosos. La identificación de los sitios de interés durante los recorridos de campo permite un estudio más asertivo, ya que la toma de datos puede realizarse en los lugares específicos de interés e incluso, sobre accidentes topográficos.

El caso de estudio corresponde a laderas naturales, las cuales han sido ocupadas por asentamientos humanos irregulares, en las que el tipo de edificaciones existentes se caracteriza por ser de autoconstrucción. Se aplicaron técnicas geofísicas en el campo de la resistividad eléctrica y la sismicidad, las cuales permitieron la rápida obtención de los parámetros geomecánicos del sitio y mediante los cuales se define de forma precisa el modelo geotécnico que fungirá como base para los posteriores análisis de riesgos. Los resultados obtenidos han definido de forma precisa los parámetros de análisis de estabilidad, emitiendo un modelo geotécnico altamente confiable, del cual se pueden emitir las recomendaciones pertinentes para las acciones que las autoridades deberán de seguir en favor de la seguridad de los asentamientos humanos.

### INTRODUCCIÓN

La inestabilidad de laderas (también conocida como proceso de remoción de masa), se puede definir como la pérdida de la capacidad del terreno natural para auto sustentarse, lo que deriva en reacomodos y colapsos. Se presenta principalmente en zonas montañosas donde la superficie del terreno adquiere diversos grados de inclinación, sin embargo; las zonas urbanas son susceptibles de padecer estos eventos en función del grado de ocupación e intemperismo de las laderas naturales. Por definición técnica, los principales tipos de inestabilidad de laderas son: caídos, deslizamientos y flujos. El grado de estabilidad de una ladera depende de diversas variables (factores condicionantes) tales como la geología, la geomorfología, el grado de intemperismo, , entre otros. Los sismos, las lluvias, la actividad volcánica, así como la deforestación y las actividades humanas son considerados como factores detonantes o desencadenantes de los deslizamientos (factores externos).

De entre los fenómenos geológicos, los deslizamientos de laderas son los más frecuentes en el país y su tasa de mayor ocurrencia es durante la temporada de lluvias (principal detonante). Aunque también pueden ocurrir durante sismos intensos, erupciones volcánicas y por actividades humanas como cortes, colocación de sobrecargas (viviendas, edificios, infraestructura de transporte, etc.), escurrimientos, filtraciones de agua, excavaciones, etc. Debido a que el agua juega el papel más importante en la inestabilidad de una ladera, las medidas de prevención y mitigación deben ser orientadas a reducir al mínimo su ingreso al interior de las laderas naturales o taludes modificados por la adaptación de la infraestructura civil y de transporte.

En un acercamiento general al área de estudio, el municipio de León cuenta desde el 2006 con su Atlas Municipal de Riesgos (AMR), en su última versión del 2018 se actualizaron los fenómenos geológicos e hidrometeorológicos (IMPLAN, 2018), donde se destaca el componente de inestabilidad de laderas, el cual identifica en diversos mapas los sitios que se han catalogado con un nivel de peligro bajo, medio, alto a muy alto (Figura 1). De acuerdo con reportes de Protección Civil Municipal (IMPLAN, 2010) el deslizamiento de laderas es un fenómeno recurrente que se presenta todos los años y se amplifica durante la temporada de lluvias.

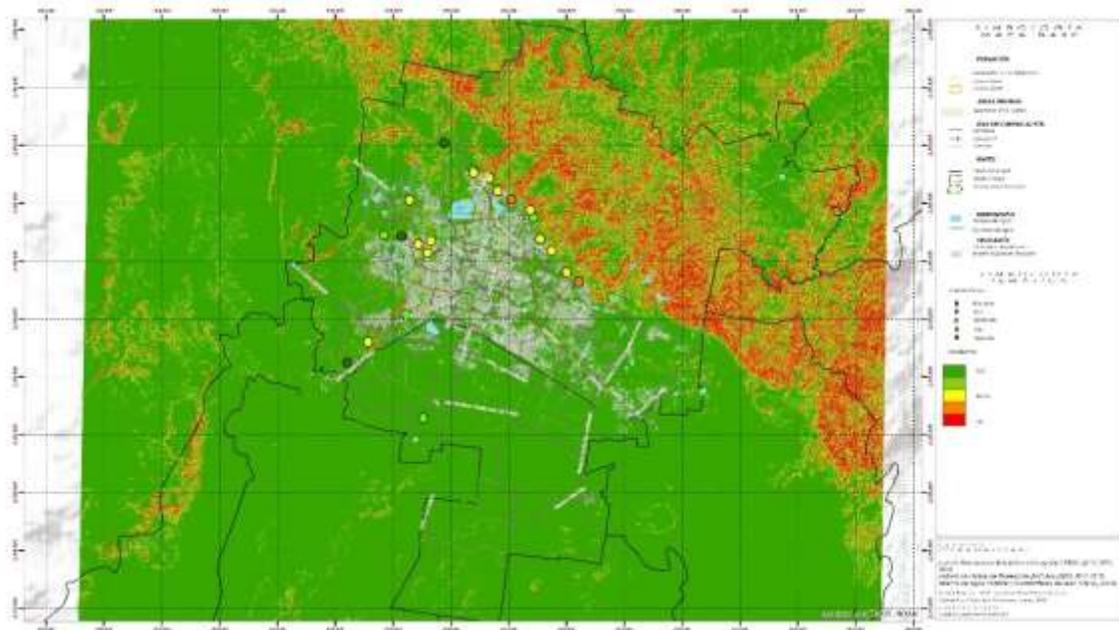


Figura 1. Mapa de peligros por deslizamiento de laderas en el municipio de León Gto.

En congruencia con el AMR, el CENAPRED a través del Atlas Nacional de Riesgos ha generado un Mapa Nacional de Susceptibilidad por Inestabilidad de Laderas (CENAPRED, 2015), el cual cuenta con una resolución 15 m, considerando zonas libres de inestabilidad las regiones con pendientes entre  $0^{\circ}$  y  $6^{\circ}$ . Con base a lo anterior, el municipio de León, Gto. (Figura 2) presenta en la parte norte varias zonas con susceptibilidad alta y muy alta; siendo coincidente el foco de atención hacia las laderas que en el lapso de las últimas dos décadas se han visto invadidas por la mancha urbana, ya se de forma adecuada o irregular.

Los modelos geotécnicos permiten comprender mejor las condiciones reinantes en un determinado lugar, además de identificar los principales problemas geotécnicos y hacer más realista la estimación de propiedades del suelo (Tomas y Delgado, 2004). El planteamiento del presente trabajo se aboca a la construcción de modelos geotécnicos, los cuales se conforman como la base para realizar análisis de estabilidad de taludes por métodos numéricos, los cuales emiten el factor de seguridad para una ladera específica. Se debe realizar énfasis en que el éxito de cualquier análisis cuantitativo o cualitativo del comportamiento de la masa del suelo ante cargas naturales o

inferidas por el ser humano; radica en lograr la mejor modelación de la estratificación del subsuelo, las condiciones de esfuerzos existentes, las componentes de riesgo inferido en el medio natural (grietas, nivel piezométrico, escurrimientos, etc.), así como una adecuada interpretación de las propiedades geomecánicas de cada estrato, así como de la identificación de las susceptibilidades (suelos blandos, expansivos, colapsables, etc.).

Las particularidades del caso de estudio radican en que la zona de estudio se encuentra ocupada por asentamientos humanos no regularizados, en donde las actuaciones de las actividades gubernamentales pueden incidir de forma positiva o negativa sobre los factores sociales de la población. De esta forma, no es posible construir los modelos geotécnicos con información directa (toma de muestras de suelo y análisis de campo o laboratorio tradicionales); por lo que una opción complementaria es la utilización de métodos indirectos de aplicación no invasiva y cuya operación en campo requiere una temporalidad menor. En este caso, se refiere a los métodos geofísicos, ampliamente estudiados en la ingeniería geotécnica para las aplicaciones civiles.

En términos de riesgo a la población y a la infraestructura en general, los asentamientos humanos irregulares suelen ser causados por el déficit de la oferta de predios urbanizados o viviendas disponibles en la figura de arrendamiento o venta; empero, la historia también marca que una fracción importante de este tipo de asentamientos se genera por invasión de predios particulares o incluso áreas naturales protegidas relativamente lejanas a la zona urbana. Cualquiera que sea su condición de inicio, al no poder regularizar en un lapso importante los predios; la introducción de servicios básicos queda en entredicho por un vacío legal entre los reglamentos de las instituciones gubernamentales y los requerimientos de la población que habita estas zonas. Bajo un aspecto de seguridad de infraestructura, la construcción sobre laderas no urbanizadas potencializa que no se lleve a cabo un adecuado diseño o construcción de las viviendas (muchas de ellas provenientes de la autoconstrucción), aumentando la vulnerabilidad física ante los fenómenos naturales.



Figura 2. Mapa Nacional de Susceptibilidad por Inestabilidad de Laderas (municipio de León, Gto).

La prospección geofísica ha ganado un importante lugar para resolver diversos problemas asociados a definir las condiciones físicas y mecánicas de las estructuras geológicas del subsuelo; monitorear plumas de contaminación, evaluar propiedades mecánicas de los materiales, ubicar cavidades o contactos verticales que puedan poner en peligro una obra civil, asegurar las inversiones económicas; reconocer zonas de rellenos, entre otros (Manilla, 2003). Bajo estos argumentos, se realiza la selección de los métodos geofísicos más adecuados para la aplicación en campo (laderas en el caso de interés), y cuyos resultados ofrezcan valores tangibles mediante los cuales se pueda inferir las propiedades mecánicas de los distintos estratos que subyacen a la superficie.

Es mediante estas acciones que se define la propuesta de construcción de modelos geotécnicos que permitan optimizar el tiempo de análisis de la estabilidad de laderas naturales, permitiendo conocer los factores de seguridad existentes; que a la postre permitan ampliar el rango de acciones y decisiones más asertivas que las autoridades gubernamentales y la población en general puedan atender en una labor preventiva que mitigue la vulnerabilidad de la población y la infraestructura existente o la que se proyecte ejecutar en el corto o mediano plazo.

### METODOLOGÍA

En términos prácticos no existe una metodología básica o estandarizada para la construcción de modelos geotécnicos, ya que esta depende de la información histórica y/o disponible de los sitios en que se realizarán los análisis y de los muestreos y análisis que se realicen en sobre las laderas naturales; sin embargo; un factor determinante corresponde al juicio del especialista a cargo de la investigación, los criterios que se deberán cumplir y del objetivo de la prospección geotécnica. Indistintamente, se requieren llevar a cabo dos pasos trascendentales en la recopilación de información que permita la construcción de los modelos geotécnicos: la caracterización del medio físico aflorante y la caracterización geotécnica (Figura 3), estrictamente en este orden cronológico; ya que la información de un ente alimenta el siguiente.



Figura 3. Proceso básico de la construcción de modelos geotécnicos.

#### a) Caracterización del medio físico.

Permite conocer todos los factores históricos de la zona de estudio, los cuales pueden influir de forma directa o indirecta en el comportamiento geomecánico de los materiales, además de evidenciar alternativas de solución que no influyan en el paisajismo existente o incluso; que permitan estimar el comportamiento futuro de las laderas en función del grado de intemperismo y las acciones antropogénicas actuantes. Para este fin se establecen algunos requisitos mínimos de información (Tabla 1), que es necesario investigar como información básica para entender el medio.

Tabla 1. Componentes del medio físico.

Ubicación	Se define el polígono de actuación que integre las laderas que se estarán analizando (desde la base hasta la corona). Es una buena práctica basarse en sistemas de información geográfica (SIG), en los que se integren las capas de información. La utilización de fotografías satelitales del sitio permite analizar acciones del intemperismo natural o en su caso, las actuaciones de los pobladores en la superficie de las laderas (excavaciones, rellenos, etc.).
Fisiografía	Conviene revisar la información a nivel regional, pudiéndose inferir datos relativos al arrastre y depósito de sedimentos, en función de las formaciones naturales.
Topografía	Esta componente es básica para la construcción del modelo geotécnico, ya que define la configuración espacial de las laderas, además de identificar accidentes topográficos históricos. Las herramientas informáticas actuales permiten utilizar bases de datos existentes (INEGI, fotografías satelitales o imágenes LIDAR), que permiten definir los perfiles con una gran aproximación a la realidad.
Edafología	Conocer los tipos de suelo predominantes en la zona permiten entender el comportamiento geomecánico del primer estrato, además de inferir su comportamiento ante la intemperie y en particular durante la época de lluvias.
Geología	Las cartas geológicas disponibles para la región de estudio permiten entender la historia de las formaciones, visualizar contactos y fallamientos, los cuales pueden activar mecanismos de desplazamiento en las laderas. Además, se pueden inferir de primera mano valores geomecánicos estandarizados para los tipos de roca presentes en el sitio, acotando los valores que se obtengan mediante los análisis de campo o laboratorio.
Uso de suelo	Si existe información histórica en este tema, permite al analista entender el nivel de esfuerzos a que ha estado sometido el estrato superficial (pastoreo, agrícola, banco de material, etc.).
Clima	Es una componente trascendental que permite evaluar el intemperismo histórico en la región de estudio, en conjunto con las derivaciones a precipitaciones, vientos, heladas, etc., define el comportamiento del estrato superficial y su susceptibilidad a la erosión eólica e hídrica.

La información obtenida para la caracterización del medio físico se integra en el SIG y con ella se generan los mapas del sitio, con lo cual se puede establecer la agenda de recorridos de campo, selección de puntos de interés geotécnico e incluso, la definición del tipo de análisis a realizar. Para el caso del presente trabajo, el conjunto de esta información permite seleccionar los métodos geofísicos más adecuados para obtener las propiedades geomecánicas de los estratos de suelo y rocas presentes.

#### b) Caracterización geotécnica.

El levantamiento geológico-estructural de las laderas naturales representa un papel de suma importancia, ya que en conjunto con la exploración geofísica se obtiene la información base para la generación del modelo geotécnico del sitio, y así definir el nivel de seguridad de los asentamientos humanos y en su caso; permitirá estimar la vulnerabilidad de la población a estos eventos naturales. El primer paso consiste en la recopilación de datos bibliográficos del área de estudio, tanto geológicos como estructurales (además de la información ya obtenida durante la investigación del medio físico). El conocimiento de la geología regional y local del área de estudio permite dirigir la investigación y prever las condiciones que se pueden presentar en el medio natural, permitiendo ejecutar de mejor forma las actividades de campo; indistintamente de los métodos de análisis geotécnico a utilizarse. En resumen práctico, las características geológicas de mayor interés para la construcción de modelos geotécnicos radican en la litología, estructuras, estratigrafía y alteraciones físicoquímicas de la roca. Los pasos que a seguir durante la caracterización geotécnica son:

- Caminamiento o recorridos para ubicar afloramientos rocosos representativos de la zona.
- Análisis de los afloramientos, utilizando las herramientas necesarias (martillo, brújula, lupa, cinta métrica, escalímetro, etc.).

- En la bitácora se registrará la siguiente información:
  - El tipo de roca analizada (litología).
  - Estructuras como fracturas, diaclasas, foliación, asegurándose de determinar sus características, como rumbo, inclinación, abertura, relleno, entre otros.
  - Estratificación, asegurándose de definir el espesor y relación de un estrato con otro (subyacente y suprayacente), su inclinación u otra característica visible a nivel local.
  - Alteraciones fisicoquímicas visibles en las rocas, generalmente producidas por su exposición a la intemperie.

Con la información obtenida durante los caminamientos ya se cuenta con la base de identificación superficial de la litología existente (al menos en las capas superficiales), así como de la estratigrafía existente y los eventos geológicos preexistentes en el sitio y si es el caso; se podrá acotar aquellos que hayan sido generados por acciones antropogénicas. Lo anterior, permite definir los métodos geofísicos aplicables a las laderas naturales para una adecuada interpretación de la estratigrafía que muestren las mediciones geofísicas, además de permitir inferir propiedades geomecánicas aplicables para los análisis posteriores de estabilidad.

Para el caso de estudio en el municipio de León, se propone la realización del levantamiento geofísico por medio de 2 métodos sísmicos: la técnica Análisis Multicanal de Ondas Superficiales (*MASW*) y la técnica de Cocientes Espectrales Promedio de Nakamura H/V (Registro de Ruido Blanco), los cuales; en conjunto con la ingeniería geológica de la zona y la información del medio físico, complementan la información que permite la construcción de los modelos geotécnicos de las laderas naturales. Adicionalmente, se establece de forma opcional la utilización de sondeos eléctricos verticales (*SEV*) y polarización inducida (*SIP*), que permiten calibrar algunas propiedades geomecánicas, además de detectar de forma más precisa algunas estructuras geológicas o cambios de estratos en suelo y los macizos rocosos.

El *MASW* es una técnica no destructiva de fuente activa, es decir, registra ondas inducidas por una fuente impulsiva o artificial. Es comúnmente usada para evaluar la velocidad de onda de corte ( $V_s$ ), vinculado al mismo módulo de corte y las propiedades elásticas del subsuelo, y por consecuente de las características estructurales que afecten el movimiento de las ondas a través de los estratos. Este método analiza las propiedades de dispersión de los modos fundamentales de las ondas Rayleigh, las cuales se propagan a lo largo de la superficie desde el punto de impacto a los geófonos (receptores). Las aplicaciones más usuales son: determinación de morfologías y espesores de las capas del subsuelo (suelos, roca), estado de compactación y fracturación de los materiales, estimación de módulos elásticos de deformación y medición de otros parámetros para la ingeniería y geotecnia, determinación de profundidades de cimentaciones (Park et al., 1999).

Esta técnica se basa en determinar los tiempos de recorrido de las ondas desde un punto conocido (fuente sísmica) hasta una serie de receptores situados a lo largo de una línea de registro. Los registros se realizan con 12 o más geófonos de 2Hz en distancias cortas y largas desde una fuente impulsiva o vibratoria, que proporcionan una redundancia estadística para medir las velocidades de fase. Los datos multicanal permiten la identificación y rechazo de los modos no fundamentales de ondas Rayleigh, así como el proceso más efectivo para la eliminación del ruido y un proceso de recolección de datos más rápido (Figura 4). Conociendo el tiempo de recorrido de las ondas, es como se definen las distintas capas presentes en el medio con sus velocidades sísmicas, dichas velocidades están controladas por los parámetros elásticos del material y se correlacionan con numerosas propiedades geomecánicas (Louie, 2001).

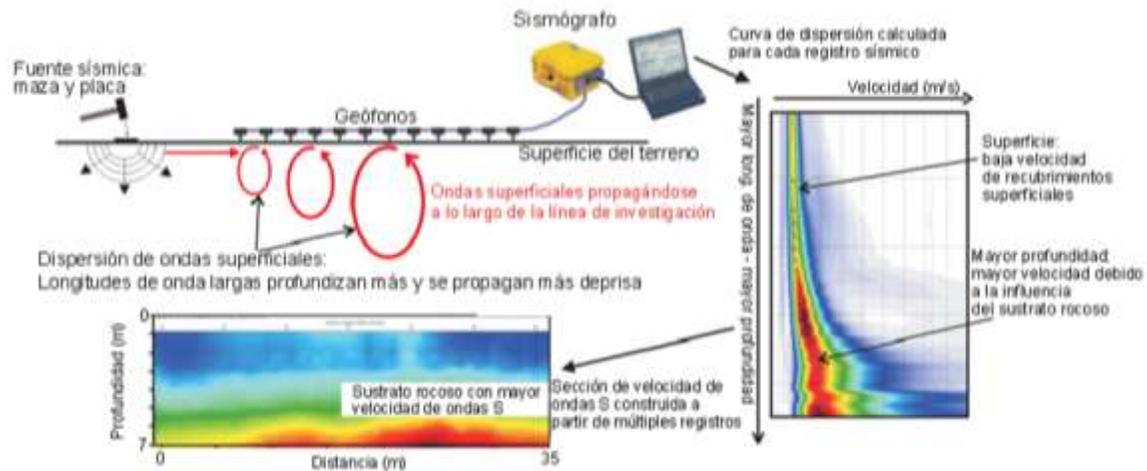


Figura 4. Diagrama de la metodología de Sísmica de Refracción mediante la técnica de MASW.

Fuente: TerraData Geophysical. <http://terradat.es/survey-methods/masw/>

Este método es muy útil para determinar de manera rápida, la estructura del subsuelo. Sus aplicaciones más frecuentes son la detección del estrato rocoso y de su estado mecánico, grado de compactación, estabilidad de taludes, así como zonas de alteración, fallas, fracturas, rellenos, deslizamientos, etc.

Respecto a la metodología de Cocientes Espectrales Promedio de Nakamura H/V (Sísmica por Registro de Ruido Blanco), el ruido ambiental o ruido blanco es la superposición de las vibraciones del suelo producidas por efectos naturales (viento, mareas, tormentas, olas, entre otras), y artificiales (tráfico de vehículos, paso de peatones, ferrocarriles, vibraciones de estructuras civiles, maquinaria, entre otras). Esta técnica se basa en las mediciones de las vibraciones ambientales (Ruido Blanco) de un sitio en sus componentes horizontal y vertical, y considerar que la componente vertical no es amplificada al atravesar el suelo, por lo que se puede considerar, a nivel práctico, que las acciones sísmicas en el basamento rocoso y en el afloramiento cercano son iguales (Nakamura, 1989). Las ventajas de este método son:

- No se requiere registro de sismos, dado que la fuente de energía proviene de la propagación de ondas sísmicas generadas por la actividad antrópica, así como por fuentes naturales.
- No se requiere de una estación de referencia.
- Se trata de un método no destructivo que se basa en una fuente pasiva.

De manera práctica, la adquisición de datos en campo se hace mediante un sismómetro triaxial que se ubica sobre el suelo o roca, de forma que quede orientado al norte. Dicho dispositivo se conecta a una computadora portátil, que mediante software especializado se programa los intervalos y periodo de adquisición de datos. Habitualmente se hacen adquisiciones continuas de 3 minutos, aunque algunos investigadores han llegado a realizar adquisiciones de hasta 30 minutos (Franklin et al., 2006). Con base los datos registrados en el sismómetro, se estima el cociente espectral de los espectros de amplitud de Fourier de las componentes horizontales con respecto a la vertical de las vibraciones de ruido ambiental registradas.

Las técnicas de sondaje mediante resistividad y polarización (*SEV* y *SIP*) consisten en introducir en el terreno cuatro electrodos colineales, los electrodos extremos corresponden denominados A y B, es por donde se hace pasar una corriente  $Io(t)$  alterna, en este caso en el dominio del tiempo y en pulsos de 2 segundos; los dos electrodos internos se llaman M y N y es por donde se mide la diferencia de potencial  $\Delta V$  creada por el paso de corriente eléctrica  $Io(t)I$  (Manilla, 2003). La Ley de Ohm establece que la resistencia eléctrica "R" de un cuerpo resulta de la relación entre el voltaje y

la corriente,  $R=(\Delta V/I)$ . La disposición de los electrodos obedece a un arreglo específico, en este caso el seleccionado corresponde al Schlumberger (Figura 5), cuya distancia entre electrodos de corriente es AB, y de potenciales es MN; al multiplicar la resistencia eléctrica por el factor geométrico que depende de los electrodos, se obtiene la resistividad aparente “ $\rho_a$ ”, de la forma:

$$\rho_a = \frac{\Delta V}{I} \pi a \left( \left( \frac{L}{a} \right)^2 - \frac{1}{4} \right)$$

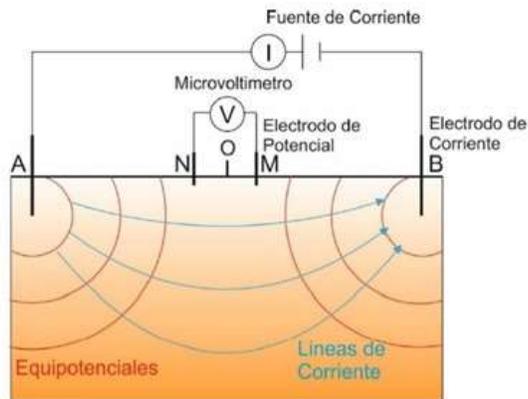


Figura 5. Arreglo de electrodos Schlumberger.

La polarización se mide como la capacidad de almacenar energía eléctrica (cargabilidad). La unidad más utilizada de medición en el dominio del tiempo son los milivoltios por voltio (mV/V). Cuando el voltaje de decaimiento a través del tiempo ( $V_p(t)$ ) y el voltaje medido en corriente continua ( $V_o$ ) tienen las mismas unidades, la cargabilidad “ $m$ ” se expresa en milisegundos (ms).

$$m = \frac{1}{V_o} \int_{t_1}^{t_2} V(t) dt$$

Se opta por la técnica de Sondeo de Polarización Inducida porque permite discriminar de mejor manera la calidad de la roca en función del par: resistividad-cargabilidad en un ambiente geológico complejo.

### Trabajos de campo

Con base en la metodología establecida y una vez realizada la caracterización del medio físico, se han generado las capas de información iniciales del SIG (localización, fisiografía, topografía, edafología, geología regional, uso de suelo, clima, etc.). Esta información es analizada a detalle por el grupo de investigadores/especialistas y se definen las zonas de mayor interés y sobre las cuales se realizarán los caminamientos y los levantamientos geofísicos.

#### a) Levantamiento geológico – estructural.

Se realizó un recorrido en las zonas detectadas como de mayor interés por parte del grupo de investigación (Figura 6), para ubicar los afloramientos rocosos representativos de la zona y de los cuales se registraron las coordenadas de cada punto donde se tomaron los datos geológicos. Posteriormente se inició el análisis geológico-estructural del afloramiento, utilizando para ello las herramientas de campo como son: brújula, pica, lupa y ácido clorhídrico. La información obtenida del análisis se registró en la bitácora. Las características obtenidas corresponden al tipo de roca (litología), las estructuras geológicas como fracturas, fallas, foliación, entre otras; de las cuales se obtuvieron sus datos como rumbo, inclinación, relleno de abertura, entre otros. La estratificación, asegurándose de definir el espesor y relación de un estrato con otro, su inclinación u otra

característica visible a nivel local. En caso de que fueran detectadas, se toma nota de alteraciones fisicoquímicas visibles en las rocas, generalmente producidas por su exposición a la intemperie.



Figura 6. Levantamiento geológico - estructural.

b) Levantamiento geofísico.

La adquisición de datos geofísicos en campo (levantamiento geofísico), se realizó conforme la metodología descrita previamente. La definición de las áreas donde han sido desplegados los sondeos responde al interés del grupo de investigación, ya sea para corroborar la información obtenida durante los caminamientos o bien; para obtener información de áreas o accidentes topográficos en los que a simple vista no ha sido viable obtener información.

*Cocientes Espectrales Promedio de Nakamura H/V (Registro de Ruido Blanco).*

Para la adquisición de datos sísmicos por medio del registro de Ruido Blanco (vibraciones ambientales) se utilizó un sismómetro triaxial. Este instrumento se coloca en el suelo, orientando en dirección norte. Posteriormente se niveló, para lo cual se ajustan las puntas hasta que la burbuja de aire queda en el centro del nivel circular (Figura 7). Una vez colocado y nivelado, el sismómetro se conectó a un equipo de cómputo, por medio del cual se programa y ajustan los parámetros de medición (tiempo de medición, intervalos de lectura, entre otros). Durante la adquisición de datos, se pueden observar en el equipo de cómputo la señal sísmica registrada en los tres ejes de medición.



Figura 7. Sismómetro triaxial, utilizado para el levantamiento geofísico por fuente pasiva.

*MASW.*

El segundo método geofísico ejecutado fue el *MASW* (sísmica con fuente activa). El levantamiento se realizó en líneas de registro que miden el tiempo de respuesta y amplitud de las ondas sísmicas (sismogramas). Para lo cual se realizó un tendido lineal o semi-lineal, el cual consistió en colocar

12 geófonos de 4.5 Hz espaciados a 3 m entre cada uno de ellos, dando una longitud total de 36 metros. El siguiente paso es tender el cable sísmico, el cual tiene ya el lugar de conexión para los geófonos. A la par de la inserción de los geófonos en la superficie terrestre, cada uno de ellos se conectó al cable sísmico, cuya función es llevar la señal de cada geófono al sismógrafo, el cual se encarga de detectar la intensidad de las ondas sísmicas (Figura 8), y las envía a un equipo de cómputo. El registro del tiempo y velocidad de recorrido de las ondas sísmicas, desde su origen hasta el geófono, permiten definir las distintas capas presentes en el medio, ya que los parámetros elásticos del material y propiedades geomecánicas controlan dichas velocidades, y son distintas para cada tipo de material.



Figura 8. Conexión de geófonos sobre la línea de tendido sísmico y generación de ondas sísmicas.

#### *SEV y SPI.*

Como primer paso se ubicó la zona a explorar, lo cual se realiza dependiendo de los estudios previos, geología presente, accesibilidad, logística, entre otros criterios. En el punto determinado como centro de la línea de sondeo se clava una varilla o electrodo para definir esta posición. En segundo paso se insertan en el terreno los electrodos A y B, que son los electrodos por donde se inyecta la corriente. Para este paso se usó un marro con el cual se golpeó en la cabeza del electrodo hasta que se introdujo al menos unos 10 cm. Posterior a esto, se insertaron en el suelo los electrodos M y N, los cuales estaban conectados por medio de un cable a una batería energizada (Figura 9).



Figura 9. Vista del arreglo lineal de los electrodos para *SEV* y *SPI*.

La distancia a la que se insertaron los electrodos M y N fue aumentando con respecto al centro del arreglo, de manera que se llegó a una apertura de 68 m por lado. En cada apertura de los electrodos M y N se inyectó corriente alterna proveniente de la batería. La respuesta del suelo al paso de la energía se registró en los electrodos A y B, los cuales estaban conectados al equipo SYSCAL, donde se mostraban los resultados de resistencia y cargabilidad. Los valores de dichos parámetros, para cada una de las lecturas en cada sondeo fueron registrados en bitácora para su posterior análisis.

## RESULTADOS

El conjunto de datos obtenidos en campo mediante los sondeos geofísicos, la caracterización geológica y el medio físico se integra dentro del SIG, donde realizan los análisis espaciales multicriterio para establecer los niveles de intemperismo natural, el grado de afectaciones a las laderas por acciones antropogénicas, invasiones de causes y/o movimientos de tierras en la historia geológica reciente. De particular interés resultan las observaciones de campo y la geolocalización de accidentes topográficos y geológicos que puedan afectar la estabilidad de las laderas naturales; siendo estas las áreas de mayor interés para establecer las secciones geológicas más acertadas para la construcción de los modelos geotécnicos, de los cuales se realizarán los análisis geomecánicos necesarios para la estimación de la estabilidad de las laderas y los procesos de simulación bajo distintos escenarios de cargas activas, pasivas y en su caso; definir la presencia de agua superficial o subterránea y su interacción con las fracturas y fallamientos localizados.

### a) Estratigrafía regional.

La columna estratigráfica de la región que rodea el área de estudio está constituida por rocas que comprenden edades del Jurásico Superior al Reciente; la Sierra de Guanajuato conformada por el complejo basal del Jurásico Superior-Cretácico Inferior y la cubierta vulcanosedimentaria del Cenozoico; y en las faldas de la sierra y el valle de León se presentan rocas clásticas continentales de origen lacustre del Pliocuaternario, así como depósitos de aluvión del Cuaternario. La Sierra de Guanajuato, con la formación La Luz, de composición básica y ultrabásica, corresponden a las rocas más antiguas de la región. Seguido por derrames de lava basálticas y andesíticas llamadas Formación La Luz (Edwards, 1956), por encima yace un complejo vulcanosedimentario correspondiente principalmente a calizas y lutitas que presentan un metamorfismo de bajo grado que no aflora en el área de estudio.

### b) Estratigrafía local.

El levantamiento geológico de detalle realizado, sumado a los antecedentes bibliográficos, permitieron generar el mapa de unidades aflorantes (Figura 10). Se hace referencia únicamente a las unidades estratigráficas presentes en la zona descritas según su edad geológica de la más antigua a la más reciente, incluyendo fotografías de cortes y afloramientos observados durante los recorridos de inspección y exploración. Las unidades estratigráficas presentes en la zona de estudio se identifican como: Conglomerado Rojo de Guanajuato, Ignimbrita Cuatralba, Basalto El Cubilete, Depósitos de pie de monte, suelo residual y rellenos antropogénicos. Los direccionamientos de las fracturas de los macizos rocosos superficiales no generan bloques que representen un peligro de caído (conforme se ha establecido en el análisis estereográfico), ya que las rocas se consideran sanas (nula o poca alteración).

### a) Secciones geológicas y modelos geotécnicos

Con base el mapa geológico (estratigrafía local), elaborado con la información del levantamiento e información bibliográfica; se trazan las secciones geológicas cuya ubicación y orientación responden a las observaciones e interés particular del grupo de investigación. Las secciones tienen una longitud de 600 m (promedio) y abarcan desde la parte alta de la Sierra hasta la parte semiplana con el objeto de identificar el plano de la falla potencial de manera global, observando todo el panorama la longitud (Figura 11). Como puede observarse en los modelos geotécnicos, las

secciones presentan las mismas unidades estratigráficas y el mismo comportamiento; existen ligeras variaciones en espesores, topografía y zona de contacto. De manera descriptiva se identifica un basamento de conglomerado en la parte baja sobreyacido por la unidad de ignimbrita (riolitas) y cubierto por una delgada capa de suelos residuales y depósitos de pie monte.

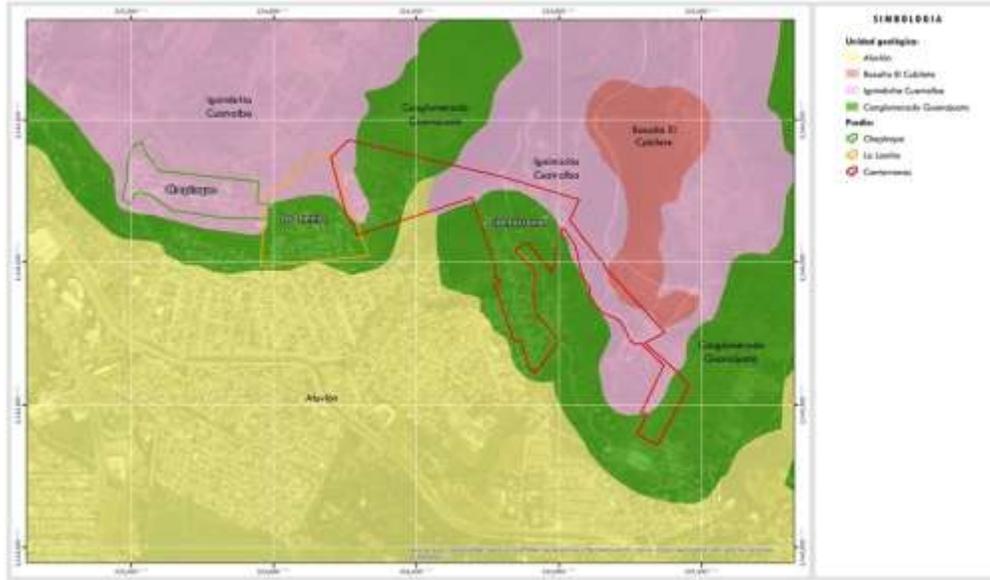


Figura 10. Estratigrafía local de la zona de estudio.

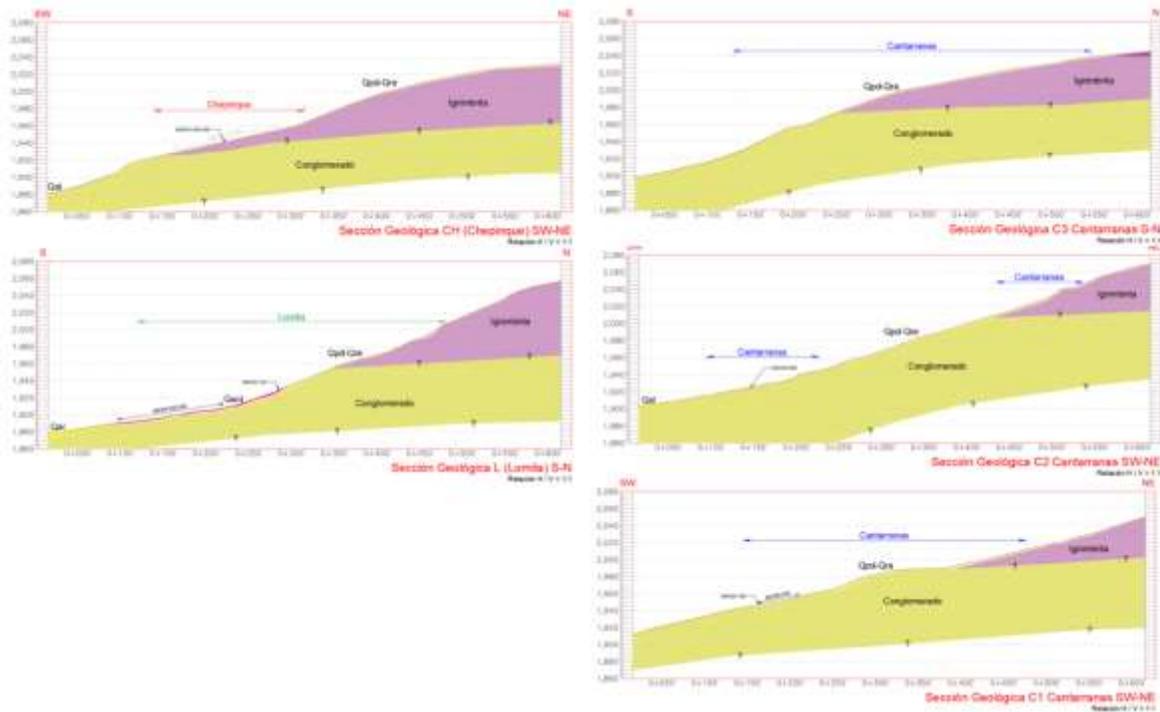


Figura 11. Modelos geotécnicos.

Si bien en apariencia los modelos geotécnicos representan una idealización del medio natural, la aplicación de los métodos geofísicos y los resultados obtenidos de los caminamientos en campo y el análisis post proceso de los métodos aplicados (MASW, Nakamura H/V, SEV y SPI), permiten que las secciones estratigráficas contengan datos geomecánicos inferidos por los métodos geofísicos, tales como:

$V_p$ =	Velocidad de compresión	$\gamma_m$ =	Peso volumétrico
$V_s$ =	Velocidad de corte	$E$ =	Módulo elástico reducido
$\nu$ =	Relación de Poisson	$G$ =	Módulo dinámico reducido

Con base en la interpretación de las secciones geológico-estructurales y conforme la evaluación de sus propiedades geofísicas, define el modelo geotécnico para cada sitio de estudio; mediante los cuales se realizan los análisis de estabilidad de laderas por el método de elección del grupo de investigación.

### CONCLUSIONES

La aplicación de métodos geofísicos en la construcción de secciones estratigráficas y modelos geotécnicos como fundamento para el análisis de la estabilidad de laderas se conforma como una metodología efectiva, rápida y confiable desde el aspecto técnico y económico, permitiendo a los grupos de investigación y técnicos obtener una mayor superficie evaluada durante los trabajos de exploración de campo, aumentando la representatividad de los muestreos. La combinación de técnicas sísmicas y eléctricas utilizadas en el presente trabajo han demostrado ser una combinación adecuada, cuyos resultados se complementan y confirman las cualidades de la estratigrafía que conforman las laderas naturales evaluadas, lo que conlleva a una mejor toma de decisiones en todos los sentidos y niveles de gobierno en pro de salvaguardar la seguridad de la sociedad. El punto base continuará siendo el conocimiento del medio físico existente en las áreas a evaluar, en conjunto con el criterio observacional y el entendimiento de las condiciones que la naturaleza manifiesta.

### BIBLIOGRAFÍA

1. CENPAPRED (2015). Mapa Nacional de Susceptibilidad por Inestabilidad de Laderas. <http://www.atlasmnacionalderiesgos.gob.mx/archivo/inestabilidad-laderas.html>
2. Edwards, J. (1956). Estudios sobre algunos de los conglomerados rojos del Terciario Inferior del centro de México. Congreso Geológico Internacional, (pág. 75). México.
3. Franklin R., Caselles J.O., Cana J.A., Clapes J., Pujades Ll. G., Navarro M., García F. y Pérez Gracia V. (2006). Estimación de la respuesta del sitio mediante el método del cociente espectral aplicado a ruido ambiental: aplicación a la Ciutat Vella de Valencia. Rev. Int. Mét Num. Cál. Dis. Ing. Vo. 22, 2, 169-191.
4. IMPLAN (2018). Actualización del Atlas de Riesgos de León 2018.
5. IMPLAN (2010). Atlas Municipal de Riesgos 2010.
6. Louie, J. (2001). Faster, Better: Shear-Wave Velocity to 100 Meters Depth from Refraction Microtremor Arrays, Bulletin of the Seismological Society of America. Vol. 91 (2): 347–364.
7. Manilla Aceves, A. (2003). Geofísica aplicada en los proyectos básicos de ingeniería civil. Secretaria de Comunicaciones y Transportes, Instituto Mexicano del Transporte, Publicación Técnica No. 229.
8. Nakamura, Y. (1989). A method for dynamic characteristics estimation of subsurface using microtremor on the ground surface. Quaterly Report of the Railway Technical Research Institute, 30:1, 25-30.
9. Park, C.B., Miller, R.D., and Xia, J., 1999, Multichannel analysis of surface waves (MASW): Geophysics, 64, 800-808.

10. TerraData Geophysical (03 de agosto de 2021). Metodología de MASW (análisis de ondas superficiales). Recuperado desde: <http://terradat.es/survey-methods/masw>
11. Tomás R. y Delgado, J. (2004). Diseño de un modelo geológico-geotécnico 3D de La Vega Baja del Río Segura (Alicante, España). January 2004. XVI Congreso Internacional de Ingeniería Gráfica (INGEGRAF).

## ANÁLISIS DEL TERMINADOR SOLAR EN ALTA FRECUENCIA

M. Isabel Pérez Martínez<sup>1</sup>, Claudia Rafela Escobedo Galván<sup>2</sup>, Alejandra Rojas Duque<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Autónoma de Zacatecas, <sup>2</sup>CECyT 18 Zacatecas IPN.  
iperez@uaz.edu.mx

### RESUMEN

El objetivo principal de este trabajo es analizar el impacto del terminador solar en la atmósfera de la tierra. Para llevar a cabo este objetivo, se hizo un análisis de frecuencias, a través del periodograma Lomb Scargle para muestras no uniformes. Se tomaron intervalos de tiempo antes y después del terminador solar. Por terminador solar, nos referimos al cambio de luz a oscuridad sobre la superficie de la Tierra, en ese sentido, se tienen dos terminadores solares a lo largo del día: de la tarde a la noche y de la noche a la mañana. Así, se decidió elegir días del año 2019, ya que el Sol se encontraba en su mínimo de actividad, se tomaron tres días: 8, 13 y 20 de Mayo del 2019. De la curva de luz a 20.1 MHz, se analizó un intervalo de tiempo de 45 minutos, 45 minutos antes y después de cada terminador solar. Una vez realizado el análisis de frecuencias, es decir, del periodograma, el objetivo es buscar frecuencias que prevalezcan antes y después, de manera que son perturbaciones que no son afectadas por el terminador solar, aquellas frecuencias diferentes, serán aquellas ocasionadas por el terminador. Así, se tendrán perturbaciones ocasionadas por el terminador solar, y perturbaciones que, a pesar del terminador, se mantendrán constantes. Así, para el día 8 de Mayo, se tuvo que para el primer terminador se mantuvieron constantes las frecuencias de 65 días<sup>-1</sup>, 83 días<sup>-1</sup> y 113 días<sup>-1</sup>. Para ese mismo día, en el segundo terminador solamente 11 días<sup>-1</sup> y 28 días<sup>-1</sup>. De la misma forma, para el día 13 de Mayo las frecuencias que se mantuvieron constantes en el primer terminador son de 25 días<sup>-1</sup> y 83 días<sup>-1</sup> y en el segundo terminador solamente una frecuencia de 22 días<sup>-1</sup>. Para el día 20 de Mayo, en el primer terminador, se tuvieron las frecuencias de 52 días<sup>-1</sup> y 78 días<sup>-1</sup>, para el segundo terminado del mismo día, se tuvieron 12 días<sup>-1</sup>, 31 días<sup>-1</sup> y 108 días<sup>-1</sup>.

### INTRODUCCIÓN

El Sol, al ser la estrella más cercana a la Tierra, es considerada nuestra principal fuente de energía. Por un lado, responsable de la temperatura y atmósfera de la Tierra, así como de los efectos correspondientes de su actividad estelar propia. Al ser considerada una estrella, el Sol presenta un ciclo de actividad de 11 años, que se puede visualizar a través de la evolución de las manchas solares. A lo largo de este periodo de tiempo, el Sol, no solo exhibe manchas en su disco, sino que también presenta fulguraciones o llamaradas solares. En estos eventos, a través del viento solar, el Sol despidе tanto partículas como radiación hacia el espacio interplanetario. Una de las principales y más notorias consecuencias de la actividad solar, son la aparición de auroras boreales y australes, así como la disminución de la capa de ozono.

Aún en su etapa de inactividad, en el simple movimiento propio de la Tierra alrededor del Sol, éste repercute sobre la atmósfera de la Tierra. Dicho movimiento genera el terminador solar sobre la atmósfera, que es la línea que separa la zona iluminada de la oscura, es decir, temporalmente este fenómeno se ubica en el amanecer y en el anochecer, justo cuando se da el cambio de la noche al día y viceversa. Este cambio brusco del terminador solar, ha sido estudiado por la generación de perturbaciones sobre la atmósfera de la Tierra. La atmósfera de la Tierra se compone, en su mayoría, de nitrógeno molecular y oxígeno molecular, y menormente de vapor de agua, dióxido de carbono y ozono. Durante el día, es bombardeada constantemente por la radiación solar, de la cual, una parte se absorbe y otra parte es reflejada. De forma general, la radiación solar no solo da pie a cambios termodinámicos en la atmósfera de la Tierra, sino que también es responsable de la ionización de los gases, generando así electrones libres dando lugar a la ionosfera de la Tierra (Ratcliffe, 1972).

El estudio de las perturbaciones en la ionosfera de la Tierra, ya sea generados por el terminador solar, o bien, ocasionado por efectos relacionados con el cambio climático, data desde 1970 (**Smirnov, 1975**) (**Chimonas & Hines, 1970**). Una de los principales efectos del terminador solar, es la generación de ondas gravitacionales y ondas acústicas (**Beer, 1973**). La importancia del estudio de la generación de ondas gravitacionales radica en la habilidad que tienen para transferir tanto energía como momento. En ese sentido, los estudios para analizar las perturbaciones generadas en la atmósfera de la Tierra, hacen uso desde ondas de radio de baja frecuencia (**Nina & Čadež, 2013**), tecnología GPS (**Afraimovich, 2008**)

### DATOS OBSERVACIONALES

Los datos se obtuvieron de la estación RadioJOVE, que se encuentra dentro de las instalaciones del CECyT 18 Zacatecas. La estación RadioJOVE consta de una antena tipo dipolo a 20.1 MHz, y un receptor que, además de amplificar la señal recibida de las antenas, permite convertir la señal analógica para su registro en un computadora en tiempo real. Esto permite obtener un monitoreo constante de la señal recibida a lo largo del tiempo, dando lugar a una curva de luz, misma que es la variación de la intensidad a través del tiempo. Ya que el Sol es la principal fuente de ionización de la atmósfera de la Tierra, es de esperarse un cambio entre la intensidad de la señal recibida durante el día y durante la noche. Esta diferencia se puede apreciar en la **figura 1**, donde se muestra una curva de luz típica para el mes de mayo del 2019. Así, durante el día, cuando se tiene una atmósfera mayormente ionizada, se tiene una gran cantidad de electrones libres, mismos que se encargan de absorber radiación en ondas de radio. De manera que, durante el día se observa una intensidad de señal muy baja, mientras que por la noche, cuando se tiene una atmósfera neutra, se observa una intensidad de señal muy alta.

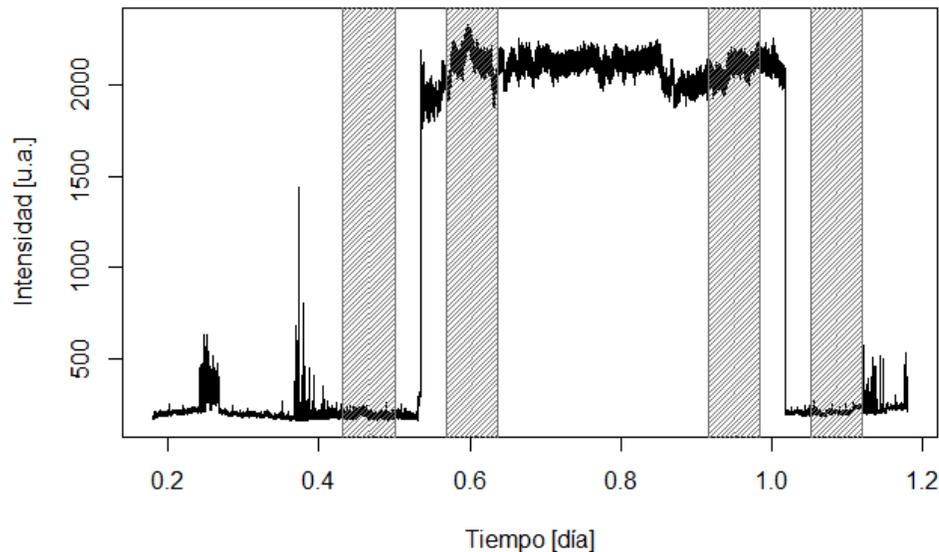


Figura 1. Curva de luz obtenida para el día de 8 Mayo, mostrando las características en común para cualquier curva de luz: una intensidad baja durante el día, el terminador solar que representa el cambio abrupto de intensidad, una intensidad alta durante la noche. Las regiones sombreadas representan el intervalo de tiempo analizado antes y después de cada terminador solar.

Para determinar el efecto del terminador solar, se tomó una muestra de 3 días durante el mes de Mayo de 2019, mes en el que las observaciones fueron consistentes. Cabe mencionar, que durante el año 2019, el Sol se encontraba en su mínimo de actividad, lo que nos da una certeza de

que, no hubo una variación de señal debida a tormentas solares. Los días de la muestra fueron 8, 13 y 20 de Mayo.

### METODOLOGÍA

Para estudiar el efecto del terminador solar se realizó un análisis de frecuencias mediante un periodograma de Lomb Scargle (**Glynn, 2006**). La idea detrás de un análisis de frecuencias es determinar la frecuencia a la que ocurre una determinada señal. En este caso, de la curva de luz, se tomó un intervalo de tiempo de 90 minutos, antes y después del terminador solar día – noche y noche – día, es decir, del atardecer y el amanecer. Sin embargo, el terminador solar representa un cambio abrupto en la intensidad de la señal, por lo que se decidió analizar este intervalo 45 minutos antes del terminador solar, y 45 minutos después del terminador solar, como se puede observar en la figura X, que corresponden a las regiones sombreadas de la curva de luz.

A partir de las frecuencias obtenidas para cada región, se puede determinar qué perturbaciones se mantienen constantes a pesar del terminador, y qué perturbaciones origina.

### RESULTADOS

Para visualizar las frecuencias estadísticamente significativas y con mayor relevancia, se utilizó el espectro de potencias del periodograma Lomb Scargle. En las **figuras 2, 3 y 4** se representan los espectros de potencia de antes y después del primer terminador solar, después del primer terminador solar y antes del segundo, y finalmente, antes y después del segundo terminador solar.

#### 8 de Mayo

En el primer terminador solar, aquellas frecuencias que perduran, antes y después de este son de alrededor de  $65 \text{ días}^{-1}$ ,  $83 \text{ días}^{-1}$  y  $112 \text{ días}^{-1}$ . De igual forma, analizando las frecuencias después del primer terminador y antes del segundo terminador, que corresponde a la **figura 2** central, la única frecuencia que coincide es de  $98 \text{ días}^{-1}$ . Finalmente, del segundo terminador, las frecuencias que se mantienen son de  $10 \text{ días}^{-1}$  y  $28 \text{ días}^{-1}$ .

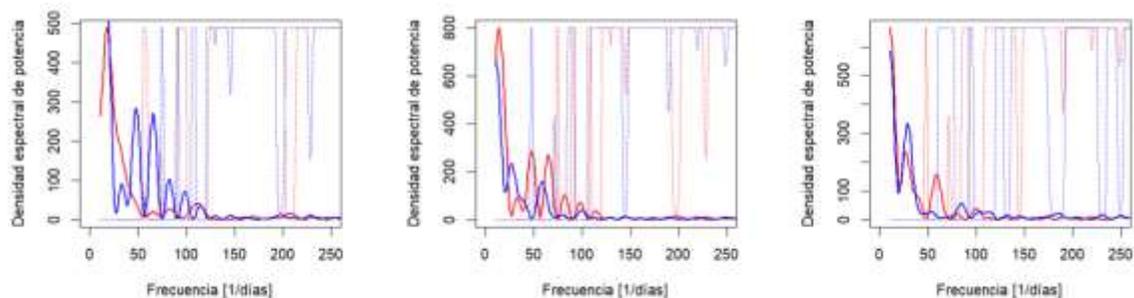


Figura 2. Espectro de potencias para el día 8 de Mayo. Izquierda: en rojo, antes del primer terminador solar, en azul, después. Centro: en rojo después del primer terminador solar, en azul, antes del segundo terminador solar. Derecha: en rojo, antes del segundo terminador solar, en azul, después. Las líneas punteadas representan el comportamiento del p valor, para visualizar si las frecuencias son estadísticamente significativas.

#### 13 de Mayo

En el primer terminador solar, aquellas frecuencias que perduran, antes y después de este son de alrededor de  $44 \text{ días}^{-1}$  y  $63 \text{ días}^{-1}$ . De igual forma, analizando las frecuencias después del primer terminador y antes del segundo terminador, que corresponde a la **figura 3** central, las frecuencias que se mantienen son de  $98 \text{ días}^{-1}$  y  $116 \text{ días}^{-1}$ . Mientras que para el segundo terminador, ninguna frecuencia coincide.

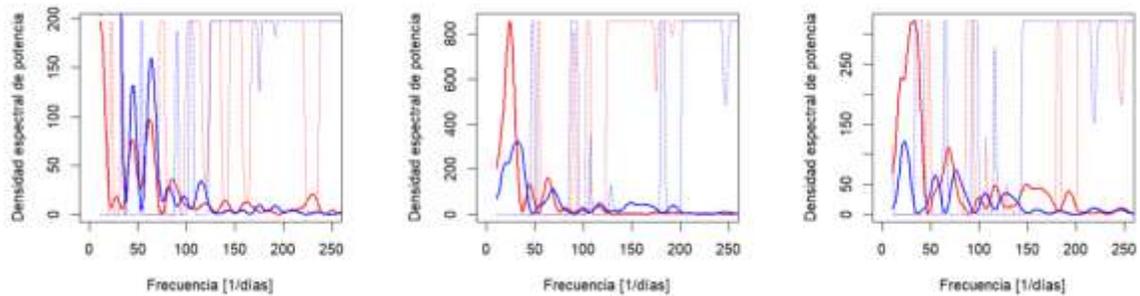


Figura 3. Espectro de potencias para el día 13 de Mayo. Izquierda: en rojo, antes del primer terminador solar, en azul, después. Centro: en rojo después del primer terminador solar, en azul, antes del segundo terminador solar. Derecha: en rojo, antes del segundo terminador solar, en azul, después. Las líneas punteadas representan el comportamiento del p valor, para visualizar si las frecuencias son estadísticamente significativas.

#### 20 de Mayo.

En el primer terminador solar, aquellas frecuencias que perduran, antes y después de este son de alrededor de  $58 \text{ días}^{-1}$  y  $79 \text{ días}^{-1}$ . De igual forma, analizando las frecuencias después del primer terminador y antes del segundo terminador, que corresponde a la **figura 4** central, las frecuencias que se mantienen son de  $58 \text{ días}^{-1}$ ,  $79 \text{ días}^{-1}$  y  $107 \text{ días}^{-1}$ . Mientras que para el segundo terminador las frecuencias son de  $107 \text{ días}^{-1}$  y  $32 \text{ días}^{-1}$ .

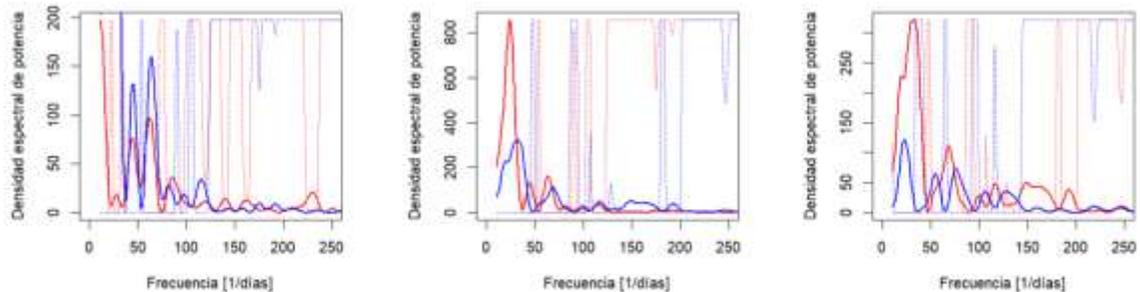


Figura 4. Espectro de potencias para el día 20 de Mayo. Izquierda: en rojo, antes del primer terminador solar, en azul, después. Centro: en rojo después del primer terminador solar, en azul, antes del segundo terminador solar. Derecha: en rojo, antes del segundo terminador solar, en azul, después. Las líneas punteadas representan el comportamiento del p valor, para visualizar si las frecuencias son estadísticamente significativas.

## CONCLUSIONES

El objetivo principal de este trabajo es realizar un análisis de frecuencias, de las perturbaciones generadas en la atmósfera a través de la señal de 20.1MHz. Este estudio no es concluyente, ya que, si bien se han identificado frecuencias que son afectadas por el terminador solar, falta identificar aquellas perturbaciones generadas por el terminador, y catalogar dichas perturbaciones como ondas gravitacionales. Una característica interesante, surge al analizar el periodo de la noche, ya que, al no existir el terminador solar, se esperaría que las frecuencias se mantuvieran constantes, lo cual no sucede. Esto implica que existen perturbaciones en la atmósfera de la Tierra que ocurren durante el periodo de noche.

**BIBLIOGRAFÍA**

1. Afraimovich, E. L. (2008). First GPS-TEC evidence for the wave structure excited by the solar terminator. *Earth, Planets and Space*, 895-900.
2. Beer, T. O. (1973). Supersonic generation of atmospheric waves. *Nature*, 34.
3. Chimonas, G., & Hines, C. O. (1970). Atmospheric gravity waves induced by a solar eclipse. *Journal of Geophysical Research*, 75(4), 875.
4. Glynn, E. F. (2006). Detecting periodic patterns in unevenly spaced gene expression time series using Lomb–Scargle periodograms. *Bioinformatics*, 22(3), 310-316.
5. Nina, A., & Čadež, V. M. (2013). Detection of acoustic-gravity waves in lower ionosphere by VLF radio waves. *Geophysical Research Letters*, 4803-4807.
6. Ratcliffe, J. A. (1972). *An introduction to ionosphere and magnetosphere*. Cambridge University Press.
7. Smirnov, V. M. (1975). Ecological problems of the earth's atmosphere. *Soviet Physics Uspekhi*, 18(10), 804.

## MOMENTO DIPOLAR DÉBIL DEL TOP

Jorge Isidro Aranda Sánchez, Eligio Cruz Albaro, Fernando Iguazú Ramírez Zavaleta

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas de la Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo.

[elicruzalbaro88@gmail.com](mailto:elicruzalbaro88@gmail.com)

### RESUMEN

El quark top es la partícula elemental más pesada conocida hasta ahora y debido a su gran masa, el fermión juega un papel crucial en las correcciones electrodébiles a nivel de un lazo pues proporciona restricciones indirectas en la masa del bosón de Higgs. Es también el único fermión del modelo estándar (ME) con un acoplamiento de Yukawa intenso y decae antes de que se pueda hadronizar. Estas propiedades hacen del quark top un candidato pertinente para búsqueda de efectos de nueva física a la escala de tera-electronvoltios. La propuesta de este trabajo consiste en estudiar la física del top concentrándonos en los momentos dipolares débiles. Estas propiedades del top están determinadas por el vértice  $Z\bar{t}t$ , y son generados a nivel de un lazo en el marco de un modelo de extensión conocido como el modelo Bestest Little Higgs (BLH). Dicha teoría ofrece una solución al problema de la jerarquía de masa sin recurrir al ajuste fino y además, no está limitado por datos de precisión electrodébil como es el caso de otros modelos tipo Little Higgs. De esta manera, calculamos las contribuciones del BLH a los momentos dipolares débiles del top que provienen de los lazos que contienen a los compañeros pesados de los bosones de norma, escalares y fermiones del ME. Es justificable estudiar las propiedades débiles del top en modelos de extensión, ya que estos pueden ser posibles precursores de teorías bastante generales que nos permitan explicar con mayores detalles la naturaleza de las partículas elementales. Nuestros resultados se comparan con las predicciones teóricas del ME.

La contribución numérica total al momento dipolar magnético débil es del orden de  $10^{-5}$ , un orden de magnitud menor que lo predicho en el marco del ME. Por otro lado, el momento dipolar eléctrico débil resultó ser cero. Hasta el momento no hay datos experimentales que confirmen la existencia de las propiedades débiles del quark top. Sin embargo, se estarán investigando intensamente en los colisionadores como el LHC o el futuro colisionador, ILC. Quizás solo sea cuestión de tiempo para que los colisionadores alcancen la sensibilidad suficiente para comprobar la veracidad de los límites generados en la literatura de los momentos dipolares débiles del top.

### INTRODUCCIÓN

Desde que fue descubierto, la fenomenología del quark top no ha sido explorada completamente, dejando abierta así la posibilidad de una potencial conexión con nueva física. Gracias a la gran energía y alta luminosidad instantánea que ha alcanzado el LHC, el top se produce en grandes cantidades, lo que permite estudiarlo en detalle. Actualmente, uno de los principales objetivos del programa de análisis que se realiza en el colisionador LHC es estudiar los momentos dipolares electrodébiles anómalos de los fermiones, de manera particular, para el quark top [1]. Esto ha recibido una atención considerable en los últimos años debido al progreso significativo en el área experimental, pues conlleva información importante acerca de sus interacciones con otras partículas, proporcionando de esta manera, una oportunidad única para buscar nueva física a la escala de TeVs. En un futuro próximo, también se contempla la creación de un colisionador lineal de leptones como el ILC (International Linear Collider) [2,3], que está diseñado para operar a una energía de centro de masas de  $\sqrt{s} = 500$  GeV, energía suficiente para la producción de un par de quarks top. Con este colisionador se encontrarían valiosos datos para medir con precisión las propiedades del top, pues está diseñado para ser extremadamente sensible a los acoplamientos electrodébiles del fermión.

## TEORÍA

En cuanto a las propiedades débiles del quark top, estas aparecen en teoría cuántica de campos con su interacción con el bosón Z. Así, la función vértice que involucra a un bosón Z, y un par de quarks top en la capa de masa, está definida en términos de cuatro factores de forma de la siguiente manera

$$ie \bar{u}(p') \Gamma^\mu(q^2) u(p) = ie \bar{u}(p') \{ \gamma^\mu [F_V(q^2) - F_A(q^2) \gamma^5] + i \sigma^{\mu\nu} q_\nu [F_M(q^2) - i F_E(q^2) \gamma^5] \} u(p), \quad (1)$$

donde  $F_V$  y  $F_A$  representan los acoplamientos vectorial y vector-axial del bosón Z que solamente surgen a nivel árbol en el ME, mientras que  $F_M$  y  $F_E$  están asociados a los factores de forma de momentos dipolares débiles, el magnético y el eléctrico, respectivamente. Estos últimos aparecen debido a las correcciones cuánticas, y son las herramientas preferidas para estudiar los efectos de nueva física de manera indirecta, a través de correcciones virtuales de nuevas partículas predichas por extensiones del ME. Particularmente,  $F_E$  sólo recibe contribuciones a nivel de tres lazos en el ME [4, 5]. Otra característica de los factores de forma, es que sólo dependen de una variable dinámica independiente,  $q^2$ , siendo  $q = p' - p$  y denota el momento entrante del bosón Z. Para el caso de los factores de forma,  $F_M$  y  $F_E$ , estos se relacionan con el momento dipolar magnético débil anómalo (MDMDA)  $a_t^W$  y el momento dipolar eléctrico débil (MDED)  $d_t^W$  de la siguiente manera,

$$F_M(q^2) = -\frac{a_t^W}{2 m_t}, \quad F_E(q^2) = -\frac{d_t^W}{e}. \quad (2)$$

Cabe mencionar que con la ecuación (2) no es posible definir las propiedades estáticas del bosón Z cuando éste, particularmente, interacciona con un par de quarks top. Recordemos que las propiedades estáticas solamente surgen cuando el bosón se encuentra en capa de masa, es decir,  $q^2 = m_Z^2$ . Sin embargo, para el vértice que nos interesa está involucrado un par de fermiones bastante masivos, y debido a este hecho, el bosón Z debe estar necesariamente fuera de capa de masa,  $q^2 > m_Z^2$ . Para nuestro estudio de los aspectos fenomenológicos de las propiedades débiles del quark top, se tomará en cuenta las condiciones mencionadas anteriormente.

Con la finalidad de determinar los momentos dipolares débiles del quark top en el escenario del modelo BLH. Se obtendrán las amplitudes que contribuyen al vértice  $Z\bar{t}t$ , como se muestra en la Figura 1. De la figura apreciamos que las propiedades débiles del top reciben contribuciones de los bosones de norma y escalares, en donde  $A$  representa a los bosones  $Z', W'$ , y además, a los escalares  $\sigma, A_0$  y  $H_0$ ; mientras que  $f$  denota a los quarks  $t, T, T^{2/3}, T_5, T_6, b, B$ . En este escenario se emplea la norma unitaria por lo que no aparecen diagramas con partículas no físicas.

A continuación, estableceremos las condiciones cinemáticas necesarias para llevar a cabo el cálculo de amplitudes. Con las condiciones en capa de masa de las partículas reales externas, en este caso el par de quarks top, se tiene

$$p_1^2 = p_2^2 = m_t^2, \quad (3)$$

siendo  $m_t$  la masa del top,  $p_1$  y  $p_2$  son los cuadrimentos del top entrante y saliente, respectivamente. Ahora, por conservación del cuadrimento,  $q = p_2 - p_1$ , entonces

$$q^2 = (p_2 - p_1)^2 = m_t^2 - 2 p_2 \cdot p_1 + m_t^2 \Rightarrow p_2 \cdot p_1 = \frac{2 m_t^2 - (\sqrt{s})^2}{2}. \quad (4)$$

$\sqrt{s}$  es la energía en el centro de masas. Recordemos que el bosón Z estará fuera de capa de masa. En el diagrama de Feynman (Figura 1), uno de los cuadrimentos de las líneas internas permanece indeterminado, en nuestro caso denotaremos a este cuadrimento con la letra  $k$ . La

variable  $k$  será el cuadrimomento a integrarse en el lazo, aunque al final será irrelevante pues nuestro resultado será independiente del cuadrimomento mencionado.

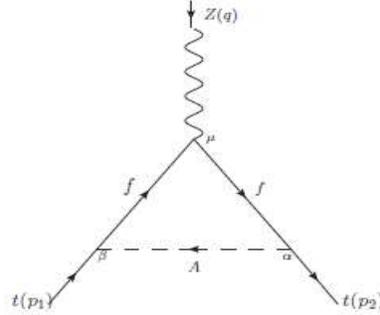


Figura 1. Diagramas de Feynman que contribuyen a los momentos dipolares débiles del quark top.

Las amplitudes a determinar poseen la siguiente estructura tensorial,

$$\mathcal{M}^\mu = \bar{u}(p_2)\Gamma^\mu u(p_1). \quad (5)$$

La forma explícita de la función vértice  $\Gamma^\mu$  está dada por

$$\Gamma^\mu = \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \frac{T^{\alpha\mu\beta}(p_1, p_2)}{(k^2 - m_A^2)((k+p_1)^2 - m_f^2)((k+p_2)^2 - m_f^2)}. \quad (6)$$

En esta etapa obtenemos las diferentes contribuciones al momento dipolar débil del top. De esta manera, las amplitudes generadas a partir de la Figura 1 son

$$M_{1,Z'tt}^\mu = (-1)(i)^6 A_1^2 B_1 \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \bar{u}(p_2) (\gamma^\alpha P_L) \frac{(k_\mu \gamma^\mu + p_{2\mu} \gamma^\mu + m_t)}{(k+p_2)^2 - m_t^2} (\gamma^\mu (P_L - \frac{4}{3} S_W^2)) \frac{(k_\mu \gamma^\mu + p_{1\mu} \gamma^\mu + m_t)}{(k+p_1)^2 - m_t^2} (\gamma^\beta P_L) \frac{1}{k^2 - m_{Z'}^2} (g^{\alpha\beta} - \frac{k^\alpha k^\beta}{m_{Z'}^2}) u(p_1), \quad (7)$$

$$M_{2,Z'TT}^\mu = (-i)^6 A_2^2 B_2 \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \bar{u}(p_2) (\gamma^\alpha P_R) \frac{(k_\mu \gamma^\mu + p_{2\mu} \gamma^\mu + m_T)}{(k+p_2)^2 - m_T^2} (\gamma^\mu) \frac{(k_\mu \gamma^\mu + p_{1\mu} \gamma^\mu + m_T)}{(k+p_1)^2 - m_T^2} (\gamma^\beta P_R) \frac{1}{k^2 - m_Z^2} (g^{\alpha\beta} - \frac{k^\alpha k^\beta}{m_Z^2}) u(p_1), \quad (8)$$

$$M_{3,Z'T^{2/3}T^{2/3}}^\mu = (i)^6 A_3^2 B_3 \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \bar{u}(p_2) (\gamma^\alpha P_R) \frac{(k_\mu \gamma^\mu + p_{2\mu} \gamma^\mu + m_{T^{2/3}})}{(k+p_2)^2 - m_{T^{2/3}}^2} (\gamma^\mu) \frac{i(k_\mu \gamma^\mu + p_{1\mu} \gamma^\mu + m_{T^{2/3}})}{(k+p_1)^2 - m_{T^{2/3}}^2} (\gamma^\beta P_R) \frac{1}{k^2 - m_{Z'}^2} (g^{\alpha\beta} - \frac{k^\alpha k^\beta}{m_{Z'}^2}) u(p_1), \quad (9)$$

$$M_{4,Z'T_5T_5}^\mu = (i)^6 A_4^2 B_4 \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \bar{u}(p_2) (\gamma^\alpha P_L) \frac{(k_\mu \gamma^\mu + p_{2\mu} \gamma^\mu + m_{T_5})}{(k+p_2)^2 - m_{T_5}^2} (\gamma^\mu) \frac{i(k_\mu \gamma^\mu + p_{1\mu} \gamma^\mu + m_{T_5})}{(k+p_1)^2 - m_{T_5}^2} (\gamma^\beta P_L) \frac{1}{k^2 - m_{Z'}^2} (g^{\alpha\beta} - \frac{k^\alpha k^\beta}{m_{Z'}^2}) u(p_1), \quad (10)$$

$$M_{5,Z'T_6T_6}^\mu = (i)^6 A_5^2 B_5 \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \bar{u}(p_2) (\gamma^\alpha P_L) \frac{(k_\mu \gamma^\mu + p_{2\mu} \gamma^\mu + m_{T_6})}{(k + p_2)^2 - m_{T_6}^2} (\gamma^\mu) \frac{i(k_\mu \gamma^\mu + p_{1\mu} \gamma^\mu + m_{T_6})}{(k + p_1)^2 - m_{T_6}^2} (\gamma^\beta P_L) \frac{1}{k^2 - m_{Z'}^2} \left( g^{\alpha\beta} - \frac{k^\alpha k^\beta}{m_{Z'}^2} \right) u(p_1), \quad (11)$$

$$M_{6,W'bb}^\mu = (-i)^6 A_6^2 B_6 \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \bar{u}(p_2) (\gamma^\alpha P_L) \frac{(k_\mu \gamma^\mu + p_{2\mu} \gamma^\mu + m_b)}{(k + p_2)^2 - m_b^2} \left( \gamma^\mu \left( \frac{2}{3} s_W^2 - P_L \right) \right) \frac{i(k_\mu \gamma^\mu + p_{1\mu} \gamma^\mu + m_b)}{(k + p_1)^2 - m_b^2} (\gamma^\beta P_L) \frac{1}{k^2 - m_{W'}^2} \left( g^{\alpha\beta} - \frac{k^\alpha k^\beta}{m_{W'}^2} \right) u(p_1), \quad (12)$$

$$M_{7,W'BB}^\mu = (i^6) A_7^2 B_7 \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \bar{u}(p_2) (\gamma^\alpha P_R) \frac{(k_\mu \gamma^\mu + p_{2\mu} \gamma^\mu + m_B)}{(k + p_2)^2 - m_B^2} (\gamma^\mu) \frac{(k_\mu \gamma^\mu + p_{1\mu} \gamma^\mu + m_B)}{(k + p_1)^2 - m_B^2} (\gamma^\beta P_R) \frac{1}{k^2 - m_{W'}^2} \left( g^{\alpha\beta} - \frac{k^\alpha k^\beta}{m_{W'}^2} \right) u(p_1), \quad (13)$$

$$M_{8,\sigma tt}^\mu = (-i^6) A_8^2 B_8 \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \bar{u}(p_2) \frac{(k_\mu \gamma^\mu + p_{2\mu} \gamma^\mu + m_t)}{(k + p_2)^2 - m_t^2} \left( \gamma^\mu \left( P_L - \frac{4}{3} s_W^2 \right) \right) \frac{(k_\mu \gamma^\mu + p_{1\mu} \gamma^\mu + m_t)}{(k + p_1)^2 - m_t^2} \frac{1}{k^2 - m_\sigma^2} u(p_1), \quad (14)$$

$$M_{9,A_0tt}^\mu = (-i^6) A_9^2 B_9 \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \bar{u}(p_2) \frac{(k_\mu \gamma^\mu + p_{2\mu} \gamma^\mu + m_t)}{(k + p_2)^2 - m_t^2} \left( \gamma^\mu \left( P_L - \frac{4}{3} s_W^2 \right) \right) \frac{(k_\mu \gamma^\mu + p_{1\mu} \gamma^\mu + m_t)}{(k + p_1)^2 - m_t^2} \frac{1}{k^2 - m_{A_0}^2} u(p_1), \quad (15)$$

$$M_{10,H_0tt}^\mu = (-i^6) A_{10}^2 B_{10} \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \bar{u}(p_2) \frac{(k_\mu \gamma^\mu + p_{2\mu} \gamma^\mu + m_t)}{(k + p_2)^2 - m_t^2} \left( \gamma^\mu \left( P_L - \frac{4}{3} s_W^2 \right) \right) \frac{(k_\mu \gamma^\mu + p_{1\mu} \gamma^\mu + m_t)}{(k + p_1)^2 - m_t^2} \frac{1}{k^2 - m_{H_0}^2} u(p_1), \quad (16)$$

En las amplitudes, las constantes de acoplamiento  $A_i$  y  $B_i$  que provienen de los vértices de Feynman se enumeran en la Tabla 1. Por otro lado,  $P_L$  y  $P_R$  representan a los conocidos proyectores de quiralidad. Con la finalidad de resolver las integrales que aparecen en las contribuciones enumeradas anteriormente, se usó el método de Passarino-Veltman con la ayuda de la paquetería FeynCalc de Mathematica. En este paquetería se implementaron las condiciones cinemáticas mencionadas anteriormente, así como la identidad de Gordón para eliminar los términos proporcionales a  $(p_2 + p_1)^\mu$ . Finalmente, se obtuvo el momento dipolar magnético débil anómalo a través de la relación  $a_t^W = -2 m_t F_M(q^2)$ . Se encontró también el factor de forma del momento dipolar eléctrico, que resultó ser cero. En este estudio no se reportan las expresiones obtenidas para  $a_t^W$  debido a que se obtuvieron ecuaciones realmente muy grandes, por lo que vez de ello preferimos reportar lo resultados numéricos que se realizará en la siguiente sección.

## RESULTADOS

Después de realizar los cálculos pertinentes se encontraron las expresiones que contribuyen al momento dipolar magnético débil anómalo del top,  $a_t^W$ . En este apartado mostramos los detalles para su evaluación numérica. Se usó el programa Package-X que nos ayuda a manipular eficazmente las funciones de Passarino-Veltman involucradas en estos procesos. Con esta paquetería encontramos los valores de los MDMDA, también fue necesario considerar los parámetros siguientes con sus valores respectivos:  $m_t = 172.76$  GeV,  $m_b = 4.18$  GeV,  $v = 246$  GeV,  $s_W^2 = 0.231$ , y  $\alpha = \frac{1}{137.04}$ .

El MDMDA del top también depende de varios parámetros que son propios del modelo BLH, como son las escalas de energía  $f$  y  $F$ , escalas de rompimiento de las simetrías globales. El BLH tiene la característica particular de estar construido sobre dos simetrías globales distintas que se rompen a escalas de energía diferentes, introduciendo de esta manera una ventaja sustancial sobre los otros modelos Little Higgs pues permite evadir las limitaciones impuestas por datos electrodébiles de precisión, y como consecuencia, los bosones de norma y los fermiones obtienen sus masas a escalas distintas. Con respecto a las escalas de energía  $f$  y  $F$ , la primera puede tomar valores en el intervalo  $700 < f < 3000$  GeV [6,7]; mientras que la segunda puede hacerlo en  $2000 < F < 6000$  GeV [6].

$A_i$	$B_i$
$A_1 = \frac{1}{2} g$	$B_1 = \frac{1}{2} \frac{g}{c_W}$
$A_2 = \frac{g v s_\beta (2y_1^2 - y_2^2) y_3}{4f Y_{1,2}^4 Y_{1,3}^2}$	$B_2 = \frac{1}{2} \frac{g}{c_W} (1 - \frac{4}{3} s_W^2)$
$A_3 = \frac{g v s_\beta y_3}{f Y_{1,3}}$	$B_3 = \frac{1}{2} \frac{g}{c_W} (1 + \frac{4}{3} s_W^2)$
$A_4 = \frac{g v s_\beta (2y_1^2 - y_2^2) y_2}{2f Y_{1,2} Y_{1,3}^2}$	$B_4 = \frac{2}{3} \frac{g s_W^2}{c_W}$
$A_5 = \frac{g v c_\beta y_2}{f Y_{1,2}}$	$B_5 = \frac{2}{3} \frac{g s_W^2}{c_W}$
$A_6 = \frac{g}{\sqrt{2}}$	$B_6 = \frac{1}{2} \frac{g}{c_W}$
$A_7 = \frac{g v s_\beta (2y_1^2 - y_2^2) y_3}{2\sqrt{2} f Y_{1,2}^4 Y_{1,3}^2}$	$B_7 = \frac{1}{2} \frac{g}{c_W} (1 - \frac{2}{3} s_W^2)$
$A_8 = \frac{v c_\beta y_t}{\sqrt{2} f}$	$B_8 = \frac{1}{2} \frac{g}{c_W}$
$A_9 = c_\beta y_t$	$B_9 = \frac{1}{2} \frac{g}{c_W}$
$A_{10} = s_\alpha y_t$	$B_{10} = \frac{1}{2} \frac{g}{c_W}$

Tabla 1. Constantes de acoplamiento de los vértices. Las notaciones usadas aquí son:  $c_W = \cos \theta_W$ ,  $s_W = \sin \theta_W$ ,  $c_\beta = \cos \beta$ ,  $s_\beta = \sin \beta$ ,  $y_t = \frac{m_t}{v \sin \beta}$  y  $Y_{1,i} = \sqrt{y_1^2 + y_i^2}$ .

Otros parámetros de entrada del modelo son los acoplamientos de Yukawa ( $y_i$ ,  $i = 1,2,3$ ), dichas variables  $y_i$  son redefinidas en términos de los ángulos de mezcla,  $\theta_{12}$  y  $\theta_{13}$  [7, 8, 9]. Los valores realistas para  $\theta_{12}$  y  $\theta_{13}$ , de acuerdo al estudio detallado realizado en las referencias [7] y [9] son:

$\theta_{12} = \pi/5$  y  $\theta_{13} = \pi/3$  para  $\tan \beta = \sqrt{3}$ . Con estos valores de  $\theta_{12}$  y  $\theta_{13}$  se genera una nueva cota superior a la escala de energía  $f$ , siendo  $f \leq 1500$  GeV. Este límite es tan necesaria pues hace que las masas de los compañeros del quark top no sean tan grandes, evitando así recurrir al ajuste fino en el sector del top. Para nuestro estudio, usaremos los valores hallados para  $\theta_{12}$  y  $\theta_{13}$ , que es consistente con valores experimentales. Y finalmente, con respecto a la masa del bosón de Higgs  $A_0$ , se elegirá para nuestro análisis los dos escenarios ya establecidos para  $m_{A_0}$ , esto es,  $m_{A_0} = 500$  GeV y  $m_{A_0} = 1000$  GeV [6].

En la actualidad, uno de los colisionadores futuros bastante prometedoras es el colisionador ILC [2, 3], esta máquina ofrece algunas ventajas considerables sobre un colisionador hadrónico como lo es el LHC, especialmente en realizar mediciones de precisión en el ME [3], así como generar un entorno experimental mucho más limpio. Los estudios de precisión de los quarks top forman una parte integral del programa del ILC, ya que está diseñado para funcionar a  $\sqrt{s} = 500$  GeV, y a esta energía de centro de masas el par de quarks top se produce en numerosas ocasiones muy por encima de  $2 m_t$ . Por las razones mencionadas anteriormente, en este presente trabajo se tomará  $\sqrt{s} = 500$  GeV. Para obtener las contribuciones numéricas de las ecuaciones (7) - (16) al MDMDA del top, se introducen los valores de los parámetros antes mencionados. Los resultados hallados se muestran en la Tabla 2 y Tabla 3, para  $m_{A_0} = 500$  GeV y  $m_{A_0} = 1000$  GeV [6], respectivamente. En estos casos, los MDMDA del top tienen dependencia con las escalas de energía  $f$  y  $F$ , ya que están involucrados partículas virtuales inherentes al modelo BLH. En cuanto a estas escalas de energía los valores que se le asignaron fueron  $f = 1000$  GeV y  $F = 3000$  GeV. Las simetrías globales en las que se basa el modelo BLH son rotas a estas escalas de energía.

$\sqrt{q^2} = 500$ GeV, $m_{A_0} = 500$ GeV, $\tan \beta = \sqrt{3}$ , $f = 1000$ GeV, $F = 3000$ GeV	
$Aff$	$(a_t^W)^{Aff}$
$Z'tt + Z'TT + Z'T^{2/3}T^{2/3} + Z'T_5T_5 + Z'T_6T_6$	$-1.42 \times 10^{-6} - 3.95 \times 10^{-8} i$
$W'bb + W'BB$	$4.01 \times 10^{-6} + 1.83 \times 10^{-7} i$
$\sigma_{tt}$	$-1.36 \times 10^{-7} - 6.85 \times 10^{-8} i$
$A_0tt$	$-2.66 \times 10^{-5} - 3.11 \times 10^{-5} i$
$H_0tt$	$-2.29 \times 10^{-5} - 2.66 \times 10^{-5} i$
<b>Total</b>	<b><math>-4.70 \times 10^{-5} - 5.76 \times 10^{-5} i</math></b>

Tabla 2. Contribuciones del MDMDA del top en el modelo BLH para  $m_{A_0} = 500$  GeV.

$\sqrt{q^2} = 500$ GeV, $m_{A_0} = 1000$ GeV, $\tan \beta = \sqrt{3}$ , $f = 1000$ GeV, $F = 3000$ GeV	
$Aff$	$(a_t^W)^{Aff}$
$Z'tt + Z'TT + Z'T^{2/3}T^{2/3} + Z'T_5T_5 + Z'T_6T_6$	$-1.42 \times 10^{-6} - 3.95 \times 10^{-8} i$
$W'bb + W'BB$	$4.01 \times 10^{-6} + 1.83 \times 10^{-7} i$
$\sigma_{tt}$	$-1.38 \times 10^{-7} - 6.97 \times 10^{-8} i$
$A_0tt$	$-1.26 \times 10^{-5} - 9.14 \times 10^{-6} i$
$H_0tt$	$-1.22 \times 10^{-5} - 8.81 \times 10^{-6} i$
<b>Total</b>	<b><math>-2.24 \times 10^{-5} - 1.79 \times 10^{-5} i</math></b>

Tabla 3. Contribuciones del MDMDA del top en el modelo BLH para  $m_{A_0} = 1000$  GeV.

## CONCLUSIONES

En este trabajo se calcularon las diferentes contribuciones al MDMDA del quark top en el escenario del modelo BLH. Nuestros resultados muestran que la contribución numérica total al MDMDA es del orden de  $10^{-5}$ . A partir de los datos numéricos proporcionados por las Tablas 2 y 3, se observa que el MDMDA parece tener una dependencia casi insignificante con la masa del escalar de Higgs  $A_0$ . Con respecto al límite obtenido en este trabajo, está suprimido a un orden de magnitud menor que lo predicho por [4, 10], ellos obtuvieron  $10^{-4}$  en el marco del ME. Otro resultado importante de este trabajo fue demostrar que el factor de forma eléctrico es cero a nivel de un lazo, lo que equivale a que la carga eléctrica del quark top no recibe correcciones radiativas.

Hasta el momento no hay datos experimentales que confirmen la existencia de las propiedades débiles del quark top. Sin embargo, están siendo investigados intensamente en los colisionadores como el LHC y el ILC a partir de la producción de  $Z\bar{t}t$  [1, 11]. En el LHC, en un futuro cercano, el momento dipolar magnético débil del top se espera sea acotado a  $|a_t^W| \leq 0.15$  [1] con  $300 \text{ fb}^{-1}$  de datos, aunque podría alcanzar una precisión significativa de hasta  $|a_t^W| \leq 0.08$  [1] cuando esta máquina alcance los  $3000 \text{ fb}^{-1}$  de luminosidad integrada. Mientras que en el ILC, se proyecta que el MDMDA se mida con una precisión de hasta  $-0.02 < a_t^W < 0.04$  a 95 % C.L. [1, 11] cuando este colisionador funcione a una energía de centro de masa  $\sqrt{s} = 500 \text{ GeV}$  y a  $500 \text{ fb}^{-1}$  de datos. Quizás solo tengamos que esperar un poco para que el LHC o futuros colisionadores alcancen la sensibilidad suficiente para comprobar la veracidad de los límites generados en la literatura del MDMDA del top.

## BIBLIOGRAFÍA

1. R. Röntsch and M. Schulze, JHEP **08**, 044 (2015).
2. T. Behnke, J. E. Brau, B. Foster, J. Fuster, M. Harrison, J. M. Paterson, M. Peskin, M. Stanitzki, N. Walker and H. Yamamoto, "The International Linear Collider Technical Design Report - Volume 1: Executive Summary", arXiv:1306.6327 [physics.acc-ph].
3. H. Baer, T. Barklow, K. Fujii, Y. Gao, A. Hoang, S. Kanemura, J. List, H. E. Logan, A. Nomerotski, M. Perelstein, M. E. Peskin, R. Pöschl, J. Reuter, S. Riemann, A. Savoy-Navarro, G. Servant, T. M. P. Tait and J. Yu, "The International Linear Collider Technical Design Report - Volume 2: Physics", arXiv:1306.6352 [hep-ph].
4. W. Hollik, J. I. Illana, S. Rigolin, C. Schappacher and D. Stockinger, Nucl. Phys. B **551**, 3-40 (1999).
5. A. Czarnecki and B. Krause, Acta Phys. Polon. B **28**, 829-834 (1997).
6. P. Kalyniak and K. Moats. Phys. Rev. D **91**, 013010 (2015).
7. S. Godfrey, T. Gregoire, P. Kalyniak, T. A. W. Martin, and K. Moats, JHEP **04**, 032 (2012).
8. W. Altmannshofer and D. M. Straub, JHEP **09**, 078 (2010).
9. K. P. Moats, "Phenomenology of Little Higgs models at the Large Hadron Collider," doi:10.22215/etd/2012-09748.
10. J. Bernabeu, D. Comelli, L. Lavoura and J. P. Silva, Phys. Rev. D **53**, 5222-5232 (1996).
11. C. Englert and M. Russell, Phys. J. C **77**, no.8, 535 (2017).

## FUNCIONES DE RITUS PARA EL GRAFENO EN UN CAMPO MAGNÉTICO CONSTANTE GENERADAS POR OPERADORES DE ENRELAZAMIENTO A PRIMER ORDEN

Yajaira Concha Sánchez<sup>1</sup>, Erik Díaz Bautista<sup>2</sup>, Alfredo Raya Montaña<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Facultad de Ingeniería Civil, UMSNH, <sup>2</sup>Departamento de Formación Básica Disciplinaria, Unidad Profesional Interdisciplinaria de Ingeniería Campus Hidalgo, IPN, <sup>3</sup> Instituto de Física y Matemáticas, UMSNH.  
yajaira.concha@umich.mx.

### RESUMEN

En este trabajo, estudiamos el propagador de electrones en el grafeno para el caso de un campo magnético constante externo. En presencia de campos electromagnéticos externos, los estados asintóticos del grafeno ya no son ondas planas y, por lo tanto, el propagador en la base de los estados propios de momentos tiene una forma más intrincada. Construimos el propagador de grafeno en presencia de un campo magnético constante externo generado por operadores entrelazados de primer orden, considerando que el campo magnético es ortogonal a la membrana de grafeno. A partir del caso bien estudiado del campo magnético uniforme sin entrelazamiento, generamos perfiles de campos no triviales a partir de operadores entrelazados de primer orden. Para el campo magnético constante construimos las funciones propias de Ritus que corresponden a estados asintóticos del grafeno en presencia de dichos campos magnéticos.

### INTRODUCCIÓN

Comenzamos nuestra discusión de la construcción del propagador de fermiones en campos magnéticos externos dentro del formalismo de Ritus. Tal construcción es relevante para el grafeno monocapa y otros materiales 2D para los cuales los portadores de carga se comportan como fermiones de Dirac. Consideramos un campo magnético que apunta perpendicularmente al plano de movimiento de los electrones, de tal manera que trabajando en la norma de Landau,  $A^\mu = (\mathbf{0}, \mathbf{0}, W_0(x))$ , donde  $W_0(x)$  es una función tal que  $W'_0(x) = \partial_x W_0(x)$  define el perfil del campo. En presencia de un campo electromagnético, la función de Green satisface

$$((\boldsymbol{\gamma} \cdot \boldsymbol{\Pi}) - m)G(\mathbf{z}, \mathbf{z}') = \delta^{(3)}(\mathbf{z} - \mathbf{z}'), \quad (1)$$

con  $z = (t, x, y)$ ,  $\boldsymbol{\gamma}$  denotando las matrices de Dirac,  $\Pi_\mu = \partial_\mu - iA_\mu$  es el momento cánico, y  $e$  es la carga elemental. Además, para el grafeno monocapa cuando la masa  $m$  desaparece, se convierte en un parámetro relevante en otros sistemas, y por eso lo mantenemos finito. Dado que  $G(\mathbf{z}, \mathbf{z}')$  conmuta con  $(\boldsymbol{\gamma} \cdot \boldsymbol{\Pi})^2$ , expandemos el propagador sobre la base de las funciones propias del último, es decir,

$$(\boldsymbol{\gamma} \cdot \boldsymbol{\Pi})^2 \mathbb{E}_p(\mathbf{z}) = p^2 \mathbb{E}_p(\mathbf{z}), \quad (2)$$

donde  $\mathbb{E}_p(\mathbf{z})$  son las matrices de transformación y  $p^2$  puede ser cualquier número real. La ecuación (2) es una ecuación de valores propios para las matrices  $\mathbb{E}_p(\mathbf{z})$ , a las que nos referiremos como funciones propias de Ritus. Se puede verificar directamente que las funciones  $\mathbb{E}_p(\mathbf{z})$  cumplen las relaciones de cerradura y completas

$$\int dz \bar{\mathbb{E}}_{p'}(z) \mathbb{E}_p(z) = \mathbb{I} \delta(p - p'),$$

$$\int dz \mathbb{E}_p(z') \bar{\mathbb{E}}_p(z) = \mathbb{I} \delta(z - z'), \quad (3)$$

con  $\bar{\mathbb{E}}_p(z) = \gamma^0 \mathbb{E}_p^*(z) \gamma^0$  y  $\mathbb{I}$  es una matriz unitaria de tamaño  $2 \times 2$ . Explícitamente, tenemos que el operador

$$(\gamma \cdot \Pi)^2 = \gamma^\mu \gamma^\nu \Pi_\mu \Pi_\nu = \Pi^2 + \frac{e}{2} \sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu}, \quad (4)$$

donde  $F_{\mu\nu}$  es el tensor de intensidad de campo y  $\sigma^{\mu\nu} = \frac{i[\gamma^\mu, \gamma^\nu]}{2}$ . Para un campo magnético estático que apunta perpendicularmente al plano, los únicos componentes que no desaparecen de estos tensores son

$$F_{12} = -F_{21} = W'(x), \quad \sigma^{12} = \sigma_3. \quad (5)$$

Entonces, la ecuación de valores propios (2) se convierte en

$$(\Pi^2 + e\sigma_3 W_0'(x)) \mathbb{E}_p(z) = p^2 \mathbb{E}_p(z), \quad (6)$$

de donde observamos que las funciones propias de Ritus son en realidad matrices, cuya forma explícita es

$$\mathbb{E}_p(z) = \begin{pmatrix} E_{p,+1}(z) & 0 \\ 0 & E_{p,-1}(z) \end{pmatrix}, \quad (7)$$

donde el subíndice  $p = (p_0, p_2, k)$  es un vector que denota los valores propios de los operadores  $i\partial_t$ ,  $-i\partial_y$ , y  $\mathcal{H}_\sigma$ , respectivamente. Es decir, las componentes del vector  $p$  son los números tales que

$$i\partial_t \mathbb{E}_p(z) = p_0 \mathbb{E}_p(z), \quad i\partial_y \mathbb{E}_p(z) = 2 \mathbb{E}_p(z), \quad \mathcal{H}_\sigma \mathbb{E}_p(z) = k \mathbb{E}_p(z), \quad (8)$$

con  $\mathcal{H}_\sigma = -(\gamma \cdot \Pi)^2 + \Pi_0^2$ . Estos valores propios nos permiten escribir la función escalar como

$$E_{p,\sigma}(z) = e^{-i(p_0 t - p_2 y)} F_{k,p_2,\sigma}(x), \quad (9)$$

donde  $\sigma = \pm 1$  son los valores propios de  $\sigma_3$  y las funciones  $F_{k,p_2,\sigma}(x)$  satisfacen

$$\left[ -\partial_x^2 + (p_2 + eW_0(x))^2 - e\sigma W_0'(x) \right] F_{k,p_2,\sigma} = k F_{k,p_2,\sigma}, \quad (10)$$

que corresponde a un Hamiltoniano de Pauli para una partícula de masa  $m = 1/2$  y factor giromagnético  $g = 2$  con un potencial vectorial restringido que lo hace supersimétrico en el sentido en la Mecánica Cuántica. Por lo tanto,  $F_{k,p_2,\sigma}(x)$  son las soluciones de las ecuaciones de Schrödinger en (10) asociadas a cada uno de los potenciales supersimétrico-compañero.

$$V_0^\sigma(x) = (p_2 + eW_0(x))^2 - e\sigma W_0'(x). \quad (11)$$

A partir de ahora, fijamos el valor  $\sigma = 1$ . Entonces, tenemos los ingredientes necesarios para construir las funciones propias de Ritus a partir de un formalismo supersimétrico de primer orden. Ahora, para configurar la escena del marco supersimétrico de segundo orden a partir de operadores entrelazados, notamos que los Hamiltonianos  $\mathcal{H}_\sigma$  se pueden factorizar de la siguiente manera:

$$\mathcal{H}_\mp = L_0^\mp L_0^\pm, \quad (12)$$

donde los operadores de entrelazamiento satisfacen las relaciones

$$\mathcal{H}_{\mp} L_0^{\mp} = L_0^{\mp} \mathcal{H}_{\pm}, \quad (13)$$

y son explícitamente dados por

$$L_0^{\pm} = \mp \frac{d}{dx} + W_0(x). \quad (14)$$

La acción de los operadores de entrelazamiento  $L_0^{\pm}$  en las soluciones de los Hamiltonianos (10) es

$$F_{n,p_2,-1}(x) = \frac{L_0^- F_{n+1,p_2,+1}}{\sqrt{k_{n+1}^+}}, \quad F_{n+1,p_2,+1}(x) = \frac{L_0^+ F_{n,p_2,-1}}{\sqrt{k_n^-}}, \quad (15)$$

donde el estado fundamental, el cual es aniquilado por el operador  $L_0^-$ , queda como

$$F_{0,p_2,+1}(x) \sim e^{-\int W_0(x) dx}. \quad (16)$$

Esta observación implica que podemos escribir

$$W_0(x) = -\frac{(F_{0,p_2,+1}(x))'}{F_{0,p_2,+1}(x)}. \quad (17)$$

Por lo tanto, los niveles de energía de  $\mathcal{H}_{\pm}$  resultan ser

$$k_n^- = k_{n+1}^+, \quad k_0^+ = 0. \quad (18)$$

Estas expresiones indican que las funciones propias y los valores propios del problema se pueden encontrar a través de los operadores  $L_0^{\pm}$ , lo que simplifica los cálculos ya que esto involucra solo derivadas de primer orden. El perfil del campo magnético  $B_0(x)$  se puede relacionar con el potencial electromagnético  $A_{\mu}(z)$ , el superpotencial  $W_0(x)$ , y el estado fundamental de  $\mathcal{H}^+$  de la siguiente manera:

$$B_0(x) = A_2'(x) = \frac{1}{e} W_0'(x) = -\frac{1}{e} \frac{d^2}{dx^2} \{\ln[F_{0,p_2,+1}(x)]\}. \quad (19)$$

Este es el punto de partida del marco de supersimetría de segundo orden que discutimos a continuación.

## TEORÍA

En esta sección presentamos el formalismo supersimétrico de segundo orden para generar campos magnéticos no homogéneos a partir de operadores entrelazados. Seguimos de cerca la discusión de la Referencia [6]. El primer paso del método consiste en desplazar la energía del Hamiltoniano  $\mathcal{H}_+$  como sigue:

$$\widetilde{\mathcal{H}}_0 \equiv \mathcal{H}_+ - \epsilon_1 = -\frac{d^2}{dx^2} + V_+(x) - \epsilon_1, \quad (20)$$

así que  $\widetilde{V}_0(x) = V_+(x) - \epsilon_1$ , donde  $\epsilon_1 \leq k_0^+ = 0$ .

El segundo paso es construir un nuevo Hamiltoniano  $\mathcal{H}_1$  partiendo de  $\widetilde{\mathcal{H}}_0$  a través de la relación de entrelazamiento:

$$\mathcal{H}_1 L_1^+ = L_1^+ \widetilde{\mathcal{H}}_0 \quad (21)$$

donde  $\mathcal{H}_1$  y  $L_1^\pm$  están dados por

$$\mathcal{H}_1 = -\frac{d^2}{dx^2} + V_1(x, \epsilon_1), \quad L_1^\pm = \mp \frac{d}{dx} + W_1(x, \epsilon_1), \quad (22)$$

respectivamente, que implica  $\widetilde{\mathcal{H}}_0 = L_1^- L_1^+$  y  $\mathcal{H}_1 = L_1^+ L_1^-$ . Esto lleva a las siguientes relaciones para  $W_1$  y  $V_1$  derivadas de  $V_0$ ,

$$W_1^2(x, \epsilon_1) + W_1'(x, \epsilon_1) = \widetilde{V}_0(x), \quad (23)$$

$$V_1(x, \epsilon_1) = \widetilde{V}_0(x) - 2W_1'(x, \epsilon_1). \quad (24)$$

Supongamos ahora que podemos escribir  $W_1(x, \epsilon_1) = \frac{(u_1^{(0)})'}{u_1^{(0)}}$ . Entonces, tenemos que para  $u_1$

$$-(u_1^{(0)})'' + \widetilde{V}_0(x)u_1^{(0)} = 0. \quad (25)$$

El campo magnético correspondiente que da lugar a  $V_1(x, \epsilon_1)$  se obtiene de

$$B_1(x, \epsilon_1) = \frac{1}{e} \frac{dW_1(x, \epsilon_1)}{dx} = -B_0(x) - \frac{1}{e} \frac{d^2}{dx^2} \left\{ \ln \left[ \frac{F_{0,p_2+1}}{u_1^{(0)}} \right] \right\}. \quad (26)$$

El tercer paso del método es identificar las funciones propias y los valores propios del nuevo sistema. Los niveles de energía para  $\widetilde{\mathcal{H}}_0$  y  $\mathcal{H}_1$  son los de  $\mathcal{H}_+$ , desplazados por la cantidad  $-\epsilon_1$ , más el estado fundamental de  $\mathcal{H}_1$  a energía cero

$$\widetilde{k}_n^{(0)} = k_n^+ - \epsilon_1, \quad (27)$$

$$k_0^{(1)} = 0, \quad k_{n+1}^{(1)} = \widetilde{k}_n^{(0)}, \quad n = 0, 1, \dots, \quad (28)$$

con  $\epsilon_1 \leq k_0^+ = 0$ . Las funciones propias desconocidas asociadas con estas energías vienen dadas por:

$$F_{0,p_2}^{(1)}(x) \sim \frac{1}{u_1^{(0)}}, \quad F_{n+1,p_2}^{(1)}(x) = \frac{1}{\sqrt{\widetilde{k}_n^{(0)}}} L_1^+ F_{n,p_2+1}(x). \quad (29)$$

donde las funciones propias  $F_{n,p_2+1}(x)$  de  $\mathcal{H}_+$ , y consecuentemente las de  $\widetilde{\mathcal{H}}_0$ , se asumen que son conocidas. Además, el estado fundamental de  $\mathcal{H}_1$  cumple los requisitos de la condición  $L_1^- F_{0,p_2}^{(1)}(x) = 0$ . A continuación analizamos en detalle el ejemplo de perfil de campo magnético: el campo homogéneo.

## RESULTADOS

Primero, consideremos un campo magnético uniforme, para el cual el potencial vectorial es

$$\mathbf{A}(x) = B_0 x \mathbf{y}, \quad (30)$$

y el superpotencial correspondiente se lee como

$$W_0(x) = \frac{\omega}{2} x + p_2, \quad \omega = 2eB_0. \quad (31)$$

De esta función, obtenemos el potencial de supercompañero que da explícitamente

$$\mathcal{H}_+ = -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{\omega^2}{4} \left(x + \frac{2p_2}{\omega}\right)^2 - \frac{\omega}{2}, \quad (32)$$

y sus energías propias que corresponden a las del oscilador armónico cuántico

$$k_n^+ = \omega n, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (33)$$

mientras que las correspondientes funciones propias pueden ser expresadas como

$$F_{n,p_2,+1}(x) = N_n e^{-\frac{\omega}{4} \left(x + \frac{2p_2}{\omega}\right)^2} H_n \left[ \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(x + \frac{2p_2}{\omega}\right) \right], \quad (34)$$

con  $N_n = \sqrt{\frac{1}{2^n n!} \left(\frac{\omega}{2\pi}\right)^{1/2}}$  siendo la constante de normalización y  $H_n(x)$  son los polinomios de Hermite. Definiendo la cantidad adimensional

$$\eta(x) \equiv \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left(x + \frac{2p_2}{\omega}\right), \quad (35)$$

simplificamos las funciones propias como

$$F_{n,p_2,+1}(x) = N_n e^{-\frac{\eta^2}{2}} H_n(\eta). \quad (36)$$

A continuación, queremos construir un perfil de campo magnético diferente a partir del caso uniforme de nuestro formalismo. Como se indicó anteriormente, el primer paso es cambiar la energía de  $\mathcal{H}_+$  de la siguiente manera:

$$\tilde{\mathcal{H}}_0 = -\frac{\omega}{2} \frac{d^2}{d\eta^2} + \frac{\omega\eta^2}{2} - \frac{\omega}{2} - \epsilon_1, \quad (37)$$

con  $\epsilon_1 \leq k_0^+ = 0$ . A partir de aquí, podemos obtener fácilmente  $W_1(x, \epsilon_1)$  y, en consecuencia,  $V_1(x, \epsilon_1)$ . Entonces, a partir del reemplazo  $\frac{W_1(x, \epsilon_1) = (u_1^{(0)})'}{u_1^{(0)}}$ , inferimos fácilmente que

$$u_1^{(0)} = e^{-\eta^2/2} \left( {}_1F_1 \left[ a, \frac{1}{2}, \eta^2 \right] + 2\nu_1 \frac{\Gamma(a+1/2)}{\Gamma(a)} \eta {}_1F_1 \left[ a + \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \eta^2 \right] \right), \quad (38)$$

con  $a = \epsilon_1/(2\omega)$ ,  $\nu_1 \in (-1, 1)$ . Para mayor precisión y comparación con los hallazgos de la Referencia [6], elegimos los parámetros  $\epsilon_1 = -\omega/5$  y  $\nu_1 = 0$ , tenemos:

$$W_1(\eta, \epsilon_1) = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \eta \left( -1 + \frac{2}{5} \frac{{}_1F_1 \left[ \frac{11}{10}, \frac{3}{2}, \eta^2 \right]}{{}_1F_1 \left[ \frac{1}{10}, \frac{1}{2}, \eta^2 \right]} \right), \quad (39)$$

$$V_1(\eta, \epsilon_1) = \tilde{V}_0 - \sqrt{2\omega} \frac{d}{d\eta} \left[ \sqrt{\frac{\omega}{2}} \eta \left( -1 + \frac{2}{5} \frac{{}_1F_1\left[\frac{11}{10}, \frac{3}{2}, \eta^2\right]}{{}_1F_1\left[\frac{1}{10}, \frac{1}{2}, \eta^2\right]} \right) \right], \quad (40)$$

$$B_1(\eta, \epsilon_1) = -B_0 + \frac{B_0 \sqrt{2\omega}}{5} \frac{d}{d\eta} \left[ \sqrt{\frac{\omega}{2}} \eta \frac{{}_1F_1\left[\frac{11}{10}, \frac{3}{2}, \eta^2\right]}{{}_1F_1\left[\frac{1}{10}, \frac{1}{2}, \eta^2\right]} \right]. \quad (41)$$

Entonces, las energías propias del sistema son explícitamente

$$k_0^{(1)} = 0, \quad k_{n+1}^{(1)} = \omega \left( n + \frac{1}{5} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (42)$$

mientras los correspondientes valores propios de Ritus, tomando en cuenta (9), están dados por:

$$E_{n+1,p}^{(1)}(\eta, y, t) \sim e^{-i(p_0 t - p_2 y)} \frac{e^{\frac{\eta^2}{2}}}{{}_1F_1\left[\frac{1}{10}, \frac{1}{2}, \eta^2\right]}, \quad (43)$$

$$E_{n+1,p}^{(1)}(x, y, t) = e^{-i(p_0 t - p_2 y)} F_{n+1,p_2}^{(1)} = \frac{e^{-i(p_0 t - p_2 y)}}{\sqrt{2\left(n + \frac{1}{5}\right)}} \left( \frac{2\eta}{5} \frac{{}_1F_1\left[\frac{11}{10}, \frac{3}{2}, \eta^2\right]}{{}_1F_1\left[\frac{1}{10}, \frac{1}{2}, \eta^2\right]} F_{n,p_2+1} - \sqrt{2n} F_{n-1,p_2+1} \right), \quad (44)$$

para  $n = 0, 1, 2, \dots$ . Insertando estas expresiones en la ecuación (7), obtenemos las funciones propias de Ritus para un campo magnético constante para que el grafeno entrelazado a primer orden.

## CONCLUSIONES

En este trabajo presentamos las funciones propias de Ritus para el grafeno para el caso de un campo magnético constante con operadores de entrelazamiento a primer orden. Esperamos deseablemente que este trabajo sirva de guía a colegas interesados en el desarrollo teórico del grafeno. En un futuro próximo, deseamos llevar a cabo el cálculo de las funciones de Ritus para el grafeno en el caso de un campo magnético constante con operadores de entrelazamiento a segundo orden.

## BIBLIOGRAFÍA

1. A. Raya and E. Reyes, "Fermion condensate and vacuum current density induced by homogeneous and inhomogeneous magnetic fields in (2 + 1) dimensions", *Phys. Rev. D*, Vol. 82, Jul 2010, p. 016004.
2. G. Murguía, A. Raya, A. Sánchez, and E. Reyes, "The electron propagator in external electromagnetic fields in low dimensions", *American Journal of Physics*, Vol. 78, no. 7, 2010, pp. 700-707.
3. M. Castillo-Celeita and D. J. Fernández C, "Dirac electron in graphene with magnetic fields arising from first-order intertwining operators", *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, Vol. 53, Jan 2020, p. 035302.
4. V. I. Ritus, "Diagonality of electron mass operator in a constant field", *Pisma Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, Vol. 20, 1974, pp. 135-138.
5. V. I. Ritus, "Eigenfunction method and mass operator in the quantum electrodynamics of a constant field", *Pisma Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, Vol. 75, 1978, pp. 1560-1583.
6. V. Ritus, "Radiative corrections in quantum electrodynamics with intense field and their analytical properties", *Annals of Physics*, Vol. 69, no. 2, 1972, pp. 555-582.

## DETERMINAR UN PROCESO PARA LA EXTRACCIÓN DEL LÍQUIDO DE LA PLANTA JATROPHA DIOICA MEDIANTE MODELOS ESTADÍSTICOS

Hilda Cristina Martínez Tovar<sup>1</sup>, Rubí Alcalá González<sup>1</sup>, Luz Nayeli Ponce Treviño<sup>2</sup>, Lizeth Deyanira Lugo Piña<sup>2</sup>, María Esther Amador Rocha<sup>2</sup>, Jennifer Yazmin Castro Cena<sup>2</sup>, Brayna De Hoyos De León<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Instituto Tecnológico de Estudios Superiores de la Región Carbonífera, <sup>2</sup>Alumna del Instituto Tecnológico de Estudios Superiores de la Región Carbonífera  
2220@rcarbonifera.tecnm.mx

### RESUMEN

La presente investigación consiste en el estudio realizado para definir un proceso para la extracción de una sustancia líquida con cierta viscosidad de la planta *Jatropha dioica*.

*Jatropha dioica* es una planta originaria de México, también comúnmente conocida como sangre de drago, sangre de grado o sangre gado. Es un arbusto de 50 cm a 1.50 m de altura y debe su nombre común a que tiene un jugo incoloro que cambia a una tonalidad rojizo oscuro al contacto con el aire. (BDMTM, 2009)

La Sangre de drago se usa de manera muy extensa en la medicina tradicional, principalmente en las regiones áridas de México. Entre los muchos usos que se le da es como ingrediente en shampoo para combatir la caída del cabello. El objetivo del estudio es el de determinar un proceso para extraer la sangre de drago; derivada de la planta *Jatropha dioica*. El diseño metodológico desarrollado es de tipo experimental analizando 3 variables que son el tipo de método de extracción, grosor de la raíz, cortes de la raíz y la cantidad de sangre de drago en mililitros que es la variable de salida obtenida de la planta en estudio; las variables son sometidas a experimentación utilizando modelos estadísticos, haciendo uso específicamente de la metodología Taguchi. De acuerdo con el periodo en que es realizado el estudio, la investigación es retrospectivo parcial, ya que esta investigación es el tipo de estudio que cuenta con una parte de la información recabado en otras fuentes y otra obtenida al momento de la experimentación. Por la evolución del fenómeno en estudio la investigación es transversal, ya que es una investigación sobre un problema durante un periodo específico.

Durante la experimentación fue utilizado un modelo  $L_4 2^3$  lo que significa que se desarrollaron 4 pruebas, con 2 niveles de cada una de las variables de entrada, y 3 factores que representan a las variables de entrada, método de extracción (método 1: infusión, método 2: maceración), cantidad de agua (200 ml y 100 ml), corte de raíz (10 trozos y 5 trozos). Obteniendo con el estudio realizado las condiciones óptimas para obtener una mayor cantidad de la sustancia sangre de drago utilizando el método de extracción 1 que es el método de extracción por infusión, con 200 mililitros de agua y corte de raíz de 10 trozos, con estas condiciones se extraen 173.33 mililitros. Así mismo se realizó un análisis de varianza para medir la significancia de los factores, por lo que concluimos que el método de extracción no influye en cambio la cantidad de agua y los cortes de raíz si representan variación en la cantidad de sangre de drago obtenida.

Con la investigación desarrollada se pudo determinar las condiciones óptimas para la extracción de la sustancia generada de la planta *Jatropha dioica* la cual ofrece un proceso para la obtención de sangre de drago para ser utilizada en procesos de elaboración de productos artesanales.

### INTRODUCCIÓN

Esta investigación se hace con el fin de determinar un método para la extracción de una sustancia obtenida de la planta *Jatropha dioica*. Es una planta poco conocida de la región, el propósito es poder obtener la sustancia conocida como sangre de drago para utilizarla en la elaboración de un shampoo para el crecimiento del cabello. Al investigar pudimos encontrar que existen diferentes maneras de extraer el líquido de la planta y nosotros nos tomamos a la tarea de hacer una investigación de los procesos de extracción más efectivos.

En México y otros países el tema de la calvicie es preocupante, afectando a personas de todas las clases sociales. Se sabe que el cabello cumple una función importante en el ser humano y mejora la apariencia personal pues cumple una función protectora. Por ello es necesario buscar sustancias naturales de plantas que puedan estimular el crecimiento de cabello y fortalecer los folículos pilosos para evitar o retardar la pérdida de cabello.

La planta *Jatropha Dioica* es un elemento natural que no daña el medio ambiente y tiene grandes beneficios para nuestro cabello. Al tener una manera viable de extracción de la sangre de drago con un análisis estadístico obtenemos un método efectivo de extracción.

## TEORÍA

1. La Sangre de drago pertenece a la familia de las Euforbiáceas (Euphorbiaceae); dentro del género *Jatropha* se clasifican alrededor de 180 especies; el nombre del género (*Jatropha*) deriva del griego “iatros” (doctor o sanador) y “trophe” (alimento o nutrición).
2. La Sangre de Drago es un látex de sabor astringente, está compuesta por sustancias diversas como heterósidos, tanino, ácido benzoico, celulosa y resina dragocoresina compuesta por ésteres de alcohol re sínicos, ácido benzilacético y alcaloides, entre los que resalta la taspina (Gallardo Vazquez & Barboza Mejia, 2015)
3. *Jatropha dioica* es una planta originaria de México, también comúnmente conocida como sangre de drago, sangre de grado o sangre gado. Es un arbusto de 50 cm a 1.50 m de altura y debe su nombre común a que tiene un jugo incoloro que cambia a oscuro al contacto con el aire. (Mexicana., 2009)
4. *Jatropha dioica* es una especie muy poco estudiada. Las únicas investigaciones que existen se han hecho por científicos mexicanos en colaboración con extranjeros, siendo relativamente antiguas. Sin embargo, de la raíz se han identificado tres diterpenos, la citlaltiriona, jatrofona, y riolosatriona y un esteral, el R-sitosterol. De las raíces se obtiene un aceite esencial, resina, saponinas, un alcaloide y ácido oxálico. De los tallos emana un látex rico en taninos. Además, se ha demostrado que extractos acuosos de la raíz ejercen una actividad antibiótica contra *Staphylococcus aureus*. (Mexicana., 2009)
5. Sangre de Drago es el nombre que recibe la resina (látex) que sale al cortar la corteza de algunas especies de árboles ((Gallardo Vazquez & Barboza Mejia, 2015)
6. Sangre de Drago o Grado tiene un jugo incoloro que cambia a oscuro al contacto con el aire. Sus ramas son de color rojizo-moreno. Con las hojas más largas que anchas. Sus flores son pequeñas y en grupos de color rosa. Los frutos globosos de 1.5 cm de largo y tienen una semilla (Gallardo Vazquez & Barboza Mejia, 2015)

El uso medicinal que con mayor frecuencia se da a *jatropha dioica* es para evitar la caída del cabello para lo cual se cuecen los tallos, la planta entera o la raíz machacada en agua, y con este líquido se enjuaga el cabello después de lavarlo. Otra forma de uso es hervir la planta para aplicarla en forma de cataplasma, o bien sólo se cuece (Mexicana., 2009)

Considerando los estudios químicos y farmacológicos realizados en nuestro país y el extranjero sobre esta planta, se ha encontrado reiteradas evidencias de su acción cicatrizante antiinflamatoria, por lo que es conveniente la aplicación bajo una forma farmacéutica adecuada de uso tópico en humanos. Este trabajo se da por la necesidad diaria y creciente utilización de productos naturales en el tratamiento de diferentes tipos de enfermedades y además de elaborar productos extemporáneos que puedan satisfacer las necesidades de salud de la población, por ende, se busca impulsar el uso de tratamientos naturales y así usar nuevas alternativas terapéuticas efectivas y sin efectos colaterales en la salud.

En la actualidad, las bajas condiciones económicas y la poca accesibilidad de la población a instituciones de salud, permite revalorar el uso de plantas medicinales con acciones paliativas, preventivas o curativas sobre algunas afecciones o síntomas. Dentro de estos productos se encuentra la sangre de drago, producto natural dadas sus propiedades desinflamantes, cicatrizantes y antiulcerosas, lo convierten en un producto industrializable y exportable. (Gallardo Vazquez & Barboza Mejia, 2015)

Esta planta sangre de grado (*Jatropha dioica*) habita en climas áridos o semiáridos, se usa en medicina tradicional y podría utilizarse como materia prima industrial, por lo cual tiene importancia económica para los pobladores rurales. Aspectos básicos sobre su distribución y abundancia se desconocen, así como los factores ambientales que las determinan. El objetivo de este estudio fue determinar su distribución, abundancia y las variables que influyen en su densidad de tallos, altura y biomasa de tallos (Cisneros, 2019).

Las plantas medicinales han sido utilizadas en la práctica médica durante miles de años como principal recurso en los sistemas médicos tradicionales haciendo una gran contribución al mantenimiento de la salud humana, actualmente los países en desarrollo se basan en las plantas medicinales para satisfacer sus necesidades de salud.

La especie *Jatropha dioica*, se encuentra distribuida abundantemente en el desierto mexicano y es ampliamente usada en la medicina tradicional de este país. Sin embargo, es una especie de la cual se desconoce gran parte de sus compuestos químicos, los cuales brindan las propiedades curativas. Así mismo se describen los usos endémicos que se le dan a esta planta y se detallan algunas propiedades de sus principales compuestos fotoquímicos, con la finalidad de concientizar a la comunidad lectora de los beneficios y oportunidades de ser empleados si se investigan a profundidad, siendo las enfermedades microbianas un ejemplo de aplicación. (Wong, 2015)

Dichas propiedades se deben a que el sangrado posee sustancias como ácido benzoico, heterósidos, celulosa, resina dragocoresina, etcétera. Cabe señalar que también ayuda a tratar problemas digestivos, pues estimula la formación de mucosa gástrica (Cisneros, 2019).

Con el nombre de Sangre de drago se conocen alrededor de una docena de especies en México, principalmente la *Jatropha dioica* y *Crotón drago* la cual también desprende un líquido rojizo al hacerle cortes y pertenece a la misma familia (*Euphorbiaceae*) por lo que la confusión suele ser frecuente (Cisneros, 2019).

La Sangre de drago se usa de manera muy extensa en la medicina tradicional, principalmente en las regiones áridas de México. En algunos municipios de Zacatecas, existen comunidades rurales que producen y comercializan en muy pequeña escala, un shampoo de Sangre de drago para combatir la caída del cabello produciéndolo de manera sustentable pues sólo cortan un trozo de la planta permitiendo que vuelva a crecer (Cisneros, 2019).

### **Método Taguchi**

Un experimento es un procedimiento mediante el cual se trata de comprobar (confirmar o verificar) una o varias hipótesis relacionadas con un determinado fenómeno, mediante la manipulación y el estudio de las variables que presumiblemente son su causa. Se utiliza para describir cualquier proceso que genere un conjunto de datos (Escalante, 2005).

El (DOE) se puede definir como un conjunto de técnicas estadísticas usadas para planear experimentos y analizar sus resultados de manera ordenada y eficiente.

### **Existen tres principios básicos a ser considerados en todo diseño y análisis de un experimento** (Escalante, 2005):

1.- El orden de los experimentos debe ser aleatorio. Aleatorizar el orden de las pruebas neutraliza fuentes de variación que pueden estar presentes durante el experimento. En general dichas fuentes de variación son desconocidos, y pueden ser muchos, por ejemplo, cansancio del trabajador durante la realización de las pruebas o durante la medición de estas, cambios de voltaje, cambios de humedad, etc.

2.- Es importante replicar cada experimento. La razón es obtener un estimado del error, tanto para ver qué tan bien el diseño representa al proceso, como para poder comparar los factores y determinar si son activos o no. Se define como replica genuina la obtenida en una sola prueba o medición para cada combinación de los factores, y repetir dichas condiciones para cada replica adicional, en lugar de tomar varias muestras o mediciones de una vez en cada combinación. Lo opuesto a las replicas genuinas son las repeticiones. Por supuesto las replicas genuinas implican

un mayor tiempo al realizar pruebas y un costo mayor, pero es la mejor manera de obtener un estimado más preciso.

3.- Ocasionalmente pueden existir variables presentes en un experimento, cuyo efecto no se desea probar y que incluso pueden afectar o encubrir la influencia de las variables con las que se desea experimentar.

### **Factores o variables**

Son dimensiones medibles en una escala continua. Por ejemplo, presión, voltaje, temperatura, diámetro, peso, etc.

Los niveles de una variable son los valores en los cuales se experimentará con esta.

Sin embargo, también variables cualitativas proveedor, operador, etc. (Escalante, 2005).

### **Elementos del método Taguchi**

Los arreglos ortogonales (AO) son matrices de diseño que indican el número de pruebas y las combinaciones de las variables y sus niveles en dichas pruebas. Los AO representan una fracción del total de experimentos por realizar, de acuerdo con el número de variables y sus niveles. Por ello, la utilización de los AO reduce el costo y el tiempo de la experimentación. Los AO son diseños fraccionados (Escalante, 2005).

La mayoría de los AO están asociados a una o varias gráficas lineales que indican la ubicación de las variables y sus interacciones dentro del AO seleccionado (Escalante, 2005).

### **Para hacer una selección de arreglos ortogonales se requiere:**

1. Escoger el AO considerando que cada columna de un arreglo con dos niveles puede alojar a una variable con dos niveles, o a una interacción formada por variables de dos niveles. En el caso de arreglos de tres niveles, se necesitarán dos columnas para contener a una interacción formada por variables con tres niveles.
2. Dibujar la gráfica requerida
3. Buscar una gráfica lineal que se adapte a la gráfica requerida
4. Asignar las variables del arreglo (Escalante, 2005).

Un arreglo ortogonal se puede comparar con una replicación factorial fraccionada, de manera que conserva el concepto de ortogonalidad y contrastes. Un experimento factorial fraccionado es también un arreglo ortogonal. Taguchi desarrolló una serie de arreglos particulares que denominó:  $L_n(a^k)$  donde:  $n$  = representa el número de pruebas (renglones),  $k$  = esto es el número de columnas o condiciones experimentales (factores).  $a$  = Representa los diferentes niveles a los que se tomará cada factor (g-taguchi, 2019).

## **PARTE EXPERIMENTAL**

### **Tipo de estudio**

De acuerdo con las estrategias, la investigación realizada es documental pues realizamos múltiples investigaciones acerca de los beneficios de la sangre de drago mediante la consulta de material bibliográfico, para así tener datos confiables para la elaboración del experimento a realizar. También es experimental ya que se analiza la extracción de la sangre de drago que son manipuladas y se mide su variable de salida que será la cantidad, todo esto mediante el diseño de experimentos utilizando la metodología Taguchi.

De acuerdo con el periodo en que se realiza el estudio, la investigación es retrospectiva parcial, ya que esta investigación es el tipo de estudio que cuenta con una parte de la información recabada en otras fuentes y otra obtenida al momento de la experimentación. Por la evolución del fenómeno en estudio la investigación es transversal, ya que es una investigación sobre un problema durante un periodo específico.

**Recopilación de información**

Las técnicas de investigación utilizadas para la recopilación de información de los elementos de investigación fueron observación del desarrollo del fenómeno que se desea analizar al momento de llevar a cabo las pruebas. Se utilizará el instrumento vaso de precipitado para medir mililitros y el termómetro de cocina para la temperatura del agua.

Todos los análisis estadísticos fueron realizados mediante el software Minitab para análisis de los datos. Para la documentación de información se realizó una minuciosa búsqueda en internet en diferentes páginas confiables.

**Diagrama de proceso**

Método 1: Extracción por infusión (Figura 1).

Método 2 Extracción por maceración (Figura 2).

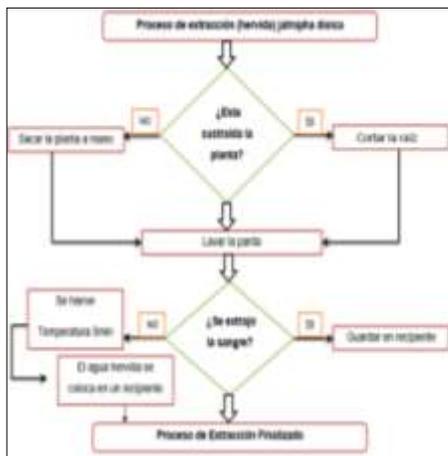


Figura 1

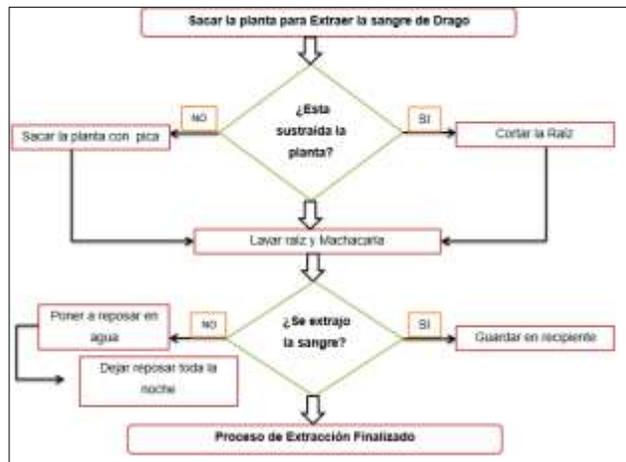


Figura 2

**Diseño de experimento**

NUM. DE PRUEBAS	TIPO DE EXTRACCIÓN	AGUA	TROZOS DE RAIZ	Y1 ml	Y2 ml	Y3 ml
1	METODO 1	200 ML	10 TROZOS	177 ml	168ml	175ml
2	METODO 1	100 ML	5 TROZOS	82ml	76ml	88ml
3	METODO 2	200 ML	5 TROZOS	160ml	160ml	165ml
4	METODO 2	100 ML	10 TROZOS	86 ml	95ml	89ml

L<sub>2</sub>

FACTORES	NIVEL 1	NIVEL 2
METODO DE EXTRACCIÓN	1	2
AGUA	200 ML	100 ML
CORTE DE RAIZ	10 TROZOS	5 TROZOS

**RESULTADOS**

Como se puede observar en la Figura 3 la condición óptima es A1, B1, C1 lo que representa que el Método 1, 200 ml y 10 trozos de raíz con la realización con una obtención de 173.33 mililitros de la sustancia (sangre de drago), lo anterior de acuerdo bajo las condiciones optimas del experimento.

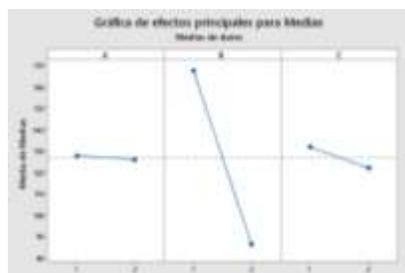


Figura 3

**Análisis de varianza** (Figura 4)

Ho: todas las medias son iguales,

H1: hay diferencia entre las medias,

Resultado: con un nivel de confianza del 95% y con  $F = 5.32$  en factor A se rechaza H1 y se acepta Ho que por lo tanto se comprueba que no hay variación sobre el método de extracción. En el factor B y C se rechaza Ho y se Acepta H1 si existe varianza entre la cantidad de agua a utilizar y los trozos que se tienen que utilizar.

FUENTE	GL	SEQ SS	S <sup>2</sup>	F	P
MÉTODO	1	10.1	10.1	0.46	0.517
AGUA	1	19926.7	19926.7	909.21	0.000
TROZOS	1	290.1	290.1	13.24	0.007
ERROR	8	175.3	175.3		
TOTAL	11	20402.2			

Figura 4

**CONCLUSIONES**

Para el experimento fue utilizado un arreglo ortogonal  $L_4 2^3$  se obtuvieron las condiciones óptimas A1B1C1 que representan el método 1 (por infusión), 200 ml de agua y los 10 trozos de la raíz con la realización de esta combinación obteniendo 173.33 mililitros. En lo que respecta el análisis de varianza con un 95% de confianza y con F de 5.32 nos indica que se acepta la hipótesis nula. La investigación proporcionó aprendizaje y enseñanza, además de la información obtenida.

Sin duda alguna una herramienta importante para lograr resultados en la investigación es la utilización de métodos estadísticos. Al final se pudo alcanzar el objetivo de definir un método de extracción que nos proporcionara la cantidad de mililitros de sangre de drago.

**BIBLIOGRAFÍA**

1. Cisneros, S. (2019). México desconocido. Obtenido de <http://www.mexicodesconocido.com.mx/sangre-de-drago.html>
2. Escalante, E. J. (2005). *Seis Sigma, Metodología y Técnicas*. Limusa.
3. Gallardo Vazquez, G. J., & Barboza Mejia, L. (12 de junio de 2015). Efecto cicatrizante del gel elaborado del látex de Croton lechleri "Sangre de Drago". *Scielo*, 18(1).
4. g-taguchi. (2019 de 2019). <https://www.coursehero.com>. Obtenido de <https://www.coursehero.com/file/54729725/g-taguchidocx/>
5. Mexicana., B. D. (2009). *medicinatradiconalmexicana*. Obtenido de <http://www.medicinatradiconalmexicana.unam.mx/monografia.php?l=3&t=&id=7483>
6. Wong, J. (2015). *Potencial de agentes antimicrobianos*. Obtenido de Researchgate: <http://www.researchgate.net/deref/http%3A%2F%2Fwww.uaq.mx%2FFCN%2Fnaturaleza%2FJathropha%2520dioica.php>

## ENSEÑANZA DE LA FÍSICA CON EXPERIMENTOS

Julio Cesar Mendoza Rojas, Javier Humberto Mares Arcila, Pablo Abraham Tea Ruiz, Alberto Zavala Cerda y Tsanda Sánchez Rico

Escuela Preparatoria "Gral. Lázaro Cárdenas", UMSNH,

### RESUMEN

La enseñanza de la Física en los diferentes niveles educativos, presenta cierta apatía por el estudiante, sobre todo cuando se imparte la asignatura de forma teórica. Analizando esta problemática surge la necesidad de implementar una estrategia didáctica para propiciar en el estudiante el interés en la asignatura. En esta propuesta didáctica se desarrolló un diseño instruccional reforzando la parte experimental en la enseñanza de la física, además fomentar la actividad científica y el trabajo en equipo. Se realizaron 10 prácticas de laboratorio acompañadas por el docente, correspondientes al programa académico de la asignatura de Física III (Electricidad y Magnetismo), y como producto final realizaron un experimento en el cual elaboraron un motor eléctrico y generador eléctrico con materiales básicos, el producto final se complementó con la redacción de un artículo científico, con la finalidad de inducirlos a las actividades científicas. Se analizó una muestra formada por los estudiantes del bachillerato Químico – Biológicas de la Escuela Preparatoria “Gral. Lázaro Cárdenas” de la UMSNH. En la primera etapa el grupo muestra recibió la enseñanza de forma tradicional, utilizando: papel, lápiz y libros de texto en los temas de electricidad y magnetismo, complementando la parte teórica con prácticas de laboratorio. En la segunda etapa desarrollaron proyectos por equipos para presentar un motor eléctrico o generador eléctrico y un artículo científico explicando los fenómenos eléctricos y magnéticos, así como las leyes que los fundamentan. La evaluación de los experimentos y el artículo científico se realizó con rubricas específicas. En el desarrollo de las prácticas de laboratorio acompañados por el docente los estudiantes se mostraron atentos e interesados en los experimentos pero en el experimento final por equipos los estudiantes externaron que se sentían estresados porque los experimentos no les funcionaban en el primer intento, pero al final estaban motivados cuando los mejoraban y lograban su funcionamiento, en la parte del desarrollo del artículo científico se presentaron deficiencias en la redacción, fundamentación teórica y como utilizar el formato APA

### INTRODUCCIÓN

La enseñanza de la física en la Escuela Preparatoria “Gral. Lázaro Cárdenas” se realiza primero de forma tradicional, en el aula, impartiendo los conceptos básicos de la parte teórica, las leyes y principios que establecen los fenómenos físicos. En una segunda etapa se complementa la parte teórica con la parte experimental, llevada a cabo en el laboratorio de física, en el cual se reproducen algunos de los fenómenos físicos para su análisis de forma cuantitativa, así es como el estudiante conoce los instrumentos, dispositivos y técnicas necesarias en el desarrollo de la parte práctica, además, trabaja de forma colaborativa para lograr los objetivos planteados en cada actividad experimental y como evidencia realizan un reporte con características especificadas en una rúbrica de evaluación.

Existen algunos obstáculos que no favorecen el proceso de enseñanza-aprendizaje de la física en el alumnado entre los que destacan la apatía y la falta de motivación, producto de muchos factores como el estado de salud físico o mental de los estudiantes, la falta de curiosidad para saber las causas que producen un fenómeno en su entorno, la carente base de conocimientos adquiridos en el nivel básico, los prejuicios en torno a la dificultad de la asignatura por la aplicación de las matemáticas en la solución de problemas o incluso las técnicas de enseñanza que el profesor pueda ofrecer al grupo. Este último punto resulta vital puesto que una buena combinación de técnicas bien aplicadas y encaminadas puede generar despertar el interés por la materia. La apatía hacia a la física surge y se marca desde las primeras sesiones. La falta de motivación se hace evidente con el ausentismo, calificaciones reprobatorias desde las primeras evaluaciones,

jóvenes distraídos durante las sesiones, poca o nula participación, tareas y trabajos incompletos, copiados o sin entregar, entre otros aspectos. Los factores que influyen en la enseñanza de la física es muy variado, además depende del contexto social y económico de los estudiantes como lo mencionan Oñorbe De Torre, A. M., & Sánchez Jiménez, J. M. (1996). “Los estudiantes asignan la máxima dificultad a los procedimientos de resolución y a la incompreensión de los enunciados. Admiten moderadamente su responsabilidad por falta de trabajo.” Estos resultados nos hacen buscar alternativas para mejorar el proceso educativo.

La estrategia didáctica que mejor parece contrarrestar los factores ya mencionados es mantener el acercamiento del estudiante con la experimentación, que reproduzca y analice los fenómenos físicos, involucrándolo desde la construcción de algún modelo hasta el pleno funcionamiento del mismo y que le permita encontrar respuesta a las preguntas que pudieran surgir en torno a los fenómenos que le rodean. Cuestionarse, planear, construir, elaborar, manipular y optimizar puede ser la puerta a la motivación que le genere el gusto de aprender por sí mismo y en conjunto de manera colaborativa.

## TEORÍA

El estudiante del quinto semestre del bachillerato nicolaita cuenta con la experiencia del trabajo realizado durante los cuatro semestres que le anteceden, al haber cursado Física I y Física II durante el año inmediato anterior adquiere un cúmulo de conocimientos y habilidades muy particulares y específicas que le ayudan en el estudio de Física III. Los conocimientos teóricos y las actividades prácticas con las que cuenta el estudiante son puestos a prueba por el docente y lo acompaña para lograr los objetivos planteados, logrando el complemento para poder desarrollar proyectos que culminen con la elaboración de un producto experimental tangible que demuestre el grado de dominio que tiene el alumno sobre la asignatura. Marulanda, J. I., & Gómez, L. A. (2006) “resalta la importancia de la observación directa de fenómenos en la enseñanza de la física, dado que ésta motiva dinámicas de discusión con los estudiantes en el aula de clase a través de la presentación de experimentos demostrativos y cuantitativos”, además en su trabajo concluye que el uso de material casero en el desarrollo de experimentos puede sustituir el hecho de no contar con material de laboratorio especializado para la elaboración de los experimentos.

Este trabajo se centra en el objetivo principal de desarrollar experimentos en el laboratorio como propuesta didáctica de acompañamiento para la materia de Física III, a través de la realización de la actividad experimental y el trabajo colaborativo para incentivar la motivación y despertar el interés por la materia, así como fomentar el desarrollo del pensamiento y quehacer científico en alumnos de quinto semestre de la Escuela Preparatoria “Gral. Lázaro Cárdenas” dependiente de la UMSNH.

## PARTE EXPERIMENTAL

Esta parte se dividió en dos etapas. Para el desarrollo de la primera se seleccionó un grupo de quinto semestre del bachillerato de Ciencias Químico-Biológicas, con el cual se trabajó de forma tradicional en el aula compartiendo con los estudiantes los conocimientos teóricos y solucionando problemas de electricidad y magnetismo. Simultáneamente, con el acompañamiento del profesor se fueron complementando y reforzando esos contenidos con diez prácticas en el laboratorio que forman parte del programa académico de la asignatura de Física III, observando el interés, la atención y participación de los jóvenes en cada experimento realizado.

En la segunda etapa, con el objetivo de fortalecer el trabajo colaborativo se solicitó a los alumnos desarrollar un proyecto por equipos que consistió en la elaboración un motor o un generador eléctrico quedando grabado todo ello en un video para concentrar evidencia de su trabajo. Algunos trabajos anteriores han demostrado la importancia del trabajo colaborativo en el el proceso enseñanza aprendizaje como el de: Lee, P., Margarita, A., & De la Garza González, R. L. (2017), en el cual analizaron que “las evidencias recabadas empíricamente manifestaron que el trabajo colaborativo predispuso favorablemente a los estudiantes hacia el estudio de los fenómenos físicos que se trabajaron.”

La facilidad para conseguir material a un costo muy económico usado en la fabricación del motor o generador no limitó a los estudiantes de la posibilidad de participar en estas actividades. Adicional a esto, se les pidió redactar un artículo científico que expusiera los fenómenos eléctricos y magnéticos así como las leyes que los fundamentan. La evaluación de estos productos se realizó con rúbricas específicas para la valoración de los parámetros pertinentes en cada caso.

## RESULTADOS

Como parte de los resultados podemos mencionar que el trabajo colaborativo en el proceso experimental fue parte fundamental en la enseñanza-aprendizaje de los temas de electricidad y magnetismo del bachillerato que Químico-Biológico, lográndose una comprensión mejor comprensión del tema y las leyes que fundamentan el fenómeno con respecto a una enseñanza tradicional y meramente teórica, esto, permitió al alumno una construcción propia de sus conocimientos, interiorizándolos de manera significativa a través de la actividad científica lúdica.

Los productos finales que los estudiantes entregaron fueron un generador o un motor eléctrico. Su elaboración quedó documentada en un video con el cual demostraron paso a paso la fabricación de los mismos, en él se logró observar el material usado, el procedimiento seguido y la demostración de su arreglo experimental que lo constató totalmente funcional. Cabe señalar que los jóvenes de algunos equipos expresaron haber sentido estrés y frustración al elaborar su modelo inicialmente ya que en una primera instancia este no funcionó como se esperaba. Tras algunas modificaciones y mejoras al arreglo experimental pudieron cumplir con el objetivo y lograron hacerlo funcionar de forma óptima sintiéndose motivados y satisfechos con ellos mismos.

Como ya se mencionó, adicionalmente a estos productos, los alumnos complementaron su proyecto con la elaboración de un artículo científico con la finalidad de inducirlos a las actividades científicas, durante la evaluación se observaron algunas deficiencias en la redacción, fundamentación teórica y el uso del formato APA.

## CONCLUSIONES

La investigación que se presenta ha corroborado la necesidad y utilidad que se tiene con respecto a la actividad científica y experimental en los procesos de enseñanza-aprendizaje en el bachillerato nicolaíta, la recogida de datos cualitativos y cuantitativos demuestran ser herramientas útiles para la materia de Física III, mismas, que permiten al profesor descifrar aspectos motivacionales para elegir los enfoques y recursos didácticos necesarios para la optimización de la obtención del conocimiento en alumnos de quinto semestre de preparatoria y con ello disminuir la apatía por la obtención del conocimiento.

También, haber fijado un proyecto final como objetivo a alcanzar, permitió a los alumnos generar acciones y estrategias adecuadas para el trabajo colaborativo, el cual, busco potenciar las relaciones interpersonales y sociales que se dan en los grupos a través de la socialización e integración del conocimiento, factores importantes en el desarrollo de la actividad científica y determinantes para su propia educación.

Podemos decir entonces que a través de la actividad científica y el trabajo colaborativo el alumno aumenta su interés y motivación por la materia debido a la interacción lúdica y el quehacer propio al construir los arreglos experimentales que se relacionan con la teoría, logrando una mejor comprensión de los conceptos y las leyes físicas que lo rigen desarrollando así un conocimiento científico como síntesis de los resultados experimentales.

Finalmente, todo lo mencionado anteriormente nos permite deducir que el alumno a través de la actividad experimental y el trabajo colaborativo desarrolla una autonomía en el aprendizaje, construyendo de manera significativa su conocimiento.

## BIBLIOGRAFÍA

1. Gil, S. (2015). Experimentos de Física usando las TIC y elementos de bajo costo.

2. Lee, P., Margarita, A., & De la Garza González, R. L. (2017). Una propuesta de trabajo colaborativo para mejorar las actitudes hacia el aprendizaje de las ciencias físicas en alumnos de nivel medio superior. *Lat. Am. J. Sci. Educ*, 4, 22075.
3. Marulanda, J. I., & Gómez, L. A. (2006). Experimentos en el aula de clase para la enseñanza de la física. *Revista colombiana de Física*, 38(2), 699-702.
4. Oñorbe de Torre, A. M., & Sánchez Jiménez, J. M. (1996). Dificultades en la enseñanza-aprendizaje de los problemas de física y química: I. Opiniones del alumno. *Enseñanza de las ciencias: revista de investigación y experiencias didácticas*.
5. Rosado, L., & Herreros, J. R. (2005). Nuevas aportaciones didácticas de los laboratorios virtuales y remotos en la enseñanza de la Física. *Recent Research Developments in Learning Technologies*, 1.

### **AGRADECIMIENTOS**

Agradecemos a la Escuela Preparatoria “Gral. Lázaro Cárdenas” (E.P.L.C.) dependiente de la Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo (U.M.S.N.H.) por las facilidades brindadas para realizar este trabajo.

## EVALUACIÓN DEL ÍNDICE DE SUSTENTABILIDAD AMBIENTAL COMO HERRAMIENTA DE ANÁLISIS ESPACIAL DE LOS RECURSOS NATURALES DEL ESTADO DE GUANAJUATO

Norma Claudia Calderón Rosas

CIATEC, A.C.  
ncalderon@ciatec.mx

### RESUMEN

El territorio guanajuatense enfrenta la pérdida de su entorno natural, derivado de las actividades económicas y humanas. La creciente población ha impuesto una mayor intensidad a la explotación de los recursos naturales, dando como resultado la degradación de ecosistemas y el aumento de residuos emitidos al aire y depositados en la tierra y cuerpos de agua. Para los actuales gobiernos resulta impostergable la necesidad de tomar acciones encaminadas a detener y revertir la degradación de ecosistemas y explotar racionalmente los recursos naturales. El presente trabajo desarrolla la estimación del Índice de Sustentabilidad Ambiental (ISA) para los municipios del estado de Guanajuato, construido bajo el modelo Presión-Estado-Respuesta (PER). El ISA buscaba evaluar, a través de un periodo de tiempo, la capacidad de una entidad para mantener condiciones ambientales favorables en el futuro. Debido a que la información utilizada para construir indicadores ambientales es amplia y diversa, se requiere un marco conceptual que permita estructurarla, así como facilitar su acceso e interpretación. El modelo PER está basado en la premisa “las actividades humanas ejercen presiones (Presión) sobre el ambiente y cambian la calidad y cantidad de los recursos naturales (Estado). Asimismo, la sociedad responde a estos cambios a través de políticas ambientales, económicas y sectoriales (Respuesta)”. La base del ISA reside en la estructuración de tres componentes de acuerdo al modelo PER; para cada componente se establecen una serie de indicadores y variables, para el presente ejercicio se estructuraron tres componentes: 1) Presiones sobre el medio ambiente: “un municipio es ambientalmente sustentable si los niveles de presiones, que las actividades humanas ejercen sobre el medio ambiente, no sobrepasan la capacidad de carga de sus sistemas ambientales”; para su análisis se establecieron 3 indicadores y 24 variables; 2) Estado del medio ambiente: “un municipio es ambientalmente sustentable cuando logra mantener niveles saludables en sus sistemas ambientales vitales, y logra que dichos niveles estén mejorando y no empeorando”; para su análisis se establecieron 2 indicadores y 17 variables; 3) Respuesta y vulnerabilidad: “un municipio es ambientalmente sustentable cuando logra minimizar la vulnerabilidad en su sistema socio ambiental en lo que se refiere a la satisfacción de las necesidades básicas de sus habitantes, como salud y nutrición, además de los derechos a un medio ambiente sano”; para su análisis se establecieron 5 indicadores y 40 variables. El análisis de los componentes antes descritos se desarrolló en 3 etapas: Integración de la información, Estimación del ISA, y Elaboración de fichas descriptivas y detección de oportunidades de mejora. Entre las principales conclusiones sobresale que las presiones ejercidas por las actividades humanas a nivel estatal, se localizan en los municipios del corredor industrial; como ejemplo se identifica que el municipio de León ha ejercido presiones severas en sus recursos naturales derivado de la demanda de servicios por su crecimiento económico, y aun con el establecimiento de instrumentos de política pública para frenar o revertir la degradación del medio ambiente, no han sido suficientes.

### INTRODUCCIÓN

Al utilizar un indicador, para describir la situación de un tema, con frecuencia ocurre que éste no refleja bien la condición del sistema o lo simplifica, de tal suerte que resulta inútil para la toma de decisiones. Por ello, a menudo se recurre a la elaboración de índices, y en temas complejos como el ambiental, la elaboración y utilización de ellos permiten una visión general de la situación del ambiente. Algunos de los índices más conocidos que tratan de evaluar la sustentabilidad ambiental son el Índice del Planeta Viviente (Quiroga, 2007), la Huella Ecológica (Reyes, 2012), y el ISA.

El ISA fue elaborado por las universidades de Yale y Columbia (Wendling, 2020), quienes integraron la información de 76 variables clasificadas en 21 indicadores de sustentabilidad ambiental (por ejemplo, calidad del agua, calidad del aire, biodiversidad, estrés ambiental, vulnerabilidad a desastres y manejo de recursos naturales, entre otros). Dichos indicadores fueron agrupados en cinco componentes (OECD, 1998):

1. Sistema ambiental,
2. Reducción del estrés ambiental,
3. Reducción de la vulnerabilidad humana al estrés ambiental,
4. Capacidad institucional y social para responder a los cambios ambientales, y
5. Administración global.

El ISA buscaba evaluar, a través de la integración de las condiciones de análisis de la época, la capacidad relativa de los diferentes países para mantener condiciones ambientales favorables en el futuro; las variables utilizadas para la construcción del índice fueron seleccionadas con base en el modelo Presión-Estado-Respuesta (PER), así como en una extensa revisión de la literatura ambiental, además de la consulta con grupos interdisciplinarios de expertos.

### OBJETIVO

Evaluar el Índice de Sustentabilidad Ambiental (ISA) para los municipios del estado de Guanajuato bajo en enfoque de análisis de sus recursos naturales.

### METODOLOGÍA

Debido a que la información utilizada para construir indicadores ambientales es amplia y diversa, se requiere un marco conceptual que permita estructurar la información y facilitar su acceso e interpretación.

El modelo PER (Figura 1) está basado en una lógica de causa: “*las actividades humanas ejercen presiones (Presión) sobre el ambiente y cambian la calidad y cantidad de los recursos naturales (Estado). Asimismo, la sociedad responde a estos cambios a través de políticas ambientales, económicas y sectoriales (Respuestas)*”, (OECD, 1993).

Este modelo parte de cuestionamientos simples:

- ¿Qué está afectando al ambiente?
- ¿Qué está pasando con el estado del ambiente?
- ¿Qué estamos haciendo acerca de estos temas?

Figura 1. Esquema del modelo PER.



Fuente: OCDE, 1998.

La base del ISA reside en la estructuración de tres componentes de acuerdo al modelo PER, los cuales se describen en la Tabla 1:

Tabla 1. Componentes que conforman el ISA.

Componente	Descripción
Presiones sobre el medio ambiente	Una entidad es ambientalmente sustentable si los niveles de presiones que las actividades humanas ejercen sobre el medio ambiente no sobrepasan la capacidad de carga de sus sistemas ambientales
Estado del medio ambiente	Una entidad es ambientalmente sustentable cuando logra mantener niveles saludables en sus sistemas ambientales vitales, y logra que dichos niveles se conserven o mejoren a futuro.
Respuesta y vulnerabilidad	Una entidad es ambientalmente sustentable cuando logra minimizar la vulnerabilidad en su sistema socio ambiental en lo que se refiere a la satisfacción de las necesidades básicas de sus habitantes.

Fuente: elaboración propia, 2021.

Posteriormente, para cada componente se establecen una serie de indicadores y variables, lo que permitirá identificar, por temática, las presiones sobre el medio ambiente, su estado, y la respuesta y vulnerabilidad, según sea el caso, como se muestra en la Tabla 2:

Tabla 2. Indicadores y variables que conforman el ISA.

Indicador	Variable
<b>Componente 1: Presiones sobre el medio ambiente</b>	
<b>Presiones demográficas:</b> Este indicador capta las presiones que la población ejerce sobre la explotación de los recursos para la satisfacción las necesidades.	Densidad demográfica
	Densidad de población
	Tasa global de fecundidad
<b>Presiones sectoriales sobre ecosistemas:</b> Este indicador capta las presiones directas sobre los ecosistemas, espacios y recursos naturales, a través de la superficie urbanizada, población económicamente activa, incendios forestales, entre otros.	Superficie asentamientos humanos urbanos
	Población económicamente activa en el sector primario
	Número de incendios forestales
	Superficie afectada por incendios
	Superficie dedicada a la agricultura
	Superficie dedicada a la ganadería
	Superficie de asentamientos humanos rurales
	Superficie de uso de la industria pesada
	Superficie de las vías de comunicación
	Número de minas en operación
Superficie deforestada	
<b>Presiones ambientales:</b> Este indicador considera las emisiones producto del uso de combustibles fósiles, contaminación por plaguicidas y fertilizantes, generación de residuos industriales, generación per cápita de residuos municipales, superficie irrigada, vehículos en circulación, el consumo doméstico de agua por habitante, entre otros.	Asentamientos humanos irregulares
	Superficie fertilizada de la superficie total agrícola
	Generación de residuos industriales
	Generación de residuos sólidos municipales no peligrosos
	Número de vehículos registrados en circulación
	Consumo doméstico de agua por habitante
	Descargas de aguas residuales industriales
	Consumo de energía por habitante
	Consumo de agua para la agricultura/industria
	Número de sitios como pasivos ambientales
<b>Componente 2: Estado del medio ambiente</b>	
<b>Recursos naturales:</b> Este indicador considera el estado de los recursos	Proporción de la cobertura forestal
	Proporción del área forestal perturbada

Indicador	Variable
naturales, como la cubierta para los ecosistemas, la biodiversidad, el agua y el suelo.	Proporción del área forestal primaria
	Superficie susceptible a erosión
	Volúmenes de agua en embalses
	Profundidad de extracción de agua en pozos
	Captura de carbono de los ecosistemas forestales
	Riqueza de especies de flora y fauna
	Diversidad de ecosistemas forestales
	Número de especies de flora y fauna en peligro de extinción
	Número de especies de flora y fauna endémicas
	Mortalidad por enfermedades respiratorias
<b>Salud ambiental:</b> Este indicador considera la mortalidad por enfermedades respiratorias y gastrointestinales que están relacionadas directamente con condiciones de calidad del aire y agua.	Mortalidad por enfermedades gastrointestinales
	Morbilidad por enfermedades respiratorias
	Morbilidad por enfermedades gastrointestinales
	Fuentes fijas de emisiones existentes
	Concentración de contaminantes criterio hacia la población
<b>Componente 3: Respuesta y vulnerabilidad</b>	
<b>Infraestructura ambiental:</b> Este indicador representa los esfuerzos por sustituir o complementar con infraestructura ambiental a la riqueza natural perdida o deteriorada en sus capacidades de carga o de producción de funciones ambientales.	Caudal de aguas residuales urbanas tratadas
	Disposición de residuos sólidos municipales en relleno sanitario
	Verificaciones vehiculares como proporción del parque vehicular
	Utilización de energías limpias
	Número de plantas de tratamiento de aguas residuales
	Volumen de tratamiento de PTARs
	Centros de verificación vehicular
	Superficie ocupada por ANP
	PMDUOET
	Superficie ocupada por UMAS
<b>Manejo y conservación de la riqueza natural:</b> Este indicador toma en cuenta las ANPs, la publicación y utilización de los PDUOET como insumo de planeación municipal, la superficie ocupada por UMAS, la superficie forestal bajo manejo y la superficie forestada, ya que todas ellas significan infraestructura institucional y jurídica para la conservación del patrimonio cultural.	Superficie bajo manejo forestal
	Superficie reforestada
	Superficie ocupada por UGA/UGAT
	Número de bancos de material pétreo regulados
	Áreas urbanizables dentro del PEDUOET o PMDUOET
	Política de aprovechamiento sustentable del PEDUOET
	Política de restauración del PEDUOET o PMDUOET
	Volumen de madera autorizado/extraído
	Programas de monitoreo de la biodiversidad
	Programas de remediación ambiental
	Áreas urbanizadas consolidadas
	Superficie bajo propiedad colectiva o semicolectiva
	<b>Capacidades institucionales:</b> Este indicador se refiere a las capacidades institucionales y humanas, que permiten/ restringen un manejo ambiental eficaz.
Población universitaria (mayor de 18 años)	
ONG ambientalistas	
Estaciones de monitoreo de calidad del aire	
ANPs con programa de manejo	
<b>Vulnerabilidad social:</b> Este indicador se refiere a la vulnerabilidad de la población y de los sistemas sociales ante riesgos y procesos de deterioro ambiental.	Distribución del ingreso
	Índice de marginación
	Personal médico en relación a la población total del municipio
	Proporción de viviendas con agua, drenaje y electricidad

Indicador	Variable
<b>Competitividad y ecoeficiencia:</b> Este indicador se refiere a la respuesta del sector privado y al alcance de nuevas prácticas de ecoeficiencia, así como a la producción más limpia en el sector industrial.	Nivel de escolaridad promedio
	Número de empresas certificadas como empresas limpias
	Número de reglamentos municipales
	Estudios de impacto ambiental dictaminados
	Licencias de funcionamiento otorgadas
	Eficiencia energética
	Autorizaciones de residuos de manejo especial
	Licencia ambiental de funcionamiento
	Autorizaciones de impacto ambiental

Fuente: elaboración propia, 2021.

El presente ejercicio se propuso bajo el desarrollo de tres etapas, las cuales se describen a continuación:

- I. **Integración de la información:** el acopio de información la conforman diversos tipos de archivos, desde documentos generados en Excel o Adobe, hasta capas de información geográfica (shapefiles), lo que conlleva a la unificación y conjunción de los datos “geográficos” aportados por cada una de las dependencias, hasta la transformación de información numérica a cartográfica bajo el esquema ejemplificado en la Figura 2:

Figura 2. Procesamiento de la información acopiada.



Fuente: elaboración propia, 2021.

La generación de información espacial se convierte en uno de los puntos básicos sobre los que se sustenta la utilidad del ISA, puesto que, de los datos introducidos para cada componente, así como de los operadores y procedimientos característicos de un sistema de información geográfica, dependerá la eficacia y validez de la información de salida y su posterior actualización y utilización, enfocados hacia la planificación medioambiental.

- II. **Estimación del ISA:** esta etapa propone la estimación del ISA bajo la metodología que a continuación se describe:

- a) Creación de una base de datos geográfica.
- b) Normalización de las unidades de las variables utilizadas para medir la sustentabilidad ambiental con base en la fórmula:

$$V_e = \frac{x - \bar{x}}{SD} \quad ($$

Donde:  $V_e$  es la variable normalizada,  
 $x$  es el valor de la variable para cada uno de los municipios,

$\bar{x}$  es el valor de la media de la variable para todos los municipios,  
 $SD$  es el valor de la desviación estándar para todos los municipios.

- c) Promedio de las variables normalizadas para cada indicador, considerando los posibles valores negativos y positivos para cada variable, según la relación que presente con la sustentabilidad.
- d) Promedio del valor resultante de los indicadores para generar el valor de cada componente.
- e) Cálculo del ISA, mediante la aplicación de la fórmula:

$$ISA = \frac{C_a + C_b + C_c}{n}$$

Donde:  $C_a$ ,  $C_b$  y  $C_c$  corresponden a cada uno de los componentes del ISA,  
 $n$  es el número de los componentes para estimar el ISA.

- f) Finalmente se realiza una clasificación de los valores del ISA bajo el método de cuartiles, para determinar niveles de sustentabilidad ambiental mediante el uso de una semaforización de tres niveles, designados como índice Bajo (rojo), Medio (amarillo) y Alto (verde), como se muestra en la Tabla 2:

Tabla 3. Cálculo del ISA para los municipios del estado de Guanajuato.

Municipio	Componente						ISA		
	Presión	P*	Estado	P*	Respuesta	P*	Valor	P*	Clasificación
León	-0.981	46	-2.625	46	2.332	1	-0.425	46	ISA Bajo
Abasolo	-0.138	36	-0.441	41	-0.234	31	-0.271	45	
Pueblo Nuevo	-0.409	41	0.088	23	-0.383	41	-0.235	44	
Santiago Maravatío	-0.384	40	0.140	22	-0.346	40	-0.197	43	
Pénjamo	-0.059	31	-0.270	38	-0.258	33	-0.195	42	
Irapuato	-0.618	44	-1.022	45	1.116	2	-0.175	41	
Celaya	-0.685	45	-0.817	44	0.979	3	-0.174	40	
Valle de Santiago	-0.137	35	-0.378	39	0.049	15	-0.156	39	
Salamanca	-0.461	42	-0.596	43	0.665	5	-0.131	38	
Silao de la Victoria	-0.552	43	-0.421	40	0.680	4	-0.097	37	
Villagrán	-0.322	39	-0.052	33	0.148	11	-0.075	36	
Uriangato	-0.256	37	-0.019	30	0.080	13	-0.065	35	
Romita	0.165	15	-0.123	36	-0.233	30	-0.064	34	
Huanímaro	-0.108	33	0.212	14	-0.270	35	-0.055	33	
Dolores Hidalgo	0.181	14	-0.241	37	-0.096	21	-0.052	32	
Yuriria	0.195	11	-0.031	31	-0.293	36	-0.043	31	
Jérecuaro	0.230	10	0.232	12	-0.546	44	-0.028	30	
Moroleón	-0.092	32	0.062	26	-0.041	18	-0.024	29	
Apaseo El Alto	0.099	23	0.048	28	-0.218	29	-0.024	28	
Apaseo El Grande	-0.136	34	-0.069	35	0.161	10	-0.015	27	
Sn. Miguel de Allende	0.239	9	-0.467	42	0.221	9	-0.002	26	
Sn. Fco. del Rincón	-0.287	38	-0.013	29	0.309	8	0.003	25	
Tarimoro	0.100	22	0.172	20	-0.261	34	0.004	24	
Tarandacuao	0.162	16	0.179	17	-0.313	39	0.009	23	
Coroneo	0.160	17	0.166	21	-0.294	37	0.011	22	
Comonfort	0.121	20	0.056	27	-0.138	25	0.013	21	
Doctor Mora	-0.001	28	0.186	16	-0.144	26	0.014	20	
Jaral del Progreso	0.002	27	0.192	15	-0.136	24	0.019	19	
									ISA Medio

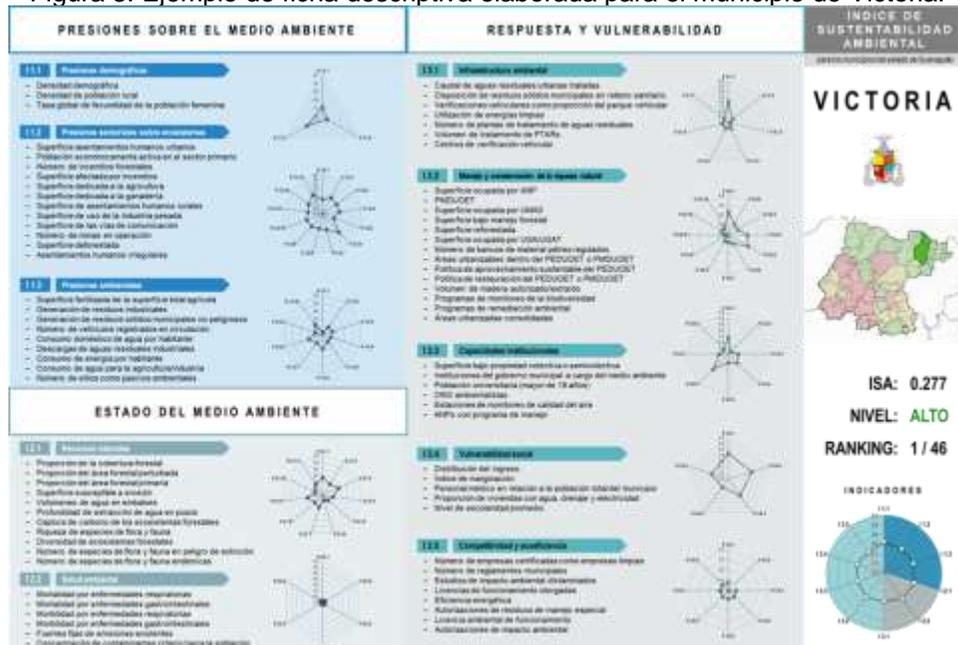
Municipio	Componente						ISA		
	Presión	P*	Estado	P*	Respuesta	P*	Valor	P*	Clasificación
Manuel Doblado	0.119	21	0.260	9	-0.294	38	0.028	18	ISA Alto
Cuerámara	0.013	26	0.240	10	-0.126	23	0.043	17	
Salvatierra	0.185	12	-0.063	34	0.007	16	0.043	16	
Sn. Luis de la Paz	0.181	13	-0.034	32	-0.015	17	0.044	15	
Juventino Rosas	0.146	18	0.085	24	-0.084	19	0.049	14	
Sn. Diego de la Unión	0.322	6	0.339	8	-0.434	42	0.075	13	
Cortazar	0.044	25	0.174	19	0.065	14	0.094	12	
Purísima del Rincón	-0.006	29	0.213	13	0.097	12	0.101	11	
Sn. Felipe	0.248	8	0.233	11	-0.119	22	0.121	10	
Acámbaro	0.129	19	0.344	7	-0.088	20	0.128	9	
Atarjea	0.303	7	0.753	2	-0.665	46	0.130	8	
Sn. José Iturbide	-0.026	30	0.068	25	0.355	7	0.133	7	
Sta. Catarina	0.336	5	0.490	5	-0.235	32	0.197	6	
Guanajuato	0.050	24	0.178	18	0.437	6	0.222	5	
Tierra Blanca	0.436	3	0.707	3	-0.446	43	0.233	4	
Xichú	0.539	2	0.810	1	-0.646	45	0.234	3	
Ocampo	0.545	1	0.452	6	-0.170	27	0.276	2	
Victoria	0.407	4	0.600	4	-0.175	28	0.277	1	

\*P: Posición general a nivel entidad municipal.

Fuente: elaboración propia, 2021.

III. **Elaboración de fichas descriptivas:** en esta etapa se elaboran fichas descriptivas municipales por cada uno de los niveles de información (variable, indicador, componente e ISA) tomando en cuenta los valores máximos y mínimos obtenidos según sea el caso; la Figura 3 muestra, a manera de ejemplo, la ficha elaborada para el municipio de Victoria, el cual clasificó como la entidad mejor evaluada.

Figura 3. Ejemplo de ficha descriptiva elaborada para el municipio de Victoria.



Fuente: elaboración propia, 2021.

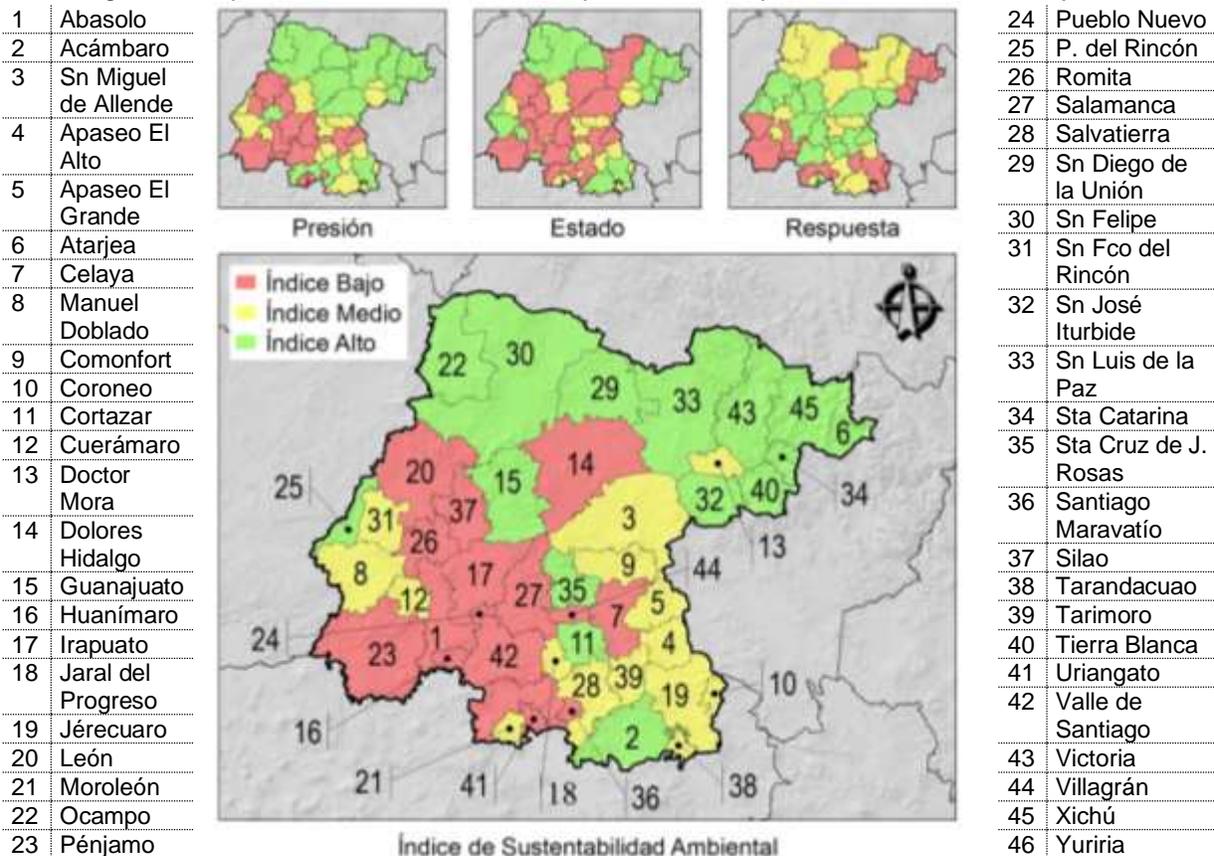
**CONCLUSIONES**

De acuerdo a los tres indicadores que conforman el Componente 1: Presiones sobre el medio ambiente, desde el punto de vista demográfico, sobresalen los municipios sobre el corredor industrial (León, Silao, Irapuato, Salamanca, Celaya y Apaseo El Alto; en el tema de presiones sectoriales sobre los ecosistemas destaca el municipio de Silao por la superficie dedicada al uso de la industria pesada, y por último el municipio de Santiago Maravatío en el tema de presiones ambientales, en específico por su alto consumo per cápita de agua y energía por habitante.

Lo anterior, conlleva a mencionar que existe una relación directa de estos indicadores con las zonas económicamente activas y las menos desarrolladas del estado de Guanajuato, es decir, los municipios que presentan una mayor actividad industrial, y que son los más densamente poblados, ejercen una mayor presión al medio ambiente; caso contrario, los municipios ubicados al norte del estado, considerados con mayor grado de marginación o de baja infraestructura, son los que ejercen una menor presión.

Esto es congruente con las políticas de crecimiento económico en ciertos municipios y sectores económicos, como es el caso del automotriz y el aeroespacial, quienes ejercen más presión sobre el medio ambiente, lo que se manifiesta en diferentes problemáticas como el abatimiento de los mantos freáticos, la calidad del agua, aumento de aguas residuales, deterioro de la calidad del aire, la degradación de suelos, la deforestación, la pérdida de biodiversidad, la generación de residuos, entre otros.

Figura 4. Mapeo de los resultados del ISA para los municipios del estado de Guanajuato.



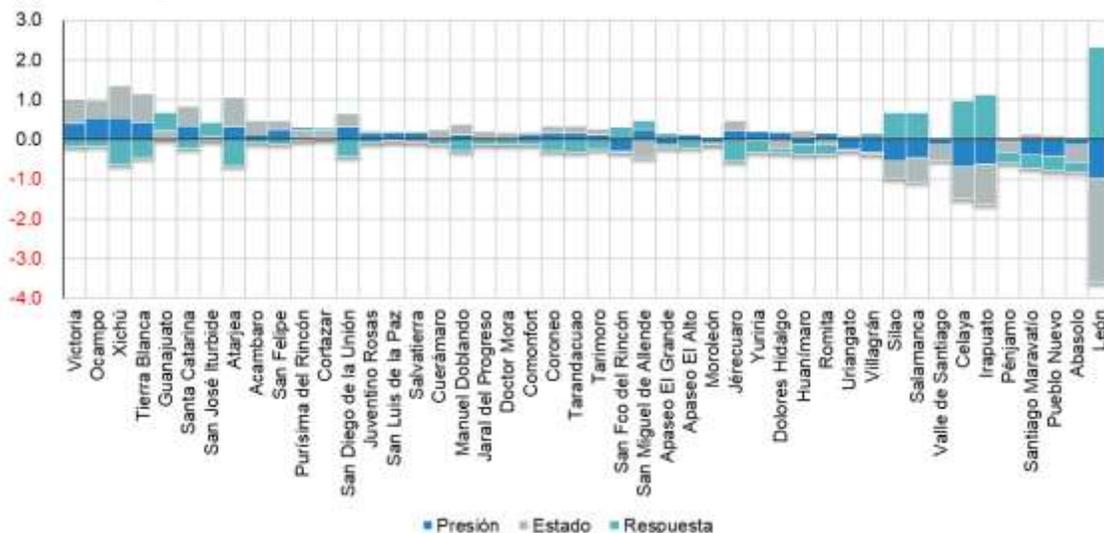
Fuente: elaboración propia, 2021.

Por otro lado, los indicadores del Componente 2: Estado del medio ambiente, en específico a salud ambiental y cantidad del capital natural, destaca la presión del modelo económico y de desarrollo del estado de Guanajuato, ejercida por medio de la población y los sectores productivos, que han mermado la calidad (salud y cantidad) de los recursos naturales. Con base a los resultados se concluye que 17 municipios presentan una calidad baja respecto a la salud del medio ambiente donde destacan León, Irapuato, Celaya y Salamanca, que presentan problemas de susceptibilidad de erosión en suelos, baja disponibilidad de volúmenes de agua en embalses, acuíferos sobreexplotados y baja diversidad de flora y fauna derivado de la deforestación y manejo inadecuado del capital natural.

Referente a los indicadores del Componente 3: Respuesta y vulnerabilidad, se concluye que los municipios que han ejercido mayor presión sobre los recursos naturales (agua, suelo, aire, flora y fauna) ha establecido políticas y programas de inversión, dirigidos al cuidado y mejoramiento ambiental, así como también al fortalecimiento de las capacidades institucionales, lo cual es notorio en los municipios que integran el corredor industrial especialmente Celaya, Irapuato, Silao y Salamanca, destacando en municipio de León con la mejor valoración por sobre todas las demás entidades municipales; esta capacidad podría tomarse en cuenta para replicarse en los municipios con valoración baja, y con ello mejorar el índice de sustentabilidad, tanto de la entidad propia como a nivel estatal.

Al integrar los componentes de presión, estado y respuesta al análisis final del ISA (Figura 4), se concluye que los municipios con mayor densidad de población y que presentan un mayor crecimiento económico derivado del tipo de industria que albergan en su territorio (León, Abasolo, Pueblo Nuevo, Santiago Maravatío, Pénjamo, Irapuato, Celaya, Valle de Santiago, Salamanca, Silao de la Victoria, Villagrán, Uriangato y Romita), han tenido efectos negativos en la calidad del medio ambiente aun cuando han aplicado políticas y programas para el mejoramiento del mismo; caso contrario los municipios al norte del estado de Guanajuato (Victoria, Ocampo, Xichú, Tierra Blanca, Guanajuato, Santa Catarina, San José Iturbide, Atarjea, Acámbaro, San Felipe, Purísima del Rincón, Cortazar, San Diego de la Unión, Juventino Rosas, San Luis de la Paz, Salvatierra, Cuernavaro, Manuel Doblado, Jaral del Progreso, Doctor Mora, Comonfort, Coroneo, Tarandacuao, Tirimoro, San Foo del Rincón, San Miguel de Allende, Apaseo El Grande, Apaseo El Alto, Moreleón, Jérecuaro, Yuriria, Dolores Hidalgo, Huanimaro, Romita, Uriangato, Villagrán, Silao, Salamanca, Valle de Santiago, Celaya, Irapuato, Pénjamo, Santiago Maravatío, Pueblo Nuevo, Abasolo, León) presentan los mejores índices de sustentabilidad, lo cual se adjudica a que estos municipios cuentan con un mayor capital natural aunado a la baja presión que se ejercen sobre ellos, traduciéndose en una buena calidad y manejo de los recursos.

Figura 5. Comparativo de indicadores PER del ISA por entidad municipal.



Fuente: elaboración propia, 2021.

Otro punto a resaltar, son los municipios que se encuentra en el intervalo medio del ISA, que son básicamente los que colindan con el estado de Querétaro, quienes de seguir las tendencias de presión sobre los recursos además de la baja calidad de mismos, podrían en un futuro próximo bajar drásticamente el valor del ISA. Por último, es importante reconocer y estimar la capacidad de resiliencia de los municipios considerados con ISA alto, para disminuir las posibles presiones sobre el capital natural, el cual da equilibrio al estado de Guanajuato.

En términos generales se concluye, como se observa en la Figura 6, que es necesario establecer estrategias más eficientes para el mejoramiento de la calidad ambiental del estado de Guanajuato; por ejemplo, vemos al municipio de León que ha ejercido presiones severas en sus recursos naturales, ello derivado de la demanda de servicios por su crecimiento económico, y aun cuando ha establecido programas, estudios y estrategias como instrumentos de política pública para frenar o revertir la degradación del medio ambiente no han sido suficientes, por lo que presenta un ISA negativo, en la misma situación están los municipios del corredor industrial y sureste del estado.

#### **BIBLIOGRAFÍA**

1. OCDE. 1993. Core set of indicators for environmental performance reviews: A synthesis report by the group on the state of the environment. Paris: Organización para la Cooperación y el Desarrollo Económico.
2. OCDE. 1998. Toward sustainable development: Environmental Indicators. Paris, Francia: Organización para la Cooperación y el Desarrollo Económico.
3. Quiroga, Rayén. 2007. Indicadores ambientales y de desarrollo sostenible: avances y perspectivas para América Latina y el Caribe. Santiago de Chile, Chile: Comisión Económica para América Latina y el Caribe.
4. Reyes, B., 2012. Nuestra huella ecológica: Reduciendo el impacto humano sobre la Tierra. (I. Ediciones, Ed.) Santiago, Santiago, Chile. Obtenido de <http://journals.openedition.org/polis/7216>
5. Wendling, Z. A., Emerson, J. W., de Sherbinin, A., Esty, D. C., et al., 2020. 2020 Environmental Performance Index. New Haven, CT: Yale Center for Environmental Law & Policy. Extraído el 23 de Mayo 2021: [www.epi.yale.edu](http://www.epi.yale.edu)

## **SIMULACIÓN NUMÉRICA DE LA VELOCIDAD DE FLUJO Y PRESIÓN DE UN VISCOSÍMETRO DE AGUJA DESCENDENTE.**

Ángel Daniel López Flores, Arturo F. Méndez Sánchez

Escuela Superior de Física y Matemáticas, Instituto Politécnico Nacional. Unidad Profesional Adolfo López Mateos, Edif. 9 col. Lindavista CP. 07738, México D. F., México.

[a.dlop.1729@gmail.com](mailto:a.dlop.1729@gmail.com)

### **RESUMEN**

La viscosidad como característica distintiva de los fluidos es de gran interés para la física y la química, como tal es importante medir este valor con precisión. Pero es más importante su utilidad a nivel industrial. El viscosímetro de aguja descendente consiste en un contenedor de diámetro  $D$ , el cual contiene un fluido cuya viscosidad se desea conocer y una aguja de diámetro  $d$  que desciende en este medio viscoso. El interés de estudiar este viscosímetro radica en que en este equipo se puede determinar la viscosidad a distintas presiones. Además, el proceso experimental para determinar los perfiles de velocidad en el flujo del viscosímetro es muy costoso, sin embargo, determinar los perfiles de velocidad vía una simulación numérica es mucho más económico. Por otro lado, medir la presión entre los extremos de la aguja con un manómetro es complicado sin perturbar el flujo.

En este trabajo se tiene el interés de determinar los perfiles de velocidad que se generan durante el descenso de la aguja por gravedad en un medio viscoso por simulaciones mediante elemento finito. La simulación nos permitió encontrar una aproximación al valor real del gradiente de presión que se genera durante el descenso de la aguja. Esta simulación se realizó considerando un contenedor lleno de glicerina con diámetro  $D$ , al cual se le introduce una aguja cilíndrica de diámetro  $d$ , de esta manera se puede encontrar el perfil de velocidad que se genera.

Los resultados muestran la influencia que tiene el cambiar el diámetro de la aguja y su interacción con la pared del viscosímetro sobre los perfiles de velocidad. Los perfiles se asemejan a un flujo de Couette cuando el flujo de la aguja predomina, mientras que los perfiles de velocidad se asemejan al flujo de Poiseuille cuando predomina el flujo de retroceso. Asimismo, se presentan los perfiles en diferentes regiones del viscosímetro de aguja descendente.

### **INTRODUCCIÓN**

Existen simulaciones numéricas de bidimensionales típicas en la mecánica de fluidos, como el flujo en el plano de Couette en un capilar. Sin embargo, es poco común encontrar una simulación de un viscosímetro de aguja descendente dentro de un capilar. El estudio de este comportamiento es de interés en la industria, donde es necesario medir con precisión las propiedades físicas de fluidos.

En este trabajo se presentarán la simulación numérica, en la cual se pretende mostrar los perfiles de velocidad y presión durante la caída de la aguja dentro de un capilar, estudiando el especialmente los cambios en el perfil de velocidades cuando se modifica el diámetro de la aguja<sup>3</sup>.

Es importante mencionar las ventajas de este instrumento, al ser capaz de usarse para mediciones de campo, funcionar a diferentes presiones e incluso permite determinar la viscosidad de fluidos no newtonianos.

### **TEORÍA**

#### **Flujo de Couette<sup>2</sup>**

El flujo unidireccional constante, bajo un gradiente de presión cero en la dirección del flujo, de un fluido viscoso incompresible entre dos placas horizontales de extensión infinita, una fija y la otra moviéndose en su propio plano. con una velocidad constante  $v_0$ ; se conoce como el flujo plano de Couette.

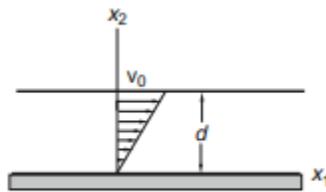


Figura 1: Flujo de Couette<sup>2</sup>, una pared estática se mantiene con velocidad  $v(x_2 = 0) = 0$  y otra está en movimiento, lo cual forma el perfil de velocidad recto.

La presión en el fluido sigue la ecuación:

$$\frac{\partial p}{\partial x_1} = -\alpha$$

Con  $\alpha$  constante, de tal manera que la presión tiene la forma:

$$p = -\alpha x_1$$

El flujo tiene como condiciones de frontera  $v(x_2 = 0) = 0$  y  $v(x_2 = d) = v_0$ , con lo cual la ecuación del perfil de velocidad es:

$$v(x_2) = \frac{v_0 x_2}{d}$$

### Flujo plano de Poiseuille<sup>2</sup>

Este consiste en un flujo viscoso incompresible en un capilar de paredes paralelas infinitas. El flujo es generado por un gradiente de presión  $\frac{\partial p}{\partial x}$  y tiene condiciones de frontera  $v(-b) = v(b) = 0$ .

La ecuación que describe el perfil de velocidad del flujo de Poiseuille es:

$$v(x_2) = \frac{\alpha}{2\mu} (b^2 - x_2^2)$$

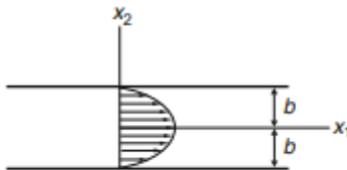


Figura 2: Perfil de velocidad del flujo de Poiseuille<sup>2</sup> con forma de una parábola y generado por un gradiente de presión en la dirección  $x_1$ .

### Simulación

Para hacer la simulación, se utilizó un resolvidor por método de elemento finito, en una laptop con procesador AMD A9-9420.

Consideremos al viscosímetro de aguja descendente como un tubo de radio  $R_2$  lleno de un fluido homogéneo de densidad constante. Al cual se le introduce un cilindro de radio  $R_1$  y volumen  $V$  que cae dentro del tubo con velocidad terminal y es concéntrico con el tubo.

El comportamiento del fluido incompresible está dado por las ecuaciones de Navier-Stokes

$$\rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} - \nabla \cdot \eta (\nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^T) + \rho \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} + \nabla p = \vec{F}$$

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0$$

Donde  $\rho$  es la densidad del fluido ( $\text{kg/m}^3$ ),  $\vec{u}$  es la velocidad del cilindro estudiado,  $\eta$  es la viscosidad del fluido ( $\text{Ns/m}^2$ ),  $p$  es la presión (Pa) y  $\vec{F}$  es la fuerza volumétrica.

El viscosímetro será estudiado desde el sistema de referencia del cilindro. Por lo tanto, las componentes de la fuerza volumétrica son

$$F_r = 0, F_z = -\rho(g + a)$$

Donde  $\mathbf{a}$  es la aceleración del cilindro y  $\mathbf{g} = 9.81 \frac{m}{s^2}$  es la aceleración de la gravedad. Si igualamos a la segunda ley de Newton el balance de fuerzas será:

$$m\ddot{\mathbf{x}} = \vec{F}_g + \vec{F}_z$$

La fuerza de gravedad  $F_g$  esta dada por

$$\vec{F}_g = -\rho_{cilindro} V_{cilindro} \mathbf{g}$$

Para calcular la fuerza que ejerce el fluido sobre el cilindro, debemos tomar en cuenta la fuerza sobre la superficie del cilindro debido a la presión hidrostática y a la aplicada por el tensor de esfuerzo de Cauchy, la fuerza total es la integral de la suma de la presión hidrostática y el esfuerzo de Cauchy sobre la superficie del cilindro:

$$\vec{F}_z = 2\pi \int_S \mathbf{r}\vec{n} \cdot [\nabla\vec{u} + (\nabla\vec{u})^T - p\mathbf{I}] dS$$

Donde  $\vec{n}$  es el vector normal a la superficie del cilindro y  $p$  es la presión hidrostática.

Las condiciones iniciales para posición y velocidad son

$$\mathbf{u}_0 = \mathbf{v}_0 = \mathbf{x}_0 = \dot{\mathbf{x}}_0 = \mathbf{0}$$

Para nuestro modelo, el sistema de referencia es sobre el cilindro (sistema de referencia no inercial) con la velocidad del fluido igual a cero en la superficie de cilindro.

El fluido entra con velocidad  $\vec{u} = (0, \dot{x})$

La fuerza que el fluido ejerce sobre el cilindro es calculada al integrar la componente normal del tensor de esfuerzo sobre la superficie del cilindro. Debido a la simetría del sistema, la componente z es la única diferente de cero

El modelo se hizo inicialmente con rectángulo de ancho  $R=6$ [mm] y un segundo rectángulo de ancho más pequeño  $r$  cuyo valor vamos a modificar para observar los cambios que hay en el perfil de velocidad y gradiente de presión. Esta configuración fue elegida debido a que el viscosímetro es axialmente simétrico, lo cual hace mas sencillo los cálculos del método de elemento finito.

La simulación del viscosímetro se hizo a partir de un modelo simétrico, donde se dibujó un rectángulo de radio  $R=6$ [mm] y después un rectángulo de radio  $r$  variable.

Se estudiaron dos diámetros diferentes  $r=5.75$  mm y  $r=2.5$  mm. El tiempo necesario para hacer los cálculos con el primer radio fue de 73 segundos. El segundo radio requirió más tiempo para completar los cálculos y necesitó de 3404 segundo (56 minutos y 44 segundos).

Como se buscan resultados más precisos entre las paredes del cilindro y recipiente, la malla de elemento finito se hizo mas fina entre esas paredes.

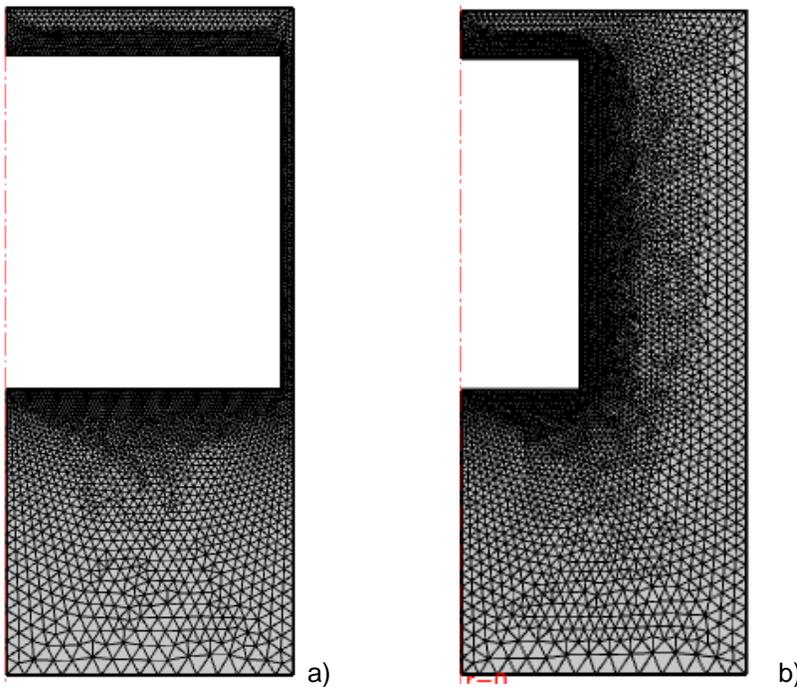


Figura 3. Mallas utilizadas en para la simulación con radio  $r=5.75\text{mm}$  (a) y radio  $r=2.5\text{mm}$  (b). La zona de mayor interés es alrededor del cilindro.

### RESULTADOS

Después de terminar los cálculos del modelo, se utilizaron los valores de presión y velocidad, para encontrar el perfil de velocidad y gradiente de presión entre las paredes del cilindro y el contenedor para los radios  $r=5.75\text{mm}$  y  $r=2.5\text{mm}$  a lo largo de dos líneas principales. Para la presión se calculó la presión a lo largo de una línea paralela a las paredes del cilindro y contenedor, ubicada a la mitad de estas.

Para dibujar el perfil de velocidad se calculó la magnitud de la velocidad en cada punto en la línea paralela a la base del contenedor con vértice en la base del cilindro entre la base del cilindro y la pared del contenedor.

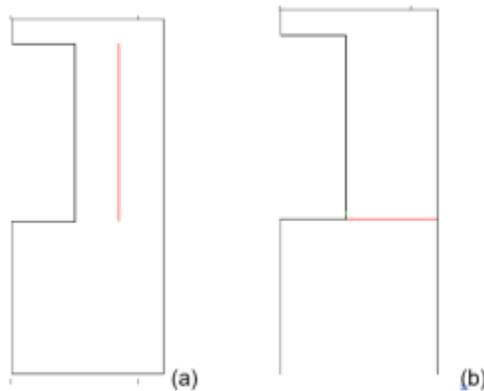


Figura 4: (a) La presión es calculada en cada punto de la línea roja paralela a las paredes del cilindro y contenedor. (b) La rapidez del fluido es calculada en cada punto de la línea horizontal roja.

En las gráficas 5 y 6 se muestra el perfil de velocidad a tiempo  $t=1.25s$  para el cilindro de radio  $r=2.5mm$  y la presión entre las paredes a tiempo  $t=1.25$ .



Figura 5. Perfil de velocidad cilindro de radio  $r=2.5mm$  a tiempo  $t=1.25s$ . El perfil muestra una mezcla de los flujos de Poiseuille y el flujo de Couette.

En el primer intervalo de  $r=2.5mm$  a  $2.75mm$  el perfil es parecido al de Couette, pero de  $r=2.75mm$  a  $6mm$ , el perfil asume una forma parabólica igual al flujo de Poiseuille.

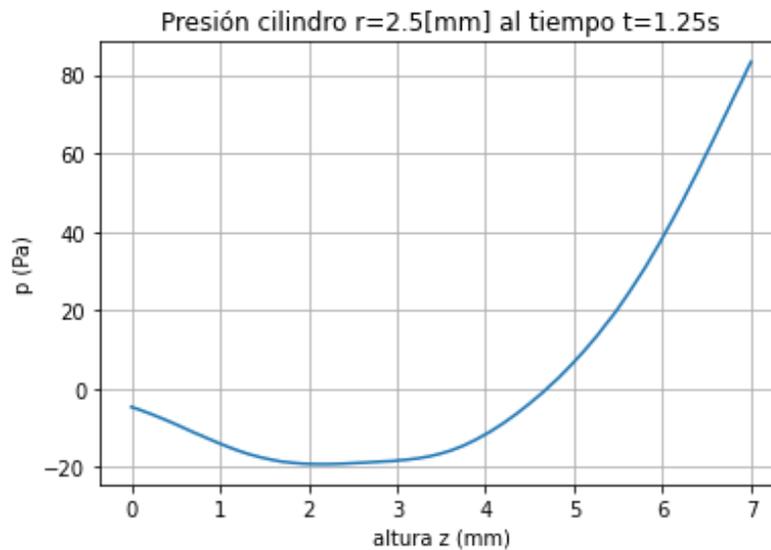


Figura 6. Presión a lo largo de la línea vertical paralela a las paredes del cilindro  $r=2.5mm$  al tiempo  $t=1.25s$ . El perfil muestra una forma parabólica. El flujo de Poiseuille se genera debido a un gradiente de presión entre las dos superficies. La gráfica se mide desde la parte superior del cilindro con  $z=0mm$  hasta la base del cilindro  $z=7mm$ .

Las figuras 7 y 8 muestran el perfil de velocidad y la gráfica de la presión del cilindro de radio  $r=5.75mm$  y al tiempo  $t=1.25s$



Figura 7: Perfil de velocidad del cilindro de radio  $r=5.75\text{mm}$ , entre el intervalo  $r=5.75\text{mm}$  y  $r=5.875\text{mm}$ , el perfil de velocidad tiende a ser casi una línea recta, lo cual nos muestra que este sigue un perfil de velocidad de Couette.

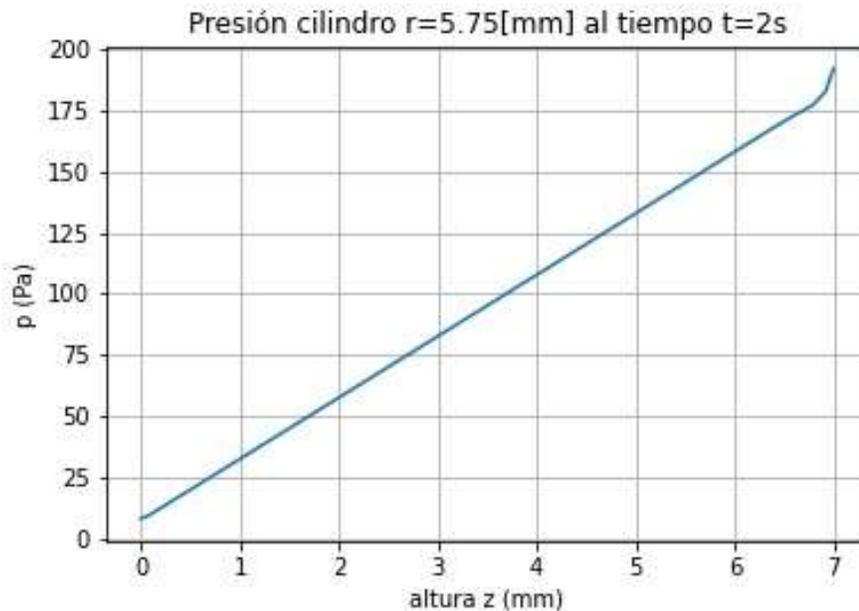


Figura 8: La presión en el cilindro de radio  $r=5.75\text{mm}$  tiene un perfil rectilíneo. La grafica utiliza la parte superior del cilindro como  $z=0\text{mm}$  hasta la base del cilindro  $z=7\text{mm}$ . La presión es una línea recta, lo cual cumple con la presión debido a un flujo de Couette.

## CONCLUSIONES

Se observó que, al tener un cilindro con diámetro muy cercano al contenedor del líquido, el perfil de velocidad del fluido es tipo Couette, lo cual se comprueba con observando la gráfica de presión.

Por otro lado, al tener un diámetro más pequeño que el diámetro del contenedor, el perfil de velocidad no tiene solo forma de perfil de Couette o Poiseuille. En su lugar tiene una combinación de ambos flujos, como se observó en el perfil de velocidad.

**BIBLIOGRAFÍA**

1. Lohrenz, J., Swift, G. W., & Kurata, F. (1960). An experimentally verified theoretical study of the falling cylinder viscometer. *AIChE Journal*, 6(4), 547–550.
2. W.M Lai, D. Rubin, E. Krepl, *Introduction to Continuum Mechanics*, ( Elsevier Inc., MA, 2010), Chapter 6, pp 354-372.
3. K.Walters, *Rheometry* (1975), John Wiley & Sons, Inc. New York. Chapter 4, pp 82-85.

## EFFECTOS DEL VACIADO ENTRÓPICO EN LA ESTRUCTURA DE MEZCLAS COLOIDALES RACÉMICAS BIDIMENSIONALES DE PARTÍCULAS QUIRALES

Michelle Sosa Aranda<sup>1</sup>, José Miguel Méndez Alcaraz<sup>2</sup>, Salvador Herrera Velarde<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Instituto Tecnológico Superior de Xalapa, <sup>2</sup>Departamento de Física del Cinvestav.  
arand\_m@hotmail.com

### RESUMEN

Las partículas coloidales duras en forma de L son quirales en sistemas bidimensionales. Es decir, ellas y su imagen especular no pueden superponerse siguiendo sólo translaciones y rotaciones en el plano que las contiene. Una mezcla racémica de dichas partículas las contiene de ambas quiralidades, en la misma proporción, y representa un modelo mesoscópico simplificado de los racematos de moléculas biológicas que suelen sintetizarse en la industria farmacéutica. El modelo permite estudiar mecanismos novedosos de manipulación estructural y segregación por quiralidad utilizando los métodos de la ciencia de los materiales blandos.<sup>1</sup> Nosotros agregamos una componente más, hecha de partículas pequeñas duras esféricas, para estudiar los efectos del vaciado entrópico en el orden local de las partículas quirales.<sup>2</sup> Utilizando simulaciones por Dinámica Molecular,<sup>3</sup> sus visualizaciones y análisis estadístico en términos de funciones de distribución radial, para varias concentraciones de todas las especies involucradas, logramos observar la formación de conglomerados transitorios que favorecen la separación local por quiralidad. Este sorprendente resultado abre la posibilidad de que dicha tendencia alcance escalas macroscópicas, lo que permitiría el diseño de procesos de ingeniería entrópica<sup>2</sup> para la separación de racematos.

### INTRODUCCIÓN

La quiralidad es la propiedad de algunos objetos de no ser superponibles a su imagen especular. Una esfera no es quiral, pues es idéntica a su imagen especular y ambas pueden superponerse. La mano derecha es quiral, pues su imagen especular es la mano izquierda y ambas no pueden ser superpuestas. Un objeto en forma de L (letra ele mayúscula) no es quiral en tres dimensiones, pero lo es en un espacio bidimensional. La mayoría de las moléculas biológicas son quirales y cuando uno las sintetiza en el laboratorio suelen producirse en mezclas racémicas, o racematos, que contienen ambas quiralidades, o enantiómeros, en la misma proporción. Éstos suelen denotarse como levógiros o dextrógiros, según la dirección en que hagan girar la luz polarizada que los traspase en solución.<sup>4</sup> Por alguna razón todavía desconocida, la vida es homoquiral, es decir, selecciona moléculas de una sola quiralidad. Por ejemplo, los aminoácidos de las proteínas son levógiros y los azúcares y el ADN dextrógiros.<sup>5</sup> Por estos motivos, algunos fármacos actúan de forma distinta según su quiralidad, por lo que es imperativo segregar por quiralidad los racematos sintetizados en el proceso de su fabricación.<sup>6</sup>

Los coloides son materiales blandos de enorme interés por sí mismos, pero aquí los utilizamos como modelos mesoscópicos de sistemas moleculares, que es otro de sus usos relevantes.<sup>1</sup> Consideramos mezclas racémicas bidimensionales de partículas coloidales duras en forma de L y de su imagen especular, que se ve como una letra L invertida horizontalmente que permanece igual a lo largo de su vertical (ver Figura 1). En realidad, lo único que hace "coloidal" a este sistema es la simplicidad de las partículas y su bidimensionalidad, cuya síntesis es posible a escalas mesoscópicas, pero difícil de imaginar a nivel molecular. No obstante, uno espera que el modelo capture las propiedades invariantes de escala de los sistemas moleculares complejos. Para estudiar nuestras mezclas racémicas de "moléculas mesoscópicas" utilizamos simulaciones computacionales de dinámica molecular,<sup>3</sup> lo que nos permite evaluar las correlaciones entre las partículas en función de su concentración, tamaño, factor de forma y quiralidad.

Las fuerzas de vaciado entrópico<sup>2</sup> surgen en mezclas binarias de partículas duras, grandes y pequeñas, cuando dos de las partículas grandes se acercan entre sí. Al hacerlo, expulsan a las pequeñas de la región entre ellas, dando lugar a una descompensación de las presiones osmóticas ejercidas por las partículas pequeñas sobre las caras externas e internas de las grandes. Esta constelación de eventos simultáneos produce una atracción efectiva entre las partículas grandes, cuya intensidad es proporcional a la concentración de las pequeñas y su alcance el tamaño de éstas.<sup>7</sup> Las fuerzas de vaciado entrópico se utilizan para cristalizar proteínas, entre muchas otras aplicaciones.<sup>2</sup> Nosotros agregamos una tercera componente de partículas esféricas pequeñas y duras a nuestras mezclas racémicas, para inducir interacciones de vaciado entrópico entre las partículas quirales. La intención es explorar la posibilidad de diseñar mecanismos entrópicos de manipulación de la estructura de las mezclas racémicas y su eventual segregación por quiralidad. En la siguiente sección explicamos con detalle el modelo estudiado y los métodos que utilizamos. Posteriormente presentamos algunos de los resultados más relevantes y cerramos el artículo con una sección de conclusiones.

### MODELO Y METODOLOGÍA

Como elemento base utilizamos partículas esféricas de diámetro  $\sigma$ . La tercera especie, o depletantes, estará formada por estas mismas partículas a una fracción de llenado  $\varphi_D = \pi\sigma^2 n_D / 4$ , donde  $n_D = N_D / A$  es su densidad numérica superficial,  $N_D$  su número y  $A$  el área del sistema. Las partículas quirales estarán formadas por 12 de estos ladrillos básicos; 8 en el brazo largo de la L y 3 en el corto, más la partícula del vértice. Su fracción de llenado es  $\varphi_L = 3\pi\sigma^2 n_L$ , con  $n_L = N_L / A$  su densidad numérica superficial y  $N_L$  su número. Ambos enantiómeros están presentes en la misma cantidad  $N_L / 2$ .

La simulación computacional por dinámica molecular de partículas duras reviste dificultades técnicas difíciles de superar. Por este motivo, en la literatura suelen utilizarse potenciales de interacción de corto alcance y muy repulsivos al contacto.<sup>8</sup> Entre ellos, el potencial cortado de Mie 50-49,<sup>9</sup>

$$\beta u(r) = \begin{cases} 50 \left(\frac{50}{49}\right)^{49} \epsilon \left[ \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{50} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{49} \right] + \epsilon & \text{si } r < \left(\frac{50}{49}\right) \sigma \\ 0 & \text{si } r \geq \left(\frac{50}{49}\right) \sigma \end{cases}, \quad (1)$$

ha demostrado capturar las propiedades estructurales de sistemas de esferas duras con gran precisión. Nosotros lo utilizaremos para modelar la interacción dura entre los elementos base, de tal forma que la anisotropía de las partículas quirales es capturada automáticamente al fijar la distribución interna de las esferas que las componen. En la Ecuación (1),  $r$  es la distancia entre los centros de las partículas básicas, tomamos  $\epsilon = 0.8$  y  $\beta = 1/k_B T$ , con  $k_B$  la constante de Boltzmann y  $T$  la temperatura absoluta del sistema.

El modelo descrito arriba se implementa en un esquema de simulaciones por dinámica molecular utilizando la paquetería ESPResSo.<sup>10</sup> Al principio se colocan todas las partículas quirales en una red cuadrada y los depletantes en una configuración aleatoria, descartando superposiciones. Se deja que el sistema termalice a lo largo de  $10^4$  ciclos de simulación y posteriormente se le permite evolucionar otros  $150 \times 10^6$  ciclos, para tomar estadísticas. La principal función de estructura que calculamos es la función de distribución radial  $g(r)$  de los vértices de las partículas quirales.<sup>3</sup> Ésta nos dice cuál es la probabilidad de encontrar el vértice de una de ellas a la distancia  $r$  del de alguna otra.<sup>11</sup> A distancias tan grandes que las partículas quirales no puedan chocar al girar,  $r \gtrsim 9\sigma$ , el valor de  $r$  no proporciona información sobre posibles correlaciones entre sus orientaciones. Sin embargo, a distancias cortas,  $\sigma \lesssim r \lesssim 3\sigma$ , uno puede obtener información sobre las correlaciones orientacionales buscando aquellas orientaciones en las que las partículas no se superponen a dichas distancias. Es de esta forma que utilizamos la  $g(r)$  para averiguar cómo se acomodan entre sí las partículas cercanas.

## RESULTADOS

En la Figura 1 puede observarse una visualización de cuatro configuraciones típicas de sendos sistemas con  $\varphi_L = 0.175$  y cuatro valores de  $\varphi_D$ : (a) 0.1, (b) 0.15, (c) 0.2 y (d) 0.25. Las partículas quirales se muestran en los colores rojo y azul. Llamaremos partículas L o derechas a las azules. A las rojas las llamaremos izquierdas y son la imagen especular de las azules. Los depletantes no se muestran, pero están allí. La pequeña protuberancia añadida al brazo largo de las partículas quirales muestra su centro de masa. A nivel visual, el principal efecto de aumentar la concentración de depletantes es incrementar la probabilidad de formación de conglomerados de partículas en un acoplamiento llave-cerrojo repetitivo, como los que se muestran dentro del círculo amarillo en (d). Pareciera haber cierta predilección por la formación de conglomerados homocirales, pero es difícil determinarlo a simple vista.

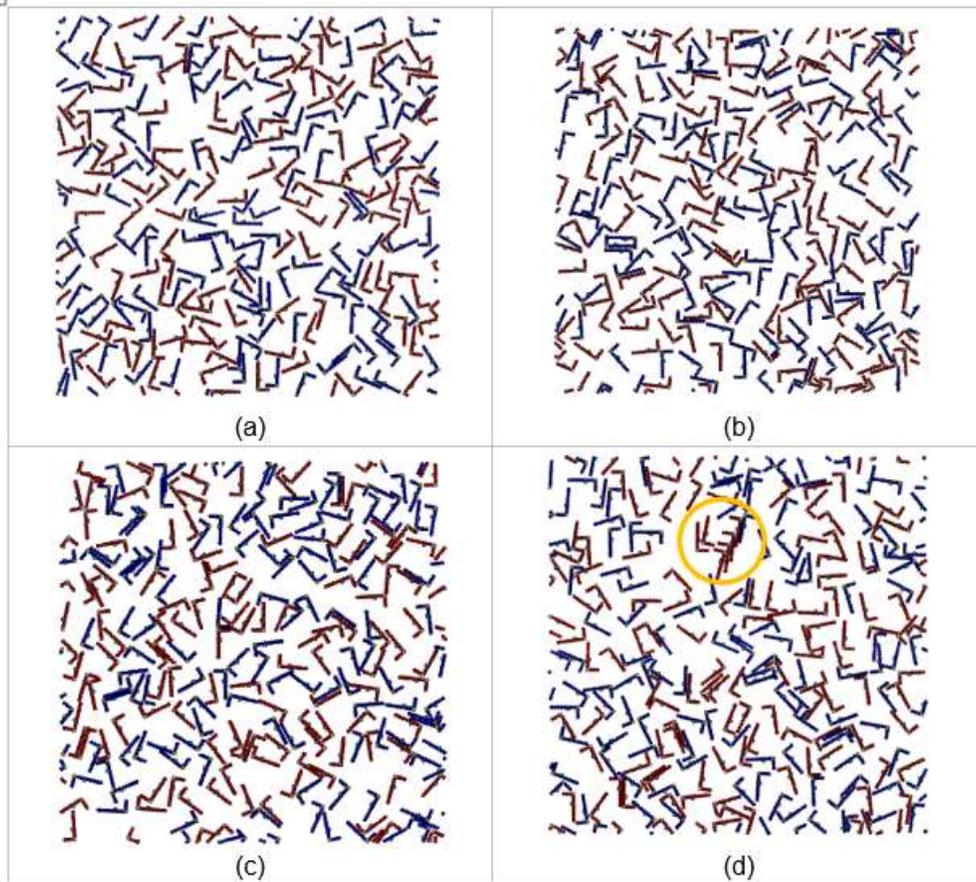
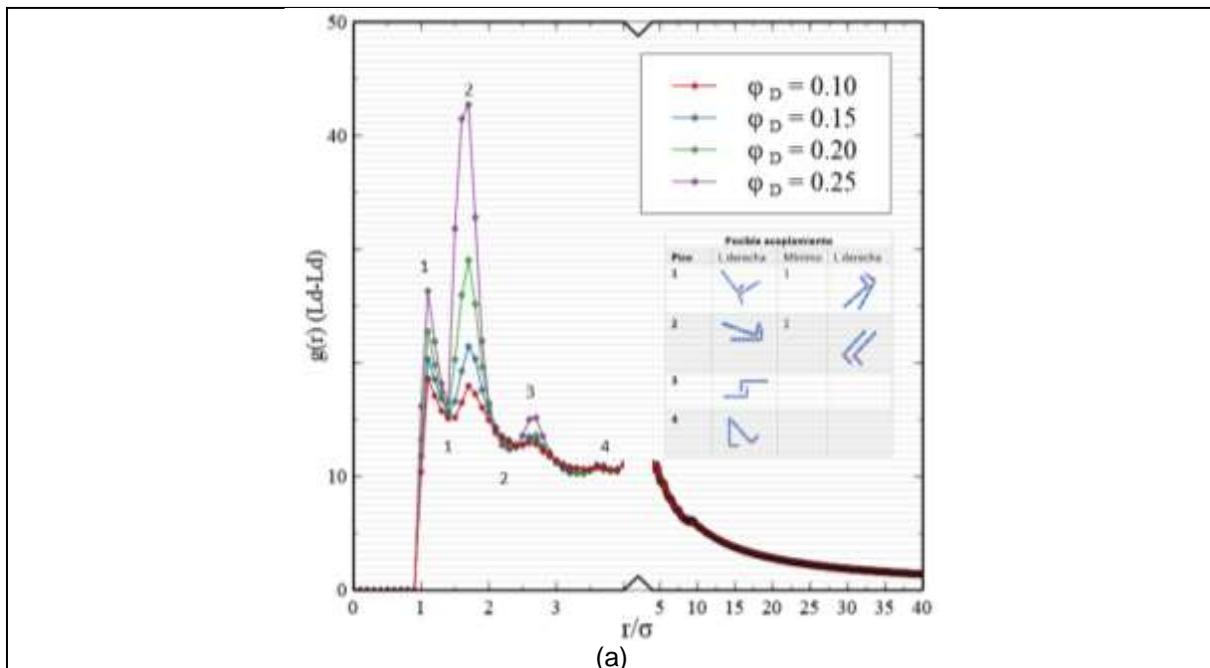


Figura 6: Visualización de cuatro configuraciones típicas de sendos sistemas con  $\varphi_L = 0.175$  y cuatro valores de  $\varphi_D$ : (a) 0.1, (b) 0.15, (c) 0.2 y (d) 0.25.

La Figura 2 muestra las funciones de distribución radial (a) entre partículas derechas, (b) entre partículas izquierdas y (c) cruzada, entre partículas derechas e izquierdas, para los mismos parámetros de la Figura 1, es decir,  $\varphi_L = 0.175$  y cuatro valores de  $\varphi_D$ : 0.1, 0.15, 0.2 y 0.25. En (a) también se muestran algunas configuraciones identificadas en la Figura 1, compatibles con las posiciones de los primeros máximos y mínimos de la función de distribución entre partículas derechas. Como era de esperarse, las  $g(r)$ 's derecha-derecha e izquierda-izquierda son iguales, dentro de las fluctuaciones estadísticas. Todas las funciones muestran un máximo en  $r \approx \sigma$  que es mucho más pronunciado en la cruzada. Éste corresponde a los choques codo con codo, como en

el símbolo  $\gg$  o en la configuración del primer pico mostrado en la Figura 2(a), que difícilmente permitirá el acercamiento de más partículas, por efectos de exclusión de volumen, lo que desfavorece la formación de agregados.

Todas las funciones muestran un segundo pico en  $r \approx 1.7\sigma$  que es mucho más reducido en la cruzada. Éste está asociado con un acoplamiento llave-cerrojo, como en el símbolo  $\ll$  o en la configuración del segundo pico mostrado en la Figura 2(a), que favorece la formación de cúmulos homoquirales, como los mostrados dentro del círculo amarillo en la Figura 1(d). Además, los primeros máximos y mínimos de todas las funciones de correlación están muy por arriba del límite asintótico  $g(r) = 1$  de decorrelación, lo que implica que todas esas configuraciones son más favorecidas que la distribución aleatoria. Más aún, en la Figura 2(a) puede verse que al igual que el segundo máximo los primeros dos mínimos también están asociados a acoplamientos tipo llave-cerrojo, lo que ayudaría todavía más a la formación de agregados homoquirales. Sin embargo, la  $g(r)$  cruzada también está muy por arriba de 1 a distancias cortas, lo que indica que las estructuras heteroquirales de igual forma ocurren con frecuencia.



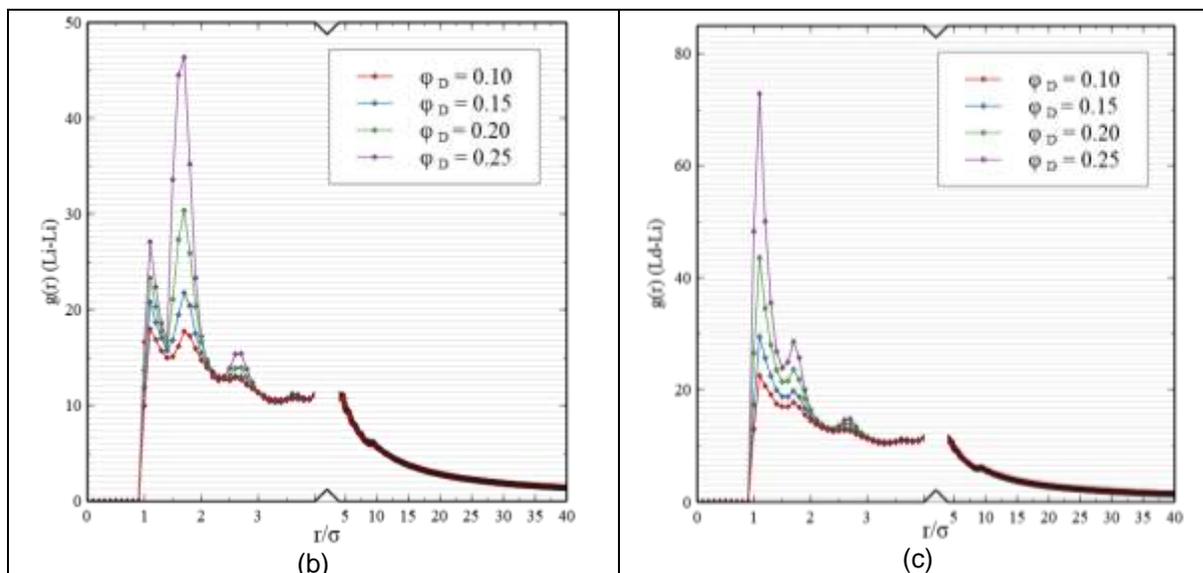


Figura 7: Funciones de distribución radial (a) entre partículas derechas, (b) entre partículas izquierdas y (c) cruzada, entre partículas derechas e izquierdas, para los mismos parámetros de la Figura 1, es decir,  $\varphi_L = 0.175$  y cuatro valores de  $\varphi_D$ : 0.1, 0.15, 0.2 y 0.25.

## DISCUSIÓN Y CONCLUSIONES

Usando un modelo coloidal de racematos bidimensionales de partículas en forma de L hemos demostrado que las fuerzas de vaciado entrópico inducidas por depletantes esféricos amplifican las correlaciones a distancias cortas, favoreciendo la formación de aglomerados homoquirales. No obstante, aunque en menor medida, también parecen ayudar en la formación simultánea de estructuras heteroquirales. La pregunta que nos hacemos ahora es hasta qué punto es posible manipular el efecto entrópico para lograr cualquiera de los dos resultados opuestos: (a) estabilizar el sistema o (b) desestabilizarlo. En el primer caso tendríamos un racemato homogéneo estable, mientras que en el segundo una posible segregación por quiralidad. En busca del segundo aumentamos la concentración de moléculas quirales y observamos un remarcado cuantitativo global del perfil de las funciones de distribución, sin que éste cambiara cualitativamente.<sup>12</sup> Esto parece indicar que la función de seleccionar a los enantiómeros por quiralidad recae completamente en los depletantes, en su concentración y forma. No obstante, extender nuestro estudio para explorar dichas variables con más detalle requiere un poder de cómputo mucho mayor y, consecuentemente, más tiempo. Además de la implementación simultánea de técnicas de teoría de líquidos que nos permitan analizar el límite termodinámico de nuestras correlaciones y su divergencia crítica.<sup>11</sup> Nuestra motivación, sin embargo, escala en la misma proporción: encontrar un mecanismo entrópico de segregación por quiralidad que pueda exportarse al dominio molecular.

## BIBLIOGRAFÍA

1. R. A. L. Jones, "Soft Condensed Matter" (Oxford, 2002).
2. H. N. W. Lekkerkerker y R. Tuinier, "Colloids and the Depletion Interaction" (Springer, 2011).
3. M. P. Allen y D. J. Tildesley, "Computer Simulation of Liquids" (Oxford, 1993).
4. M. Collado Lozano, "Aminoácidos naturales como materiales de partida en la preparación de nuevos reactivos y catalizadores enantioselectivos." Tesis doctoral (Universidad Jaime I de Castellón. Departamento de química inorgánica y orgánica, 2014).

5. J.A. Martínez Gonzales, R. Pablo Pedro, J.C. Armas Pérez, G.A. Chapela, y J. Quintana H. "Chiral segregation of hockey-stick shaped particles in two dimensions", RSC Adv. 4, 20489–20495 (2014).
6. F.A. Carey. "Química orgánica 6ª edición" (McGraw-Hill, 2006).
7. R. Castañeda Priego, A. Rodríguez López y J. M. Méndez Alcaraz, "Depletion forces in two-dimensional colloidal mixtures", J. Phys.: Condens. Matter 15, S3393 (2003).
8. C. A. Báez, A. Torres Carbajal, R. Castañeda Priego, A. Villada Balbuena, J. M. Méndez Alcaraz y S. Herrera Velarde, "Using the second virial coefficient as physical criterion to map the hard-sphere potential onto a continuous potential", J. Chem. Phys. 149, 164907 (2018).
9. J. Jover, A. J. Haslam, A. Galindo, G. Jackson y A. Müller, "Pseudo hard-sphere potential for use in continuous molecular-dynamics simulations of spherical and chain molecules", J. Chem. Phys. 137, 144505 (2012).
10. ESPResSo. "ESPResSo user's guide" (Espressomd, 2015).
11. J.-P. Hansen y I. R. McDonald, "Theory of Simple Liquids" (2ª Edición, Academic Press, 1986).
12. Michelle Sosa Aranda, "Exploración de segregación entrópica en una mezcla racémica bidimensional a través de dinámica molecular", Tesis de Licenciatura en Ingeniería Bioquímica (Instituto Tecnológico Superior de Xalapa, 2021).

## ANÁLISIS DE LA ESTABILIDAD DEL ADN MEDIANTE DINÁMICA MOLECULAR BAJO PRESIÓN HIDROSTÁTICA ALTA

Alma Delia Olivares Martínez<sup>1</sup>, Ramón Castañeda Priego<sup>2</sup>, Salvador Herrera-Velarde<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>Subdirección de Investigación y Posgrado, Instituto Tecnológico Superior de Xalapa, <sup>2</sup>División de Ciencias e Ingenierías, Campus León, Universidad de Guanajuato, León, Guanajuato, México.  
alma\_omtz@hotmail.com

### RESUMEN

El ácido desoxirribonucleico (ADN) es una biomolécula que almacena toda la información genética para el funcionamiento y el desarrollo de los seres vivos. La molécula desarrolla diferentes funciones como la replicación, donde su información es duplicada y transmitida a otra célula, y la transcripción, proceso en el que se genera una nueva proteína. El ADN presenta un cambio estructural llamado desnaturalización que consiste en la separación de las cadenas que conforman la biomolécula debido al rompimiento de más del 50% de los enlaces de hidrógeno. Este fenómeno ha sido muy estudiado bajo efectos térmicos tanto experimentalmente como en simulación molecular. Sin embargo, recientemente ha surgido un gran interés en estudiar a biomoléculas como proteínas y ADN en condiciones de presión, esto, debido a la posibilidad de que la presión generada por la aglomeración de los distintos compuestos en el interior de las células afecte la conformación de dichas moléculas. En el presente trabajo estudiamos el ADN mediante Dinámica Molecular Atomística. Con esta metodología se pretende entender lo que ocurre con ésta biomolécula en condiciones de presiones hidrostáticas altas y analizar un posible escenario de desnaturalización. Las simulaciones se llevaron a cabo utilizando el paquete científico denominado GROMACS. Para representar la molécula de ADN de doble cadena tipo B, utilizamos un archivo PDB (1BNA) en conjunto con el campo de fuerza AMBER parmbsc1. Realizamos simulaciones en una caja computacional cúbica con solvente explícito, utilizando el modelo de agua TIP3P. Para la fase de equilibrio utilizamos el ensamble NVT y NPT, durante al menos 10 ns a una temperatura de 300 K. Posteriormente, en la fase de producción realizamos distintas simulaciones en el ensamble NPT, durante 150 ns y a una temperatura de 310 K para los cuatro valores de presión escogidas (1 bar, 500 bar, 1000 bar y 1500 bar). Para analizar visualmente la estructura de la biomolécula empleamos el programa VMD. La estabilidad estructural de la cadena de ADN se estudió con herramientas propias de GROMACS. Analizamos el comportamiento de la estructura a las diferentes presiones a través del radio de giro y el RMSD. Así mismo, estudiamos los enlaces de hidrógeno, donde se observó que éstos se forman y rompen a lo largo de la simulación, pero mantienen en promedio un número de enlaces constante. Los resultados de simulación demuestran la gran estabilidad que tiene la molécula de ADN bajo las condiciones de presión aquí consideradas.

### INTRODUCCIÓN

El ácido desoxirribonucleico, mejor conocido como ADN, tiene un rol fundamental en los seres vivos. Almacena toda la información genética para el funcionamiento de la célula y el desarrollo de las diferentes actividades que ésta desempeña<sup>1</sup>. Además, realiza funciones como la replicación, la transcripción y la traducción. La replicación del ADN se efectúa durante la división celular donde una de las hebras es sintetizada para crear una nueva hebra, transmitiéndose así la información que contiene la molécula<sup>3</sup>. Por otro lado, en la transcripción, la información genética contenida en el ADN se copia para crear el ARNm (ácido ribonucleico mensajero), que posteriormente será “leída” (traducción) en el ribosoma y con ayuda de los aminoácidos se creará una proteína<sup>3</sup>.

En condiciones normales, el ADN es relativamente estable, aunque en ciertos procesos celulares (como la replicación o la transcripción) llegan a separarse más del 50% de las dos hebras que la conforman, presentándose así el proceso de desnaturalización de la biomolécula. Este fenómeno se ha estudiado bajo efectos térmicos, donde al elevar gradualmente la temperatura, llega un punto

en que las cadenas de ADN se separan; este proceso ha sido analizado tanto a nivel experimental (en laboratorios) como en simulación molecular<sup>1,3,4,5</sup>.

Recientemente ha surgido un gran interés por estudiar la estructura de proteínas, ADN y otras biomoléculas bajo ciertas condiciones de presión<sup>2</sup>. Algunas investigaciones sugieren que la aglomeración en ambientes biológicos reales, como es al interior de la célula, puede afectar la estructura y dinámica de las biomoléculas, esto debido a la presión que se genera por el hacinamiento de las diferentes especies moleculares<sup>2</sup>. En el caso del ADN, son escasas las investigaciones realizadas bajo condiciones de presión alta, la mayoría de los trabajos son principalmente de carácter experimental y solo unos pocos mediante simulación computacional<sup>6-9</sup>.

Los estudios experimentales tienen un papel relevante, sin embargo, una herramienta que actualmente ha sido de gran ayuda para estudiar distintas biomoléculas, sus características y las interacciones en conjunto con otros compuestos es la llamada simulación computacional, específicamente la Dinámica Molecular (DM). Con esta herramienta sería posible comprender qué sucede a nivel molecular con la estructura del ADN bajo distintas presiones, información que a nivel experimental sería muy difícil de obtener.

En el presente trabajo estudiamos mediante Dinámica Molecular Atomística la estabilidad estructural de la biomolécula del ADN tipo B bajo condiciones de presión hidrostática alta. En la siguiente sección abordamos algunos aspectos básicos del ADN y la Dinámica Molecular. Posteriormente explicamos el protocolo de simulación empleado, y posteriormente presentamos los resultados obtenidos. En la última sección presentamos las conclusiones y perspectivas.

## MARCO TEÓRICO

El ADN se encuentra en todas las células de un organismo, contiene la información genética y los genes que controlan diferentes actividades de la célula. El estudio del ADN comenzó con el descubrimiento de las primeras células por Robert Hooke (en 1665). Para 1831, el botánico escocés Robert Brown halló el núcleo de células eucariotas. Después, en 1869, Johan Friedrich Miescher identificó una sustancia en el núcleo a la que llamó "nucleína", en estudios posteriores se descubrió que el material contenía propiedades ácidas denominándose así "ácido nucleico", y finalmente se le conoció como Ácido Desoxirribonucleico (ADN)<sup>1</sup>. Para 1950, Rosalind Franklin empieza a trabajar con la cristalografía de rayos X en ADN y un año después descubre la forma B del ADN. Posteriormente, en 1953 James Watson y Francis Crick plantearon la estructura de la biomolécula<sup>10</sup>.

El ADN está conformado por genes, los cuales a su vez se componen por una secuencia de nucleótidos que son conocidos como las unidades básicas de la molécula. Los nucleótidos están constituidos por una pentosa llamada desoxirribosa, que es un azúcar de cinco carbonos la cual carece de un oxígeno en el carbono dos. En el azúcar, el carbono 5 se une a un grupo fosfato y el carbono 1 se une a una base nitrogenada, formando así un nucleótido (Figura 1). Las bases nitrogenadas son: las pirimidinas, que presentan un anillo en forma hexagonal y las purinas que poseen dos anillos, uno pentagonal y otro hexagonal unidos entre sí (Figura 1). Las purinas del ADN son adenina (A) y guanina (G), y las pirimidinas son citosina (C) y timina (T). De esta forma, una adenina se une a la timina y una guanina con una citosina, formando así los pares de base AT y GC. El ADN está conformado por dos cadenas de nucleótidos, estas hebras están unidas y enrolladas formando una doble hélice<sup>1,3</sup>.

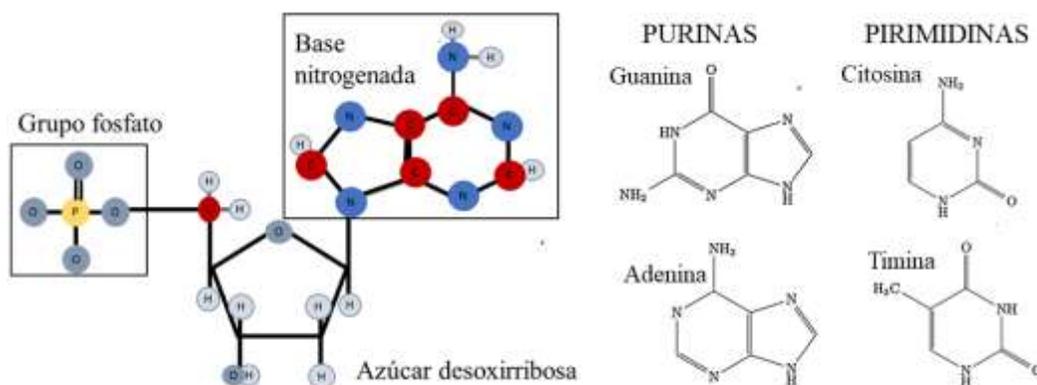


Figura 8. Nucleótido y bases nitrogenadas.

Como se ha mencionado anteriormente, el ADN puede experimentar un cambio estructural debido al rompimiento de los enlaces de hidrógeno (generados entre las bases nitrogenadas). Este fenómeno en el cual se separan las hebras que conforman al ADN se conoce como desnaturalización<sup>1,3</sup> y ocasiona que se pierda la estructura nativa. La separación de las cadenas del ADN se puede observar de forma *in vitro* (condición ambiente controlada fuera del organismo vivo) por el aumento de la temperatura, pH extremo u otras condiciones<sup>3</sup>. Por otra parte, motivados por resultados experimentales y de simulación donde se observó que las proteínas bajo condiciones de presión llegaban a desplegarse y desnaturalizarse<sup>11</sup>, se comenzó a investigar el efecto que puede producir la presión en la conformación nativa del ADN. Una herramienta de gran ayuda para explorar y comprender a nivel microscópico los cambios conformacionales en la molécula es la simulación computacional mediante Dinámica Molecular Atomística<sup>2</sup>.

### Dinámica Molecular

Es un método basado en la segunda ley de Newton para simular el movimiento de partículas. Es una técnica muy conveniente para entender y predecir las propiedades de una gran variedad de sistemas biológicos como lípidos, ácidos nucleicos, membranas, proteínas, entre otros. En una DM atomística se tiene una representación explícita de cada átomo que conforma a las biomoléculas y con ello se consigue un modelado más detallado y realista del sistema. Debido a la complejidad en el tipo y número de interacciones, así como al gran número de átomos presentes en un sistema biomolecular estándar, la importancia de la DM atomística deriva en la relativa facilidad de lograr representar y modelar dichos sistemas. Por otro lado, proporciona una estimación del comportamiento del sistema como si se tratase de un experimento realizado en el laboratorio, o en dado caso, replicar exitosamente lo observado a nivel experimental<sup>12-14</sup>.

La simulación computacional es una gran herramienta para estudiar la estructura y la dinámica de moléculas biológicas<sup>15</sup>. Para ello, se han desarrollado e implementado los denominados campos de fuerza, donde se describe la energía de un sistema en función de las coordenadas de los núcleos de las moléculas. En general, un campo de fuerza está diseñado y parametrizado para reproducir algunas propiedades experimentales y físicas; para reproducir todas las propiedades de un mismo sistema es necesario emplear distintos campos. Para aplicar un campo de fuerza en un sistema se utilizan las interacciones entre las moléculas, estos campos en su mayoría se basan en cinco términos (Ecuación 1). Los primeros tres términos representan la suma de los enlaces, los ángulos y los ángulos de torsión; en los dos últimos términos se consideran todas las interacciones a distancia entre pares de átomos<sup>13-15</sup>. Para simular el ADN se han propuesto distintos campos: CHARMM, XPLOR y AMBER<sup>9,15-17</sup>. Este último campo de fuerza se ha utilizado para ácidos nucleicos desde 1990 y ha ido evolucionando al paso de los años; en cada versión se ha buscado mejorar y corregir los parámetros para que muestre las características más cercanas a la biomolécula de ADN (Figura 2)<sup>16,17</sup>.

$$\begin{aligned}
 U(r_1, \dots, r_N) = & \sum_{\text{enlace}} \frac{a_i}{2} (l_i - l_{i0})^2 + \sum_{\text{ángulo}} \frac{b_i}{2} (\theta_i - \theta_{i0})^2 \\
 & + \sum_{\text{torsión}} \frac{c_i}{2} [1 + \cos(n\omega_i - \gamma_i)] \\
 & + \sum_{\text{pares de átomos}} 4\epsilon_{ij} \left[ \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] \\
 & + \sum_{\text{pares de átomos}} k \frac{q_i q_j}{r_{ij}}
 \end{aligned} \tag{1}$$



Figura 9. Evolución del campo de fuerza AMBER. Adaptado de “Assessing the current state of Amber force field modifications for DNA”, por Galindo et al., 2016, *Journal of Chemical Theory and Computation*, 12, p. 4115.

Otro factor al simular un sistema biológico es la representación del agua. A lo largo de los años se han desarrollado diferentes modelos físicos (modelos de agua) para representar una molécula de agua. Con cada modelo solo se puede obtener algunas de las propiedades presentes en el agua bajo ciertas condiciones, por lo tanto, no existe un único modelo capaz de reproducir todas las propiedades<sup>18,19</sup>. De hecho, cada campo de fuerza está parametrizado para un modelo particular de agua.

### Protocolo de simulación

Para efectuar el estudio del ADN mediante simulación ocupamos computadoras con el sistema operativo Linux Mint. Así mismo, utilizamos el software GROMACS (versión 5.1) para realizar la simulación de dinámica molecular y con ayuda del programa VMD se visualizó la biomolécula. Además, empleamos el graficador XMGRACE para representar los datos obtenidos con GROMACS.

Debido a que existen diversas estructuras de ADN, se escogió una de las más representativas: ADN-B, utilizando el archivo PDB 1BNA<sup>16,17</sup>. Este es un archivo que contiene la información estructural 3D del ADN tipo B (ADN-B). De igual forma, elegimos el campo de fuerza AMBER, en su más reciente versión (parmbsc1). Con este campo se han obtenido excelentes resultados al

simular y preservar la estructura de ADN. Los modelos de agua están asociados a los campos de fuerza; para el campo de fuerza AMBER parmbsc1 se han ocupado modelos de tres puntos<sup>16</sup>. En este trabajo usamos el modelo recomendado: TIP3P, que es uno de los modelos de agua más usados en moléculas biológicas debido a su eficiencia computacional<sup>18,19</sup>.

Para la simulación empleamos una caja computacional cúbica con solvente explícito (agua). Para relajar la estructura se minimizó la energía del sistema durante 100 ps. Durante la etapa de equilibrio empleamos primero el ensamble NVT, donde se mantuvo constante el número de partículas (N), el volumen (V) y la temperatura (T) del sistema empleando el termostato V-rescale a 300 K. Posteriormente realizamos una etapa de equilibración NPT con el baróstato Berendsen a 1 bar de presión. Para realizar la fase de producción utilizamos como valor de referencia 1 bar. Los valores de las presiones altas las escogimos acorde a valores experimentales y de simulación reportados en la literatura<sup>8,9,11,20</sup>: 500 bar, 1000 bar y 1500 bar. Las simulaciones a presiones elevadas se realizaron con el ensamble NPT a 310 K, que es una temperatura cercana al cuerpo humano, y por un tiempo de simulación de 150 ns<sup>8,9,11,20</sup>.

## RESULTADOS

Durante la etapa de producción guardamos las trayectorias de las partículas y a partir de ahí calculamos diferentes observables, los cuales son representaciones gráficas que se obtienen al calcular las propiedades del sistema de interés. Para cuantificar la estabilidad conformacional del ADN-B, analizamos tres observables: enlaces de hidrógeno, radio de giro y la desviación cuadrática media (RMSD); los cuales se explicarán a continuación.

### Enlaces de hidrógeno

Los enlaces de hidrógeno (o puentes de hidrógeno) se forman entre un átomo de hidrógeno que está unido covalentemente a un átomo electronegativo, como un oxígeno o nitrógeno. En el ADN la formación de los enlaces se presenta por la unión entre las bases nitrogenadas (Figura 3), donde una purina se une con una pirimidina complementaria. De esta forma, una adenina (A) se une a una timina (T) formando dos enlaces, y una guanina (G) se junta a una citosina (C) creando tres enlaces<sup>1,3</sup>. Existen dos tipos de enlaces de hidrógeno entre las bases nitrogenadas: H-O e H-N. En el caso de H-O, la distancia es de aproximadamente 0.29 nm (2.9 Å) en la GC, mientras que en AT es de 0.28 nm (2.8 Å), y la distancia en el enlace H-N es de aproximadamente 0.30 nm (3.0 Å). La presencia de los puentes de hidrógeno en el ADN es de vital importancia puesto que mantienen unidas las cadenas que conforman a la biomolécula y dan estabilidad a la estructura<sup>21</sup>.

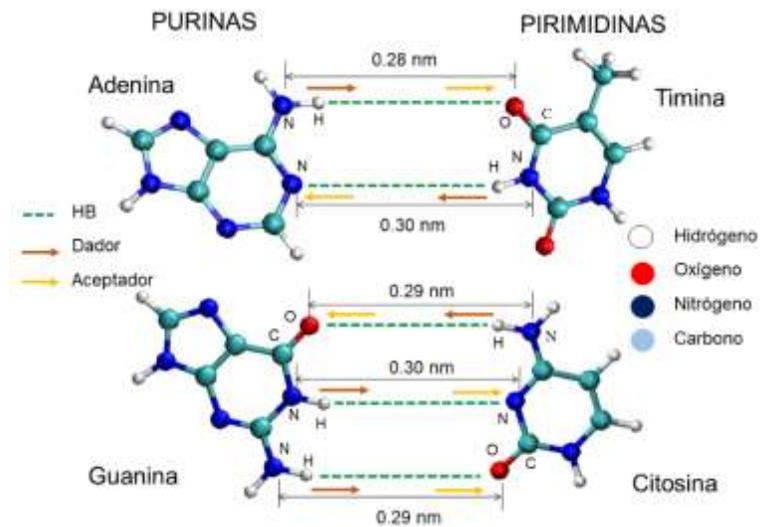
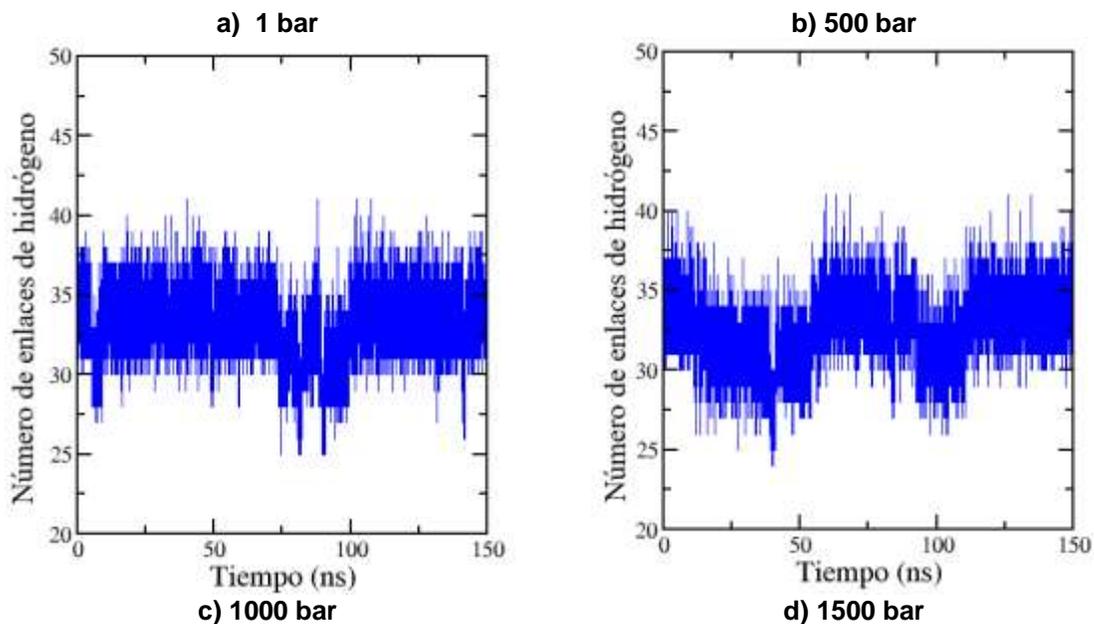


Figura 10. Enlaces de hidrógeno entre bases nitrogenadas. Adaptado de *Biochemistry* (p.301) por R. H. Garrett y C. M. Grisham, 2010, Brooks/Cole, Cengage Learning.

El análisis de los enlaces de hidrógeno se realizó a lo largo de toda la trayectoria de simulación (150 ns) con el programa GROMACS. En condiciones estándar de presión y temperatura, el modelo de ADN (1BNA) ocupado presenta cuatro pares de base AT y ocho de GC, teniendo así un total de 32 enlaces de hidrógeno. Como se observa en la Figura 4, los enlaces oscilan entre los 25 y 40 aproximadamente, mostrando un promedio general cercano a los 32 enlaces; promedio que también se obtuvo en otro trabajo de investigación donde emplearon el campo de fuerza AMBER parmbsc1<sup>17</sup>. De acuerdo a algunos autores, la disminución en el número de puentes de hidrógeno se puede atribuir a un comportamiento que se presenta en los pares de base terminales conocido como “deshilachado” (fraying)<sup>16</sup>, donde los enlaces entre los pares de base se rompen. Por otro lado, la formación de más puentes de hidrógeno en el ADN se debe a que las bases también pueden formar enlaces con el entorno, como es el agua<sup>21</sup>.



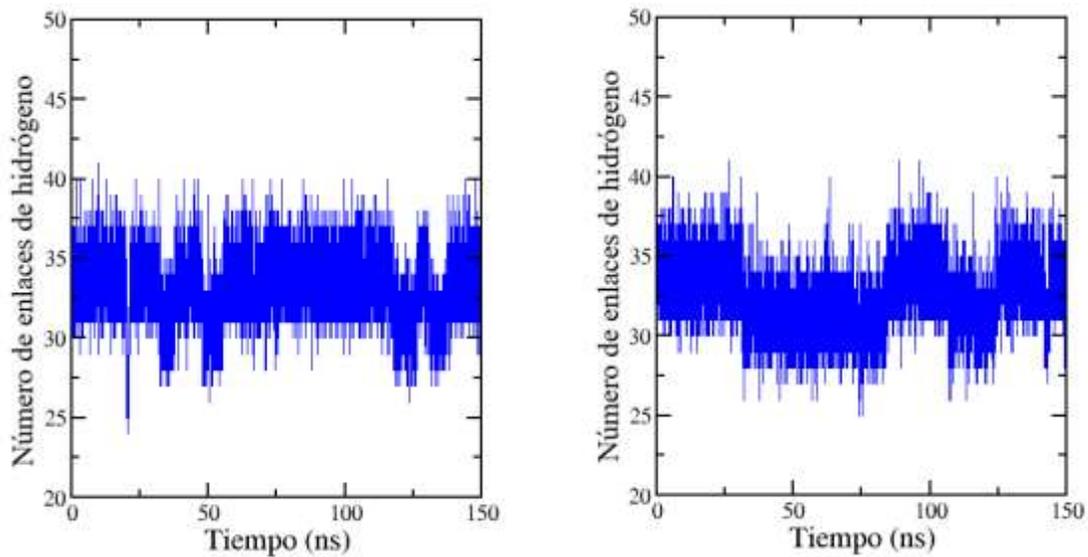


Figura 11. Enlaces de hidrógeno en función del tiempo a diferentes condiciones de presión.

Observando el comportamiento anterior de los enlaces de hidrógeno indagamos acerca de cuantos enlaces se forman en el ADN en un determinado tiempo de simulación (a 1 ns, a 10 ns y a 50 ns). Las gráficas obtenidas (Figura 5) corresponden a una distribución de probabilidad normal, también conocida como distribución Gaussiana o campana de Gauss<sup>22</sup>. De estas distribuciones se puede obtener la probabilidad de encontrar el número de enlaces de hidrógeno que más frecuencia tiene (eje Y) en un intervalo de enlaces (eje X) a un cierto instante de tiempo<sup>22</sup>. Las gráficas exhiben que la curva comienza a crecer en los 25 enlaces y después de los 35 vuelve a decaer. El pico de cada curva para cada valor de presión e instante de tiempo estudiado, se encuentra en el intervalo de 30 a 35 enlaces, centrado aproximadamente dentro de los 32 enlaces. Este comportamiento Gaussiano se observa en todas las simulaciones realizadas a presiones altas. El valor encontrado es esencialmente el mismo que el valor reportado en condiciones de presión y temperatura estándar lo cual demuestra la estabilidad estructural que presenta la estructura de ADN ante efectos de presión.

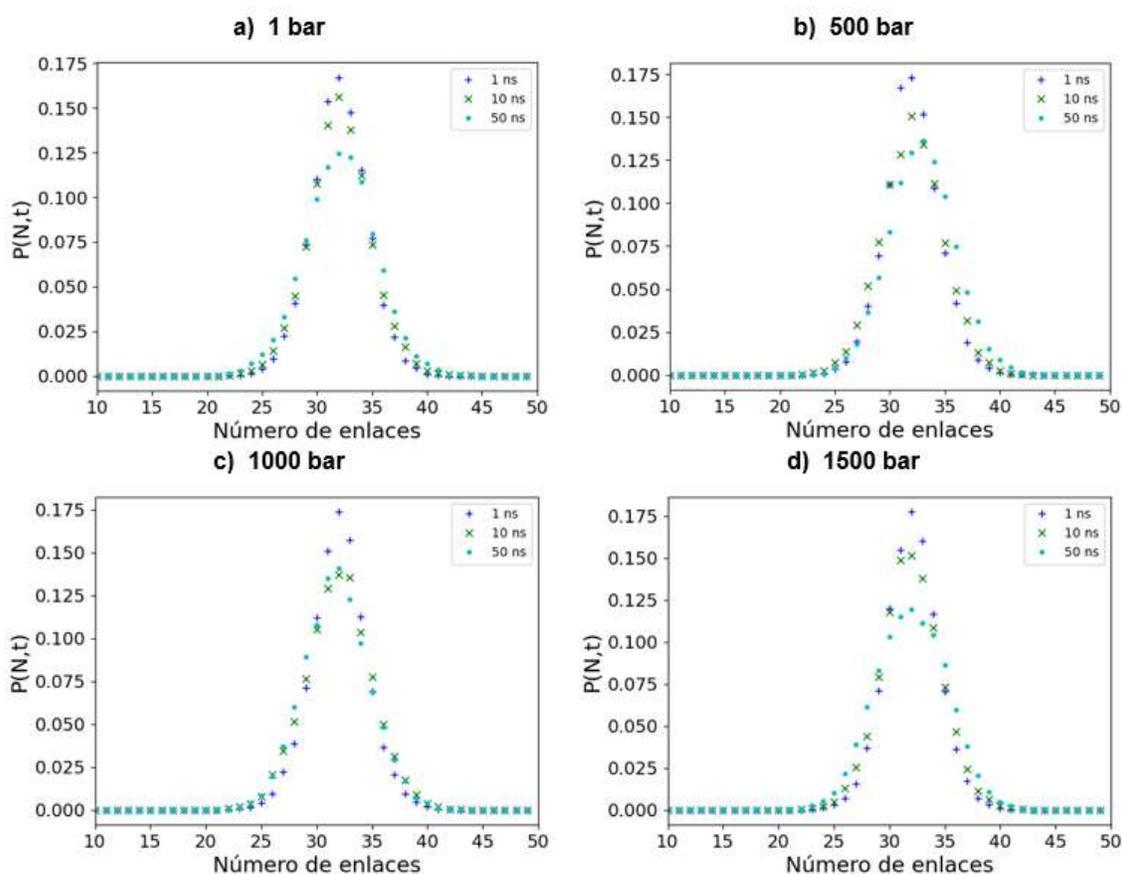


Figura 12. Distribución de probabilidad de los enlaces de hidrógeno.

### Radio de giro

Es una medida de compactibilidad de una estructura, para determinar si una molécula se mantiene estable a lo largo de una trayectoria<sup>23</sup>. Al calcular el radio de giro ( $R_g$ ) en las simulaciones a presiones altas (Figura 6), observamos que oscilaba entre los 36 y 33 Å. En condiciones de 310 K y 1 bar el ADN exhibe un  $R_g$  en promedio de 35.03 Å. Para la presión de 500 bar, la estructura de ADN se compacta cerca del 1 %. También se puede observar que la curva a 500 bar oscila más en comparación con las producidas a 1000 bar y 1500 bar, donde se reduce el  $R_g$  aproximadamente un 2 % en cada caso, en comparación a la de 1 bar. La disminución del radio de giro indica que la estructura de ADN presenta una compactación al someterla a presiones elevadas. De acuerdo a investigaciones en proteínas, a valores menores a 1000 bar, la presión actuará principalmente para comprimir la biomolécula<sup>24</sup>.

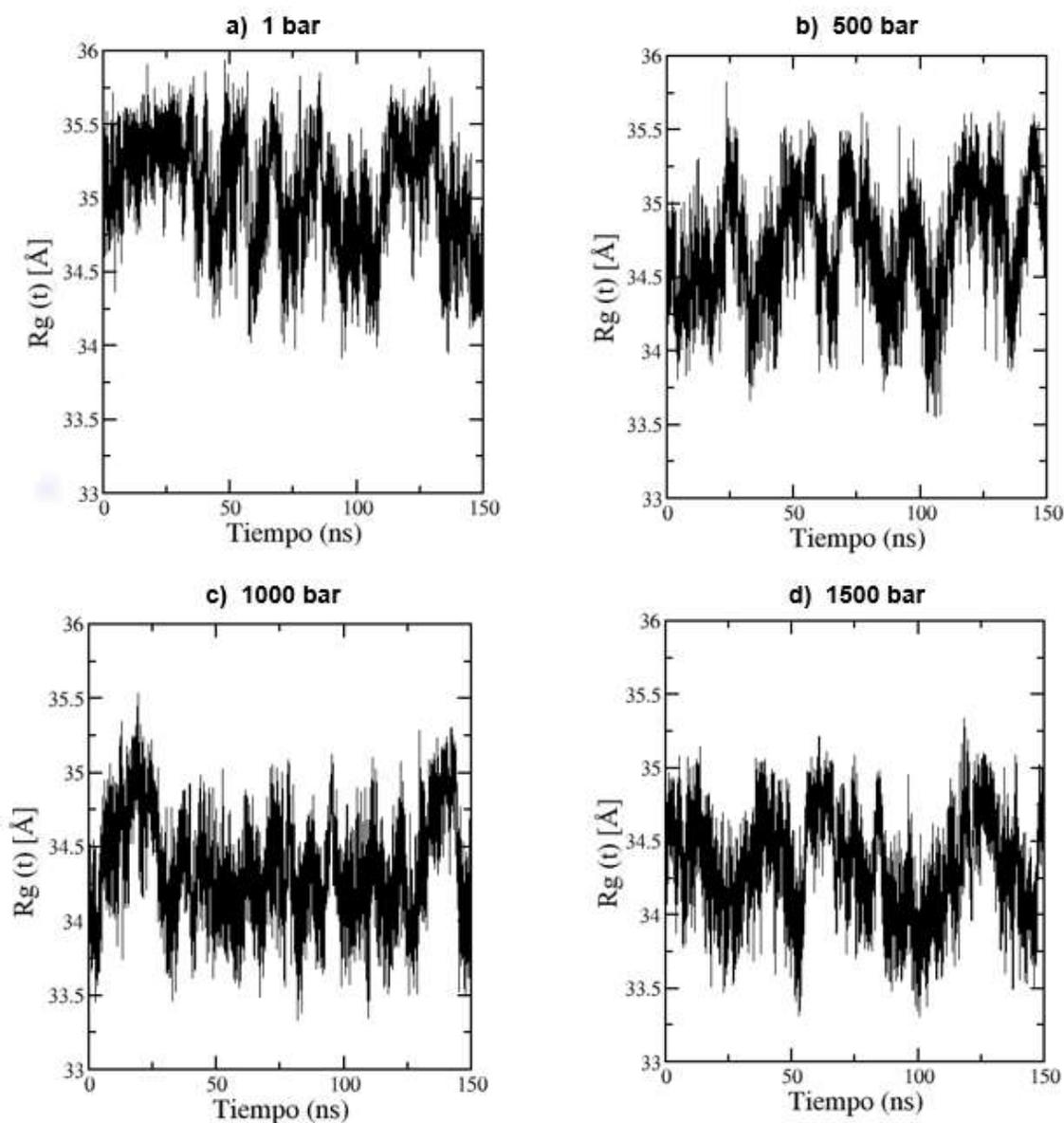


Figura 13. Radio de giro del ADN a diferentes condiciones de presión.

#### Desviación cuadrática media

La desviación cuadrática media o RMSD, determina la desviación de ciertos átomos en una molécula con respecto a una estructura de referencia<sup>23</sup>. Utilizamos el software GROMACS para calcular el RMSD (Figura 7) y comparamos la estructura a lo largo de la trayectoria para cada valor de presión con la estructura nativa del ADN-B. Tomamos como estructura de referencia la obtenida después de la minimización de energía a 1 bar. Para la simulación a condición estándar (310 K y 1 bar), el RMSD tiene un valor promedio de 3.2 Å, donde se observó una ligera discrepancia con los resultados obtenidos en este trabajo y los descritos en la literatura ocupando el ADN-B. De acuerdo con Ivani et al. (2016), el RMSD del ADN con el modelo 1BNA y el campo de fuerza parmbsc1, oscila entre 2.1 y 1.7 Å. De igual modo, Yildirim et al. (2018)<sup>25</sup> simularon estructuras el ADN-B rico

en GC, con el campo de fuerza CHARMM36 y el modelo de agua TIP3P, encontrando un valor entre 1.6 y 2.6 Å, a excepción de uno de los modelos que exhibió un valor de RMSD de 3.7 Å.

Por otro lado, en las simulaciones, obtuvimos una disminución cerca de 2.34% del RMSD con la presión más alta (1500 bar) en comparación a la estándar, mientras que a 500 bar y 1000 bar, el RMSD fue 1 y 1.6 %, respectivamente, menor que 1 bar. La ligera disminución en el valor del RMSD nos indica que el ADN-B presenta una alta estabilidad estructural ante efectos de presión, preservando en gran medida su conformación nativa<sup>26</sup> incluso para valores de presión de 1500 bar.

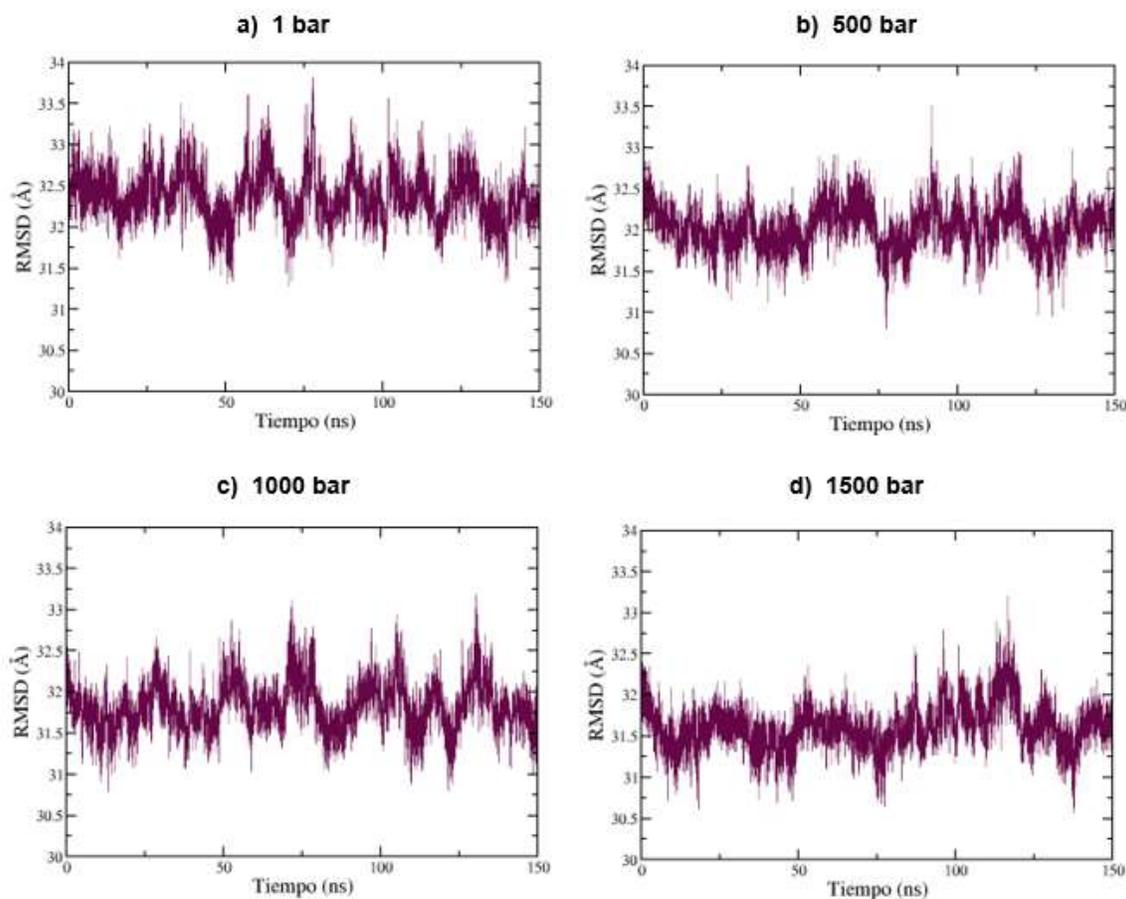


Figura 14. Cálculo del RMSD para el ADN-B a presiones elevadas.

### CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS

Simular mediante Dinámica Molecular atómica el ADN bajo condiciones de presión hidrostática alta nos provee de conocimientos acerca de la auto-organización de la biomolécula. La formación de los puentes de hidrógeno entre pares de base parecen ser los responsables de que se mantenga la estructura y estabilidad bajo condiciones extremas. Esto se corroboró por un lado con el cálculo del radio de giro y la desviación cuadrática media; ambos observables muestran cambios mínimos en la estructura del ADN-B bajo el efecto de altas presiones. Por otra parte, aunque el número de enlaces de hidrógeno oscilaba, esto es, se observó la formación y rompimiento de enlaces a lo largo del tiempo de simulación, dicho número en promedio mostró un valor cercano a los 32 enlaces que también exhibe la estructura original del modelo empleado. De esta forma,

concluimos que el ADN no presenta una desnaturalización bajo las condiciones de presión empleadas y mantiene su estructura nativa, demostrando una gran estabilidad.

Considerando que los cambios observados en este trabajo son muy pequeños, en futuras investigaciones emplearemos un tiempo de simulación mayor y presiones más elevadas. También tenemos contemplado estudiar otros parámetros estructurales de la biomolécula y analizar si se presentan cambios conformacionales, de deslizamiento, en la longitud de los surcos. Este tipo de análisis sería de gran valía para comprender los efectos en condiciones extremas en la actividad genética del ADN y cómo se modifica su interacción con proteínas o fármacos.

## BIBLIOGRAFÍA

1. Thieman W. y Palladino M. (2010). Introducción a los genes y genomas. (2da ed.) *Introducción a la Biotecnología*. (pp.26-56) Madrid, España. Pearson.
2. Feig, M., Yu, I., Wang, P., Nawrocki, G., Sugita, Y. (2017) Crowding in cellular environments at an atomistic level from computer simulation. *The Journal of Physical Chemistry*. 121. 8009-8025.
3. Voet, D. y Voet, J. (s.f.) Bioquímica. Capítulo 28 Estructura y manipulación de los ácidos nucleicos (pp. 842- 907) México. Médica Panamericana.
4. Kundu S., Mukherjee S. y Bhattacharyya D. (2012). Effect of Temperature on DNA double helix: an insight from Molecular Dynamics Simulation. *J. Biosci.*, 37(3). 445-455. DOI 10.1007/s12038-012-9215-5
5. Macedo, D., Guedes, I. y Albuquerque, E. (2014). Thermal properties of a DNA denaturation with solvent interaction. *Physica A*, 404, 234–241. <http://dx.doi.org/10.1016/j.physa.2014.02.029>
6. Dubins, D., Lee, A., Macgregor, R., y Chalikian T. (2001) On the stability of double stranded nucleic acids. *J. Am. Chem. Soc.*, 123 (38) 9254-9259.
7. Macgregor, R. (1998). Effect of hydrostatic pressure on Nucleic Acid. *Biopolymers (Nucleic Acid Sciences)*, (48) 253-263.
8. Somkuti, J., Adányi, M. y Smeller, L. (2019) Self-crowding influences the temperature-pressure stability of the human telomere G-quadruplex. *Biophysical Chemistry*, 254, 1-7.
9. Wilton D., Ghosh M., Chary K., Akasaka K. y Williamson M. (2008). Structural change in A B-DNA helix with hydrostatic pressure. 36(12) 4032-4037. DOI:10.1093/nar/gkn350
10. Piro, O. (2014). Breve historia del ADN, su estructura y función. *Ciencia e Investigación*. 64(3). 25-50.
11. Hata, H., Nishiyama, M. y Kitao, A. (2019). Molecular dynamics simulation of proteins under high pressure: Structure, function and thermodynamics. *BBA General Subjects*. <https://doi.org/10.1016/j.bbagen.2019.07.004>
12. Beck, D., y Daggett, V. (2004). Methods for molecular dynamics simulations of protein folding/unfolding in solution. *Methods*, 34(1), 112–120. <https://doi.org/10.1016/j.ymeth.2004.03.008>
13. Braun E., Gilmer J., Mayes H. B., Mobley D. L., Monroe J. I., Prasad S., y Zuckerman D. M. (2019). Best Practices for Foundations in Molecular Simulations [Article v1.0]. *Living Journal of Computational Molecular Science*, 1(1), 1–28. <https://doi.org/10.33011/livecoms.1.1.5957>
14. Meller, J. (2001). Molecular dynamics. *Topics in Applied Physics*, 107, 155–180. [https://doi.org/10.1007/11767862\\_8](https://doi.org/10.1007/11767862_8)
15. Monticelli, L. y Salonen, E. (2013). *Biomolecular Simulations Methods and Protocols*. Human Press. DOI 10.1007/978-1-62703-017-5
16. Galindo, R., Robertson, J., Zgarbová, M., Šponer, J., Otyepka, M., Jurečka, P., Cheatham, T. (2016) Assessing the current state of Amber force field modifications for DNA. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 12, 4114-4127.

17. Ivani, I., Dans, P., Noy, A., Pérez, A., Faustino, I., Hospital, A., ... Orozco, M. (2016). PARMBSC1: A refined force field for DNA simulations. *Nature Methods*, 13(1),1-7.
18. Ouyang, J. y Bettens, R. (2015). Modelling Water: A Lifetime Enigma. *CHIMIA International Journal For Chemistry*, 69(3), 104-111. doi: 10.2533/chimia.2015.104
19. Shvab, I. y Sadus, R. (2015). Atomistic Water Models: Aqueous thermodynamic properties from ambient to supercritical conditions. *Fluid Phase Equilibria*. DOI: <http://dx.doi.org/doi:10.1016/j.fluid.2015.07.040>
20. Takahashi S. y Sugimoto N. (2013). Effect of Pressure on Thermal Stability of G-Quadruplex DNA and Double-Stranded DNA Structures. 18. 13297-13319.
21. Garrett, R. y Grisham, C. (2010). *Biochemistry* (4th ed.). Belmont, CA: Brooks/Cole, Cengage Learning. ISBN-13: 978-0-495-10935-8
22. Mendenhall, W., Beaver, R. y Beaver, B. (2010). *Introducción a la probabilidad y estadística*. 13e. México, México. Cengage Learning Editores S.A. de C.V.
23. Reference Manual Versión 5.1 Gromacs. (1era ed.). Recuperado de <http://manual.gromacs.org/documentation/5.1/user-guide/index.html>
24. Espinosa, Y., Caffarena, E. y Grigera, R. (2019) The role of hydrophobicity in the cold denaturation of proteins under high pressure: A study on apomyoglobin. *The Journal of Chemical Physics*. 150, 075102-1-10. Doi: 10.1063/1.5080942
25. Yildirim, A., Brenner, N., Sutherland, R. y Feig, M. (2018). Role of protein interactions in stabilizing canonical DNA features in simulations of DNA in crowded environments. *BMC Biophysics*, 11(8), 1-15. <https://doi.org/10.1186/s13628-018-0048-y>
26. Zgarbová, M., Luque, F., Sponer, J., Cheatham, T. E. III, Otyepka, M. y Jurečka, P. (2013). Toward Improved Description of DNA Backbone: Revisiting Epsilon and Zeta Torsion Force Field Parameters. *Journal of chemical theory and computation*, 9(5), 2339–2354. <https://doi.org/10.1021/ct400154j>

## ANÁLISIS NUMÉRICO DEL ÁNGULO DE MEZCLA DEL REACTOR $\theta_{13}$ DE NEUTRINOS

María del Rocío Aparicio Méndez, José Enrique Barradas Guevara, Olga Guadalupe Félix Beltrán,  
Félix Francisco González Canales

Benemérita Universidad Autónoma de Puebla  
mariadelrocio.aparicio@correo.buap.mx

### RESUMEN

Existen partículas elementales que conocemos con el nombre de neutrinos, por todas partes hay muchísimos neutrinos agregado a lo anterior nosotros mismos somos fuente de neutrinos. Estas partículas carecen de carga eléctrica y no forman parte de la llamada materia ordinaria, es decir materia constituida por átomos que a su vez están formados por electrones, protones y neutrones, de hecho, aún es incierto si los neutrinos son partículas de Dirac o Majorana. La matriz  $U_{PMNS}$  (*Pontercorvo – Maki – Nakagawa – Sakata*) rige los acoplamientos de los neutrinos y los leptones, esta matriz tiene distintas parametrizaciones, una de ellas es la parametrización simétrica, en esta parametrización una de las entradas de la matriz  $U_{PMNS}$  corresponde al ángulo de mezcla  $\theta_{13}$ . Es importante notar que la fase de violación de CP de tipo-Dirac está asociada al ángulo de mezcla del reactor  $\theta_{13}$  debido a que el seno de este ángulo corresponde puramente al módulo de la entrada  $(U_{PMNS})_{13}$ , la cual contiene a la fase de tipo-Dirac, en ello reside la importancia de la medición de  $\theta_{13}$ , por lo que en este trabajo se presentan los valores de  $\theta_{13}$  en función de las fases  $\phi_a, \phi_c$  y el parámetro  $\delta$ . En conclusión diremos que, los valores obtenidos de la función senoidal del ángulo de mezcla  $\theta_{13}$  corresponden a los valores experimentales presentados en la literatura para el ángulo de mezcla  $\theta_{13}$  para el orden normal e invertido en el espectro de las masas de los neutrinos.

### INTRODUCCIÓN

La importancia del estudio de los neutrinos reside en el hecho de que es una de las partículas más abundantes en el universo, su estudio puede ofrecernos información sobre las leyes fundamentales de la naturaleza y la evolución del universo. Los neutrinos son partículas muy peculiares pues sólo son sensibles a la fuerza nuclear débil, no tienen carga eléctrica, por lo que son eléctricamente neutros y esto hace que no sea posible distinguir a su antipartícula si nos fijamos en su carga eléctrica. Por lo tanto, existen dos posibilidades: los neutrinos tiene una antipartícula distinta a ellos mismos, de ser así se confirmaría que son partículas de Dirac, de no ser así el neutrino sería su propia antipartícula y entonces sería una partícula de Majorana, pero aún no se tiene claro cual de las dos posibilidades suceden. Los neutrinos interactúan muy poco con las partículas que forman la materia ordinaria, por lo que se han ganado el nombre de partículas fantasma y su detección ha representado un desafío para la humanidad [1]. Las principales fuentes de neutrinos son el Sol los reactores nucleares y nuestra atmósfera. Una persona es atravesada cada segundo por 600 billones de neutrinos del Sol y si nos sorprende esta cifra podemos complementar que, debido a los elementos químicos del cuerpo humano como por ejemplo el oxígeno nosotros mismos somos fuentes de neutrinos.

En la teoría del Modelo Estándar (ME) [2] se presentan tres tipos de neutrinos (cada tipo de neutrino se le conoce como sabor), el neutrino muónico  $\nu_\mu$ , el neutrino tauónico  $\nu_\tau$  y el neutrino electrónico  $\nu_e$ ; los cuales se consideran sin masa en la mencionada teoría. En los últimos años se ha encontrado una característica muy especial entre los neutrinos, ellos pueden intercambiar de sabor. Por ejemplo si un neutrino  $\nu_e$  fue creado en el Sol, al viajar hasta llegar a la Tierra es muy probable que su sabor haya cambiado a  $\nu_\mu$  o  $\nu_\tau$  en el momento de su detección. Esta propiedad tan fascinante se le conoce como oscilaciones de neutrinos [3], por este descubrimiento les fue otorgado en el año 2015 el Premio Nobel de Física a Takaaki Kajita y Arthur B. McDonald. Con este descubrimiento se demuestra que los neutrinos tienen masa, característica que no estaba incluida como parte del ME, lo cual tiene importantes consecuencias como el replantear al ME de la

física de partículas. En este trabajo se presentan los valores obtenidos de la función senoidal del ángulo de mezcla del reactor  $\theta_{13}$  en función de las fases  $\{\phi_a, \phi_c\}$  y el parámetro  $\delta$ , para el orden normal e invertido en el espectro de masas de los neutrinos y los valores obtenidos concuerdan con los que se presentan en la literatura.

## TEORÍA

En un intento desesperado de preservar el principio de conservación de la energía en la desintegración beta, el físico teórico Wolfgang Pauli sugirió que, al mismo tiempo que el electrón se emitía otra partícula eléctricamente neutra: había nacido el concepto de neutrino como nueva partícula elemental. A finales de 1930, Pauli formula su hipótesis sobre los procesos de desintegración beta. El núcleo inicial da lugar a tres cuerpos: el núcleo hijo, un electrón y una nueva partícula neutra. La hipótesis de Pauli también considera al neutrón (como componente del núcleo) como partícula elemental con igual masa que el protón pero sin carga eléctrica y proporciona una solución al problema del espín (momento angular intrínseco de la partícula). Durante un congreso en 1931 Pauli se encuentra con el físico italiano Enrico Fermi, a quién le cautiva la propuesta del austriaco. Para distinguir los dos neutrones de la hipótesis de Pauli, Fermi le propone un nuevo nombre para la partícula neutra ligera: neutrino (“pequeño neutrón en italiano”), cuyo símbolo es la letra griega  $\nu$ . Hasta el momento se pueden distinguir cinco tipos de neutrinos los cuales a su vez se clasifican en naturales y producidos por el hombre: Neutrinos atmosféricos, neutrinos solares, neutrinos provenientes de reactores nucleares, neutrinos provenientes de los aceleradores y neutrinos provenientes de supernovas. Los experimentos para detectar neutrinos solares como Homestake, GALLEX y Kamiokande revelaron un problema de detección generalizado conocido como el problema de los neutrinos solares, la solución de este problema llevó a concluir que los neutrinos poseen masa, a diferencia de lo propuesto por el ME, aunque es muy pequeña la masa no es nula. Los neutrinos masivos implican en la teoría lo siguiente: 1) Existe el término de masa en el lagrangiano de Dirac, 2) Se da el cambio de sabor en los neutrinos (oscilación de neutrinos) y 3) Puede darse el decaimiento de un neutrino pesado en otros más ligeros  $\nu_\tau \rightarrow \nu_\mu + \nu_e$ .

En la actualidad la oscilación de neutrinos regida por los ángulos de mezcla entre los neutrinos del reactor, atmosféricos y solares, representa un amplio campo de estudio especialmente para el ángulo de mezcla del neutrino del reactor, el cual no ha podido ser medido con una precisión requerida. La jerarquía y medición de las masas de neutrinos y si los neutrinos son partículas de Dirac o Majorana, son las preguntas centrales que los experimentos presentes y futuros buscan responder.

El fenómeno de las oscilaciones de neutrinos se debe a que los neutrinos en la base del sabor  $\nu_e, \nu_\mu, \nu_\tau$  son una superposición de estados de masa definida como [4]

$$|\nu_\ell\rangle = \sum_i^3 U_{\ell i}^* |\nu_i\rangle, \quad \ell = e, \mu, \tau, \quad (3)$$

donde los  $\nu_\ell$  son eigenestados de sabor,  $\nu_i$  son eigenestados de masa, y  $U_{\ell i}$  representa a la matriz Pontecorvo-Maki-Nakagawa-Sakata (PMNS). En otras palabras, un sabor de neutrino es en realidad una superposición de neutrinos con masa  $\nu_1, \nu_2, \nu_3$ .

La oscilación de neutrinos a baja energía se puede describir por el lagrangiano [5]

$$\mathcal{L} = -\frac{g}{\sqrt{2}} \bar{\ell}_L \gamma^\mu \nu_L W_\mu + \frac{1}{2} \bar{\nu}_R^c \mathbf{M}_\nu \nu_L - \bar{\ell}_R \mathbf{M}_\ell \ell_L + h.c. . \quad (4)$$

donde se identifica el acoplamiento con sus correspondientes leptones cargados a través de la corriente cargada en el primer término. Mientras que los últimos dos términos representan los términos de masa para los neutrinos y los leptones cargados, respectivamente. Al rotar este lagrangiano a una base donde las matrices de masa sean diagonales se llega a la siguiente definición para la matriz de mezclas del sabor leptónico  $U_{PMNS}$

$$U_{\text{PMNS}} = U_\ell^\dagger U_\nu, \quad (5)$$

donde  $U_\ell$  y  $U_\nu$  son matrices unitarias. La primera diagonaliza a la matriz de masa de los leptones cargados  $M_\ell$ , mientras que la segunda diagonaliza a la matriz de masa de los neutrinos  $M_\nu$ . Cuando se considera que la matriz de masa de leptones cargados tiene una forma diagonal, la matriz PMNS corresponde a la matriz que diagonaliza a la matriz de masa de los neutrinos  $M_\nu$ . En este caso se tiene la parametrización estándar (PDG) de la matriz PMNS, en la cual se identifican tres ángulos de mezcla:  $\theta_{12}$  conocido como ángulo solar,  $\theta_{23}$  llamado ángulo atmosférico y  $\theta_{13}$  conocido como ángulo del reactor. Además se tiene una fase  $\delta_{\text{CP}}$  en el caso de que los neutrinos sean partículas de Dirac o tres fases  $\delta_{\text{CP}}$ ,  $\phi_{12}$ ,  $\phi_{13}$  si son partículas de Majorana para describir las oscilaciones. Todas estas fases están asociadas a la violación de la simetría Carga-Paridad (CP) ligada con la asimetría de materia [6].

Sabemos ya que la oscilación de neutrinos se da porque los campos de sabor de los neutrinos son una superposición de los campos de masa definida [4]. Esto puede verse también como un estado de sabor que es una superposición coherente de estados de masa, dicha relación se expresa como

la ecuación (1). En la mencionada ecuación  $|v_i\rangle$  representa el estado del neutrino con masa  $m_i$ , momento  $\vec{p}$  y energía  $E_i = \sqrt{p^2 + m_i^2} \approx E + \frac{m_i^2}{2E}$  es el estado de sabor  $l$  del neutrino, que es producido con el propio leptón  $l^+$  en interacciones débiles de CC (corrientes cargadas) o produce  $l^-$  en una reacción CC.

Las oscilaciones de neutrinos de baja energía pueden ser descritas por el lagrangiano que aparece en la ecuación (2), en este lagrangiano  $g$  es la constante de acoplamiento,  $\bar{l}_L$  es el doblete izquierdo de los leptones,  $\gamma^\mu$  son matrices de Dirac,  $\nu_L$  es el neutrino izquierdo y  $W_\mu$  es el bosón asociado,  $\nu_R$

es el neutrino derecho,  $m_\nu$  es la matriz de masa de los neutrinos,  $l_R$  es el singlete derecho de los leptones y  $m_\ell$  es la matriz de masa de los leptones cargados. Los términos completos representan los procesos en los que interviene la corriente cargada, el término de masa de Majorana y el término de masa Dirac respectivamente.

La matriz PMNS también puede escribirse en forma simétrica [7,1], esta parametrización tiene como ventaja que todas las fases de CP que en este caso llamaremos  $\phi_1$ ,  $\phi_2$ ,  $\phi_3$ , son fases físicas y no se mezclan en los términos para calcular las violaciones de CP, la forma simétrica de la matriz PMNS es la siguiente

$$\begin{pmatrix} c_{13}c_{12} & c_{13}s_{12}e^{-i\phi_{12}} & s_{13}e^{-i\phi_{13}} \\ -c_{23}s_{12}e^{-i\phi_{12}} - s_{23}c_{12}s_{13}e^{-i(\phi_{23}-\phi_{13})} & c_{23}c_{12} - s_{23}s_{12}s_{13}e^{-i(\phi_{12}+\phi_{23}-\phi_{13})} & c_{13}s_{23}e^{-i\phi_1} \\ s_{23}s_{12}e^{i(\phi_{12}+\phi_{23})} - c_{23}c_{12}s_{13}e^{i\phi_{13}} & -s_{23}c_{12}e^{i\phi_{23}} - c_{23}s_{12}s_{13}e^{-i(\phi_{12}-\phi_{13})} & c_{13}c_{23} \end{pmatrix} \quad (6)$$

donde  $c_{ij} = \cos \theta_{ij}$  y  $s_{ij} = \sin \theta_{ij}$ . Se pueden conectar ambas parametrizaciones (estándar y simétrica) teniendo en cuenta que  $U_{\text{PDG}} = KU_{\text{Sim}}$ , donde  $K = \text{diag}(1, e^{i\frac{\beta_1}{2}}, e^{i\frac{\beta_2}{2}})$  con  $\delta_{\text{CP}} = \phi_{13} - \phi_{23} - \phi_{12}$ ,  $\beta_1 = -2\phi_{12}$ ,  $\beta_2 = -2(\phi_{12} + \phi_{23})$ . Los ángulos de mezcla  $\theta_{12}$ ,  $\theta_{23}$ ,  $\theta_{13}$  pueden escribirse en términos de las entradas de la matriz PMNS de la forma siguiente [5,8]

$$\sin^2 \theta_{13} = |(U_{\text{PMNS}})_{13}|^2, \sin^2 \theta_{12} = \frac{|(U_{\text{PMNS}})_{12}|^2}{1 - |(U_{\text{PMNS}})_{13}|^2}, \sin^2 \theta_{23} = \frac{|(U_{\text{PMNS}})_{23}|^2}{1 - |(U_{\text{PMNS}})_{13}|^2}. \quad (7)$$

Notemos que la fase de violación de CP de Dirac está asociada al ángulo de mezcla del reactor  $\theta_{13}$  debido a que el seno de este ángulo corresponde puramente al módulo de la entrada

$(U_{PMNS})_{13}$  que contiene a la fase de Dirac, por lo que es importante llevar a cabo la medición de  $\theta_{13}$ . En la tabla 1 se presentan los valores experimentales para los ángulos de mezcla y la diferencia de masas para el orden normal e invertido (BF se refiere a un mejor ajuste) [9].

Parámetro	BFP $\pm 1\sigma$	Rango $2\sigma$	Rango $3\sigma$
$\Delta m_{21}^2: [10^{-5} \text{eV}^2]$	$7.55_{-0.16}^{+0.20}$	7.20 – 7.94	7.05 – 8.14
$\Delta m_{31}^2: [10^{-3} \text{eV}^2]$ (JN)	$2.50 \pm 0.03$	2.44 – 2.57	2.41 – 2.60
$\Delta m_{13}^2: [10^{-3} \text{eV}^2]$ (JI)	$2.42_{-0.04}^{+0.03}$	2.34 – 2.47	2.31 – 2.51
$\sin^2 \theta_{12}/10^{-1}$	$3.20_{-0.16}^{+0.20}$	2.89 – 3.59	2.73 – 3.79
$\sin^2 \theta_{23}/10^{-1}$ (JN)	$5.47_{-0.30}^{+0.20}$	4.67 – 5.83	4.45 – 5.99
$\sin^2 \theta_{23}/10^{-1}$ (JI)	$5.51_{-0.30}^{+0.18}$	4.91 – 5.84	4.53 – 5.98
$\sin^2 \theta_{13}/10^{-2}$ (JN)	$2.160_{-0.076}^{+0.083}$	2.03 – 2.34	1.96 – 2.41
$\sin^2 \theta_{13}/10^{-2}$ (JI)	$2.220_{-0.076}^{+0.074}$	2.07 – 2.36	1.99 – 2.44
$\delta_{CP}/\pi$ (JN)	$1.32_{-0.15}^{+0.21}$	1.02 – 1.75	0.87 – 1.94
$\delta_{CP}/\pi$ (JI)	$1.56_{-0.15}^{+0.13}$	1.27 – 1.82	1.12 – 1.94
$m_e$ MeV	$0.5109989461 \pm 000000000031$		
$m_\mu$ MeV	$105.6583 \pm 0.0000024$		
$m_\tau$ MeV	$1776.86 \pm 0.12$		

Tabla 1: Parámetros de oscilación de neutrinos para la jerarquía invertida y normal de las masas y los ángulos de mezcla.

Las observaciones de los experimentos T2K, MINOS y Double Chooz de oscilaciones de neutrinos del reactor pudieron ser explicadas mediante la parametrización TriBiMaximal (TBM). Esta parametrización en la que se predice que  $\theta_{13} = 0$ , es decir no hay violación de CP. Esta matriz TBM tiene la forma [10,11]

$$U_{\text{TBM}} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \quad (8)$$

en donde se hace notar que la segunda columna los tres sabores están mezclados maximalmente. Cualquier matriz de la forma

$$M_\nu = \begin{pmatrix} a & b & d \\ b & c & d \\ d & d & e \end{pmatrix}, \quad (9)$$

cuyos elementos están puestos en términos de las masas de los neutrinos, es diagonalizada por la matriz TBM. Para construir la matriz PMNS se propone la matriz de masa de los leptones cargados tal que sus eigenvalores sean distintos de cero y no degenerados. La matriz unitaria que diagonaliza a la matriz de leptones cargados  $M_l$  será  $U_l$ . De manera que al obtener  $U_l$  y

suponiendo que la matriz que diagonaliza a la matriz de masa de neutrinos siempre es la TBM, se obtiene que la matriz de mezclas de los leptones es:

$$U_{\text{PMNS}} = U_{\ell}^{\dagger} U_{\text{TBM}} . \quad (10)$$

La matriz de masa de leptones  $M_{\ell}$  puede ser escrita en forma polar como

$$M_{\ell} = P_{\ell}^{\dagger} \bar{M}_{\ell} P_{\ell} . \quad (11)$$

donde  $P_{\ell}$  es una matriz diagonal de fases y  $\bar{M}_{\ell}$  es una matriz simétrica real.

Dos matrices de masa de leptones  $M_{\ell}$  y  $M_{\ell}^i$  pertenecen la misma clase de equivalencia si

$$M_{\ell}^i = T_i^{\dagger} M_{\ell} T_i . \quad (12)$$

donde  $T_i$  son matrices de permutación de 3 X 3 mostradas a continuación

$$\begin{aligned} T_0 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, & T_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, & T_2 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ T_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, & T_4 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, & M_{\ell}^5 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (13)$$

Nos interesan las matrices que pertenezcan a la misma clase de equivalencia porque tendrán los mismos eigenvalores. Los eigenvalores representan las masas de los leptones cargados. Al sustituir (9) en (10) se obtiene

$$M_{\ell}^i = T_i^{\dagger} P_{\ell}^{\dagger} M_{\ell} P_{\ell} T_i . \quad (14)$$

Cambiar el signo de un eigenvalor es equivalente a rotarlo en un espacio de eigenvalores. Esto puede hacerse mediante una rotación quiral que deja invariante al lagrangiano [12], nosotros rotaremos  $m_{\mu}$ , de tal forma que la matriz de masa  $\bar{M}_{\ell}$  queda

$$\tilde{M}_{\ell} = \frac{\bar{M}_{\ell}}{m_{\tau}} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\tilde{m}_e \tilde{m}_{\mu}} & 0 \\ \sqrt{\tilde{m}_e \tilde{m}_{\mu}} & \tilde{m}_e - \tilde{m}_{\mu} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (15)$$

donde  $\tilde{m}_e = \frac{m_e}{m_{\tau}}$  y  $\tilde{m}_{\mu} = \frac{m_{\mu}}{m_{\tau}}$ . Si rotamos  $m_{\mu}$ , con la matriz  $\bar{M}_{\ell}$  la matriz resultante toma la forma

$$\tilde{M}_\ell = \frac{\bar{M}_\ell}{m_\tau} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\frac{\tilde{m}_e \tilde{m}_\mu}{1 - \tilde{m}_\mu + \tilde{m}_e}} & 0 \\ \sqrt{\frac{\tilde{m}_e \tilde{m}_\mu}{1 - \tilde{m}_\mu + \tilde{m}_e}} & 0 & \sqrt{\frac{(\tilde{m}_\mu - \tilde{m}_e)(1 + \tilde{m}_e)(1 - \tilde{m}_\mu)}{1 - \tilde{m}_\mu + \tilde{m}_e}} \\ 0 & \sqrt{\frac{(\tilde{m}_\mu - \tilde{m}_e)(1 + \tilde{m}_e)(1 - \tilde{m}_\mu)}{1 - \tilde{m}_\mu + \tilde{m}_e}} & 1 - \tilde{m}_\mu + \tilde{m}_e \end{pmatrix}, \quad (16)$$

En el caso de que se puedan rotar los tres eigenvalores, por consistencia con las matrices anteriores rotaremos  $m_\mu$ , dando como resultado la matriz de masa  $\bar{M}_\ell$  toma la forma

$$\tilde{M}_\ell = \frac{\bar{M}_\ell}{m_\tau} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\frac{\tilde{m}_e \tilde{m}_\mu}{1 - \delta}} & 0 \\ \sqrt{\frac{\tilde{m}_e \tilde{m}_\mu}{1 - \delta}} & \tilde{m}_e - \tilde{m}_\mu + \delta & \sqrt{\frac{\delta}{1 - \delta}} \xi_1 \xi_2 \\ 0 & \sqrt{\frac{\delta}{1 - \delta}} \xi_1 \xi_2 & 1 - \delta \end{pmatrix}, \quad (17)$$

con la notación  $1 - \tilde{m}_e > \delta > 0$ ,  $\xi_1 = 1 - \tilde{m}_e - \delta$  y  $\xi_2 = 1 + \tilde{m}_\mu - \delta$ .

## RESULTADOS NUMÉRICOS

En esta sección se presentan los resultados obtenidos del análisis numérico-simbólico de las tres matrices de masa de leptones  $\bar{M}_\ell$  que se presentaron en la sección anterior. Se calculan los elementos de la clase de equivalencia para cada una de las matrices leptones  $\bar{M}_\ell^i$  de la ecuación (10). Ahora debemos encontrar una forma de la matriz de masa de los leptones cargados que pueda desviar el valor del ángulo del reactor  $\theta_{13}$  del valor nulo que originalmente predice el patrón TBM.

El ángulo de mezcla del reactor se calcula mediante la ecuación

$$\sin^2 \theta_{13} = |(U_{\text{PMNS}})_{13}|^2. \quad (18)$$

La matriz de fases asociada a (14) contiene sólo la fase  $\phi_a$ , por lo que las expresiones para  $\theta_{13}$  quedaron en función de ella, se varió la fase en el intervalo de  $-\pi, \pi$  y se sustituyeron los valores de las masas de los leptones, con esto se logra la figura 1.

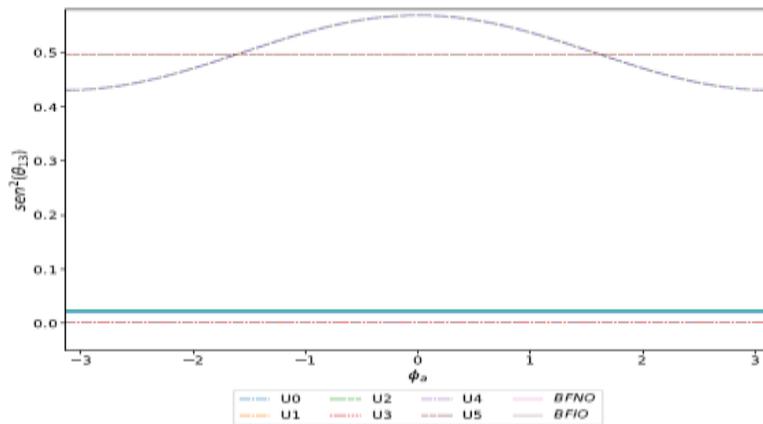


Figura 15: Seno del ángulo de mezcla del reactor  $\theta_{13}$  para cada una de las matrices de mezcla obtenidas a partir de la clase de equivalencia de  $M_\ell$  (14) realizando el producto (13), nombradas U0, U1, U2, U3, U4 y U5 respectivamente. La sección azul corresponde a los valores experimentales mostrados en la tabla 1 tomados a  $3\sigma$ . Se puede notar que en este caso todas las matrices desvían el ángulo de cero, sin embargo las matrices U0 y U3 reprodujeron valores más cercanos a la sección  $3\sigma$ , ambas matrices arrojaron un valor de  $0.04907\text{rad} = 2.811^\circ$ .

Para la matriz (15) se tienen ahora dos fases  $\phi_a$  y  $\phi_c$  por lo que se obtuvieron las expresiones en función de ambas fases para determinar la fase que ajustara mejor los datos. Estas fases se graficaron con valores entre  $[-\pi, \pi]$  fijando una de las dos fases. Al realizar este cálculo concluimos que los datos que se ajustaban mejor estaban en función de  $\phi_a$  tomando  $\phi_c = 1.78\text{ rad}$ . Con estas consideraciones se obtuvo la figura 2.

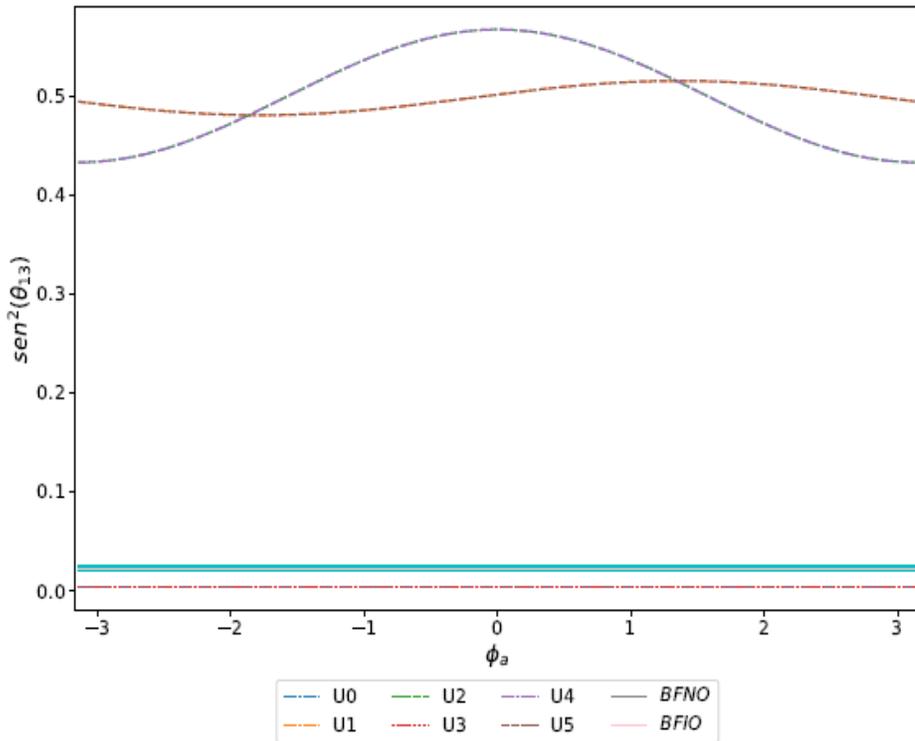


Figura 16: Seno del ángulo de mezcla del reactor para los elementos de las matrices de mezcla obtenidas de la clase de equivalencia de  $M_1$  (15). La sección azul representa los datos experimentales a  $3\sigma$ . Una vez más todas las matrices de mezcla U0, U1, U2, U3, U4 y U5, desvían el ángulo del valor nulo, pero las matrices U0 y U3 reproducen valores más cercanos a la sección experimental permitida, esta vez se obtuvo un valor para ambas matrices de  $0.0515 \text{ rad} = 2.95^\circ$ .

En el caso de la tercera matriz (16) se tienen dos fases,  $\{\phi_a, \phi_c\}$  y el parámetro  $\delta$ . Al igual que en el caso anterior variamos las fases en el intervalo  $[-\pi, \pi]$  fijando  $\phi_a$  o  $\phi_c$  respectivamente. Con estas condiciones se consiguió reproducir mejores datos dejando fija a  $\phi_c = 1.78 \text{ rad}$ . Como en el caso anterior, una vez fijada  $\phi_c$  se variaron  $\phi_a$  y  $\delta$ . Se realizó una comparación de los valores BF que se presentan en la tabla 1 y los resultados que se determinaron aquí. Como podemos observar los valores encontrados fueron semejantes a los presentados en la literatura [9] y los resultados obtenidos se muestran en las figuras 3 y 4.

Es fácil observar que son las matrices U0 y U3 que intersectan ambos valores BF para todo valor de  $\phi_a$ , por lo que tomaremos los valores de las gráficas de los ángulos  $\theta_{23}$  y  $\theta_{21}$ , que son  $\phi_a = 0.8 \text{ rad}, 3 \text{ rad}, -2.65 \text{ rad}$  y el valor de  $\delta$  en el intervalo  $[0, 1]$ . Los resultados obtenidos se muestran en las figuras 5, 6 y 7 respectivamente.

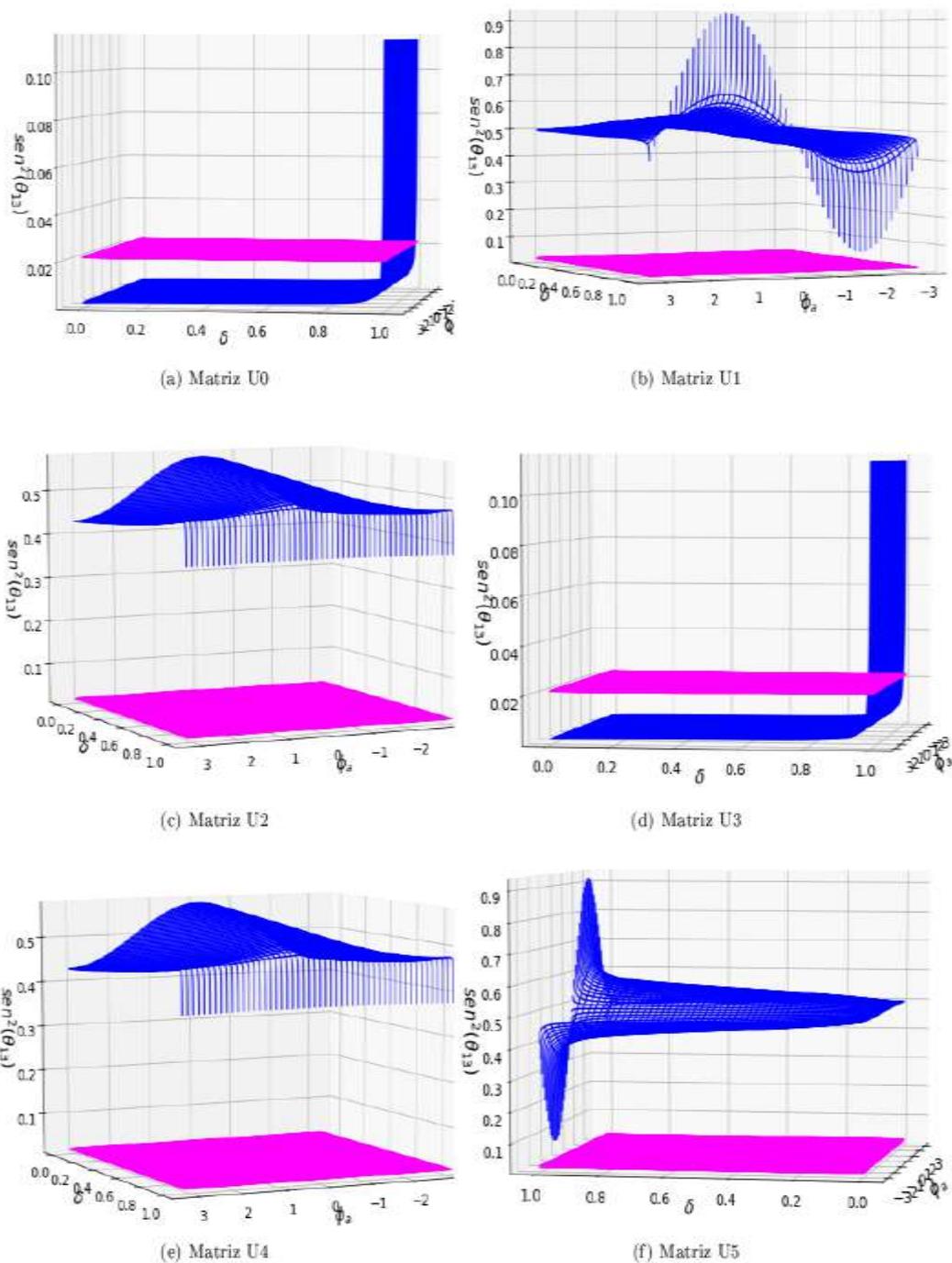
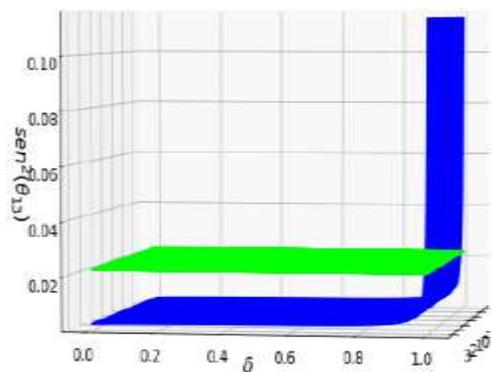
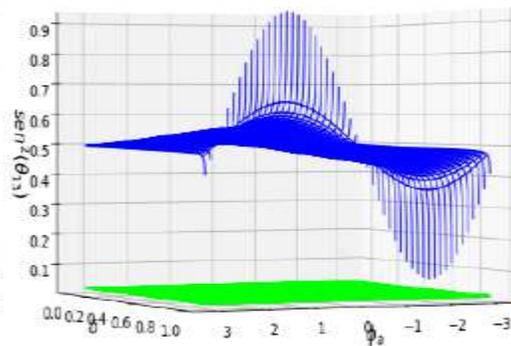


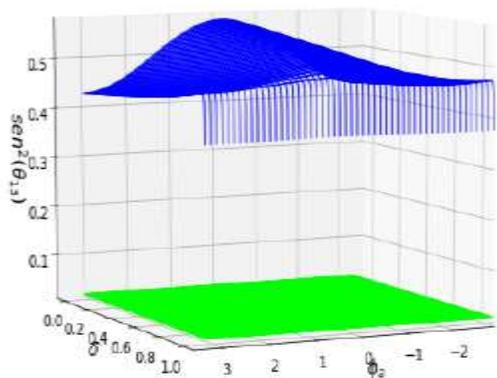
Figura 17: Función sinusoidal del ángulo  $\theta_{13}$  en función de  $\phi_a$  y  $\delta$  de la matriz (16), el plano rosa representa el valor BF de orden normal mostrado en la tabla 1.



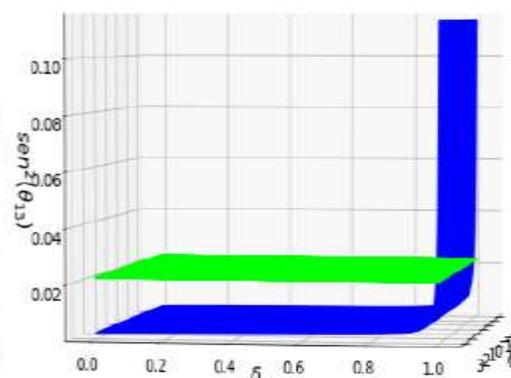
(a) Matriz U0



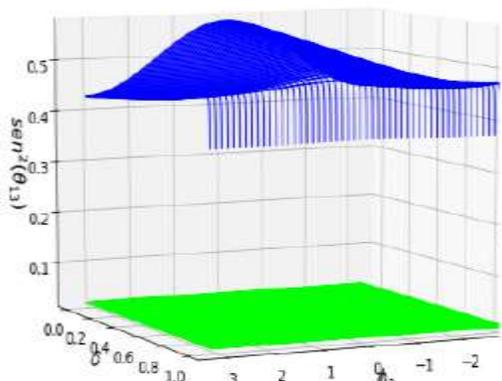
(b) Matriz U1



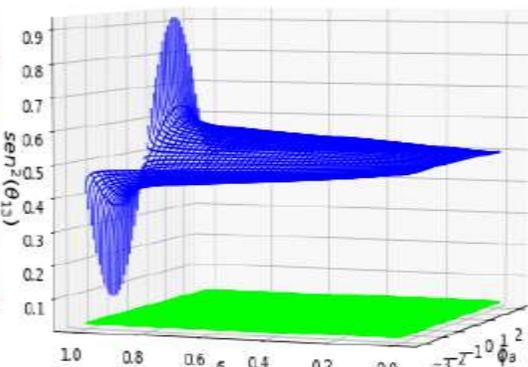
(c) Matriz U2



(d) Matriz U3



(e) Matriz U4



(f) Matriz U5

Figura 18: Función sinusoidal del ángulo  $\theta_{13}$  en función de  $\phi_a$  y  $\delta$  de la matriz (16), el plano rosa representa el valor BF de orden normal mostrado en la tabla 1.

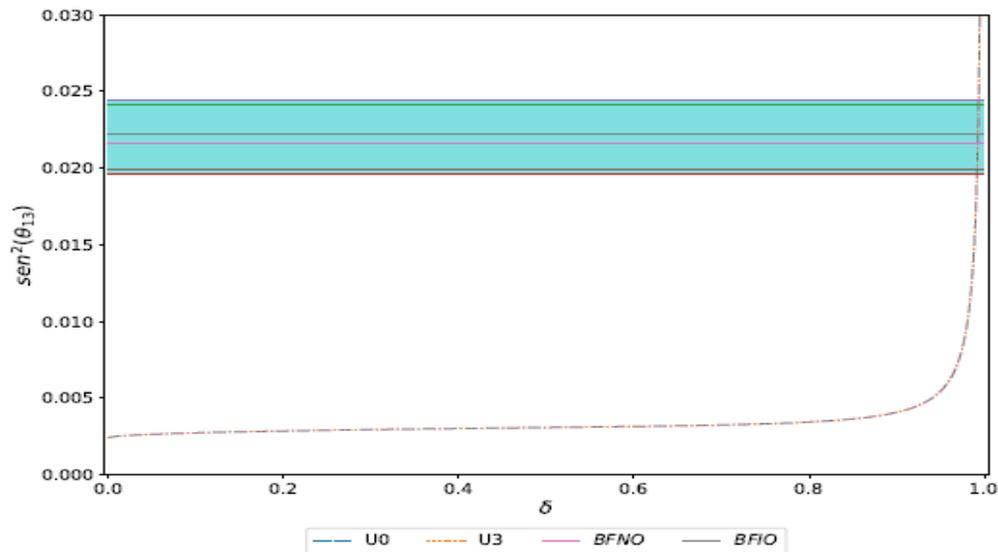


Figura 19: Seno del ángulo de mezcla del reactor para los elementos U0 y U3 de las matrices de mezcla obtenidas de la clase de equivalencia de  $M_l$  (16) para un valor de las fases  $\phi_a = 3 \text{ rad}$  y  $\phi_c = 1.78 \text{ rad}$ . En la franja azul se toman valores a  $3\sigma$ , las líneas rosa y gris son los valores BF normal e invertido respectivamente, notar que se alcanza el valor BF cuando el parámetro  $\delta$  es muy próximo a 1, en específico  $\delta = 0.9$ .

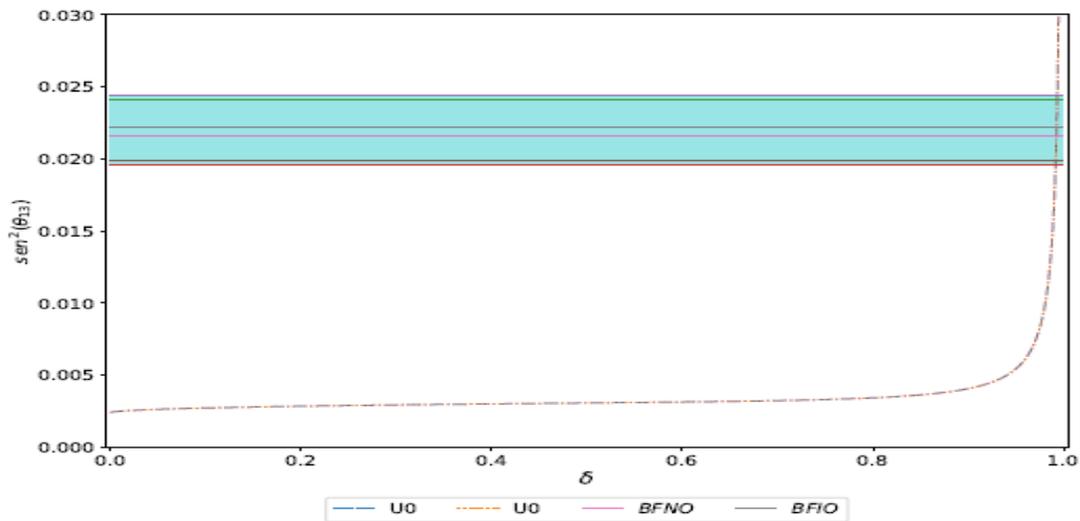


Figura 20: Seno del ángulo de mezcla del reactor para los elementos U0 y U3 de las matrices de mezcla obtenidas de la clase de equivalencia de  $M_l$  (16) para un valor de las fases  $\phi_a = -2.65 \text{ rad}$  y  $\phi_c = 1.78 \text{ rad}$ . En la franja azul se toman valores a  $3\sigma$ , las líneas rosa y gris son los valores BF normal e invertido respectivamente, notar que se alcanza el valor BF cuando el parámetro  $\delta$  es muy próximo a 1, en específico  $\delta = 0.9$ .

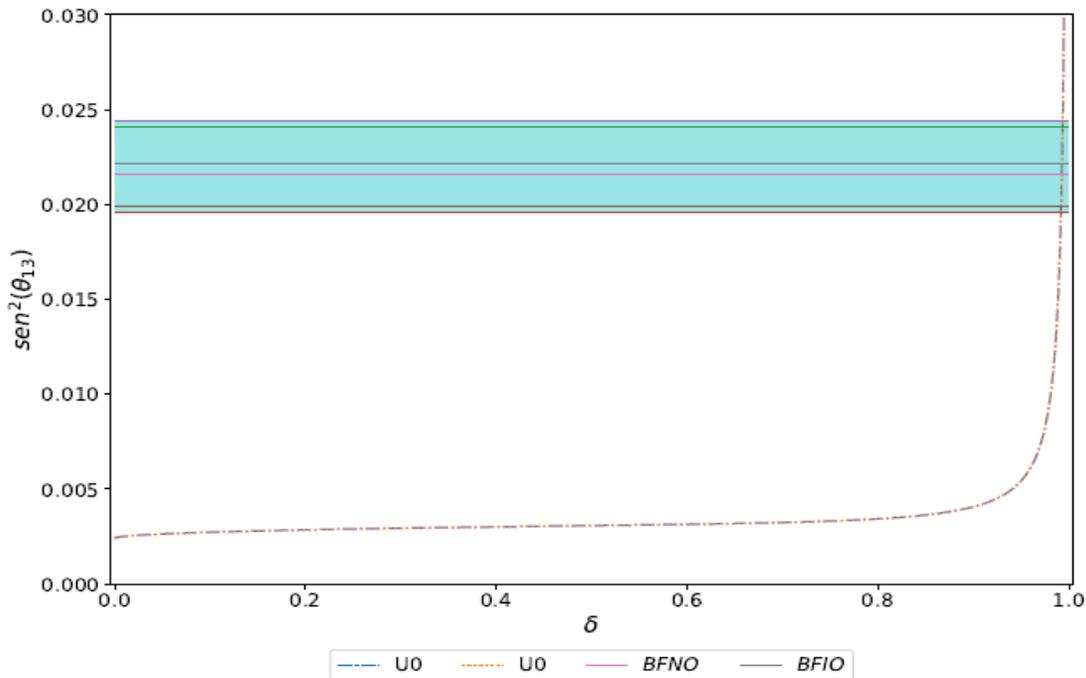


Figura 21: Seno del ángulo de mezcla del reactor para los elementos  $U_{00}$  y  $U_{33}$  de las matrices de mezcla obtenidas de la clase de equivalencia de  $M_I$  (16) para un valor de las fases  $\phi_a = 0.8 \text{ rad}$  y  $\phi_c = 1.78 \text{ rad}$ . En la franja azul se toman valores a  $3\sigma$ , las líneas rosa y gris son los valores BF normal e invertido respectivamente, notar que se alcanza el valor BF cuando el parámetro  $\delta$  es muy próximo a 1, en específico  $\delta = 0.9$ .

## CONCLUSIONES

El presente trabajo ha tenido como base el estudio de una de las partículas más importantes en la física de partículas actual, los neutrinos. Su importancia radica entre otras cosas que son actores principales en los procesos nucleares que hacen brillar las estrellas. Dentro del estudio de los neutrinos encontramos el ángulo de mezcla del reactor  $\theta_{13}$  dentro de la matriz  $U_{PMNS}$ . En este trabajo se puede observar que los valores que se obtuvieron para la función sinusoidal del ángulo de mezcla  $\theta_{13}$  en función de las fases  $\phi_a$ ,  $\phi_c$  y el parámetro  $\delta$  concuerdan con los valores que presenta la literatura.

## BIBLIOGRAFÍA

1. P. C. Sergio "Los neutrinos", CSIC, 2014, pp 1-128.
2. M. Herrero, "The Standard Model", arXiv: hep-ph/9812242v1, 1998, pp 1-20.
3. P. F. de Salas, S. Gariazzo, O. Mena, C. A. Ternes, and M. Tórtola, "Neutrino Mass Ordering from Oscillations and Beyond: 2018 Status and Future Prospects", pp 1-62.
4. S. Bilenky, "Neutrino oscillations: from and historical perspective to the present status", 2016, pp 1-15.
5. K. A. Hochmuth, S. T. Petcov and W. Rodejohann, " $U_{PMNS} = U_\ell^\dagger U_\nu$ ", 2007, pp 1-19.
6. P. Cheng, G. Ding, F. Gonzalez Canales, J. W. F. Valle, "Classifying transformations according to their texture zeros: theory and implications", Physics Letters B, pp 1-32.
7. M. Baldo Ceolin, "Neutrino Oscillations at Accelerators", Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics, nov 2003.
8. E. Barradas Guevara, O. Felix Beltrán, F. Gonzalez Canales and M. Zeleny Mora, "Lepton  $CP$  violation in a  $\nu 2HDM$  with flavor", Phys. Rev. D, 97:035003, 2018, pp 1-20.

9. I. Esteban, M. C. Gonzalez Garcia, M. Maltoni, I. Martinez Soler and T. Schwetz, "Updated fit to three neutrino mixing: exploring the accelerator-reactor complementarity", 2017, pp 1-31.
10. P. F. Harrison, D.H. Perkins, and W.G. Scott, "Tri-bimaximal mixing and the neutrino oscillation data", *Physics Letters B*, 530(1), 2002, pp 167- 173.
11. P. Chen, S. Centelles Chuliá, G. Ding, R. Srivastava, and J. W. F. Valle, "Realistic tribimaximal neutrino mixing", *Phys. Rev. D*, 98:055019, Sep 2018.
12. F. F. Gonzalez Canales, PhD thesis, UNAM, 2011.

## ANÁLISIS RADIOGRÁFICO TEMPORAL DE LA PERTURBACIÓN MAGNÉTICA DEL CIRCUITO CAÓTICO DE CHUA

Gabriel Arroyo Correa

Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas, UMSNH.

[garroyo@umich.mx](mailto:garroyo@umich.mx)

### RESUMEN

El estudio de los sistemas caóticos dispone de varias herramientas entre las que se pueden mencionar los mapas de Poincaré, los exponentes de Lyapunov, las funciones de correlación, los espectros de Fourier, etc. [1]. La naturaleza altamente irregular de las señales caóticas las hace candidatos naturales para ser analizadas por otras técnicas, entre las que se encuentra el llamado método de descomposición empírica de modos [2] (EMD, por sus siglas en inglés). La idea del método EMD es descomponer una señal temporal como una suma de modos de oscilación de media cero, llamadas funciones intrínsecas de modo (IMF's, por sus siglas en inglés). Debido a que esta descomposición se hace en el mismo dominio temporal de la señal original, hace del método EMD una herramienta adecuada para obtener una radiografía temporal de la señal e identificar, en principio, características específicas inmersas en ella. En este trabajo se hace una caracterización por el método EMD del proceso de control mediante perturbaciones magnéticas, estáticas y dinámicas, del circuito caótico de Chua. Los resultados muestran que la aplicación del método EMD permite identificar señales IMF asociadas con el cambio dinámico del sistema y con la naturaleza de la perturbación magnética (estática o dinámica).

### INTRODUCCIÓN

El circuito de Chua es el sistema dinámico autónomo más simple que puede ser utilizado para estudiar la dinámica no lineal en circuitos eléctricos. La importancia de este circuito radica en que manifiesta una amplia variedad de las características comunes a otros sistemas no lineales, tales como bifurcaciones, caos y sincronización [1]. Las ecuaciones que describen al sistema de Chua están dadas por [1]:

$$\begin{aligned}\dot{x} &= C (y - bx - 0.5(b - a)(|x + 1| - |x - 1|)) \\ \dot{y} &= x - y + z \\ \dot{z} &= -Dy\end{aligned}\quad (1)$$

En este trabajo se toman los valores  $C=7$ ,  $D=10$ ,  $a=-0.28$  y  $b=0.56$ , que definen el estado caótico del doble atractor de Chua, como se muestra en la Fig.1.

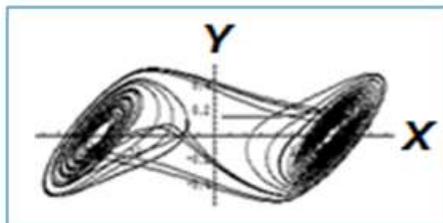


Figura 1. Proyección en el plano XY del estado caótico del sistema de Chua (1),

En la literatura existen diferentes métodos bien conocidos para el análisis de los sistemas caóticos. En este trabajo estaremos interesados en aplicar el llamado método de descomposición empírica de modos (EMD) para estudiar la dinámica del circuito de Chua sujeto a una perturbación

magnética. Esta perturbación se incluye como un término en lado derecho de la ecuación para la variable  $z$  de la Ec. (1), de la forma:

$$\gamma \cos(\omega t), \tag{2}$$

en donde  $\gamma$  es la amplitud de la perturbación y  $\omega$  su frecuencia angular. En la Fig. 2 se muestra el efecto sobre el estado caótico mostrado en la Fig. 1, en el caso de una perturbación magnética estática ( $\omega=0$ ) y para diferentes valores de la amplitud.

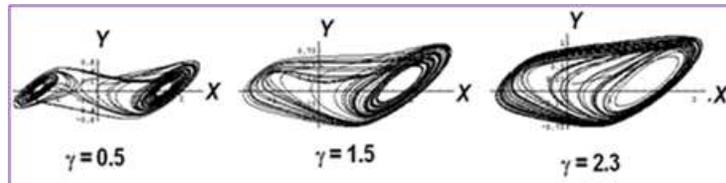


Figura 2. Efecto de una perturbación magnética estática de diferentes amplitudes.

**TEORÍA**

La entropía de Shannon ( $E_s$ ) construida en el espacio fase definido por las señales  $x$  e  $y$  del sistema (1). En el plano  $xy$  se construye una malla que se divide en  $N$  celdas idénticas. El número de puntos en una celda dividido entre el número total de puntos da la probabilidad de ocupación  $p_i$  de la celda, esto permite obtener los datos para calcular la entropía asociada que está dada por  $-p_i \ln(p_i)$ , donde  $\ln$  es el logaritmo natural. Así la entropía de Shannon es [2]:

$$E_s = - \sum_{i=1}^N p_i \ln(p_i) \tag{3}$$

El llamado método de descomposición empírica de modos (Empirical Mode Decomposition) fue introducido por Huang [3] para el análisis de señales temporales irregulares, como las que se presentan en la dinámica del clima terrestre. El hecho de que las señales caóticas sean muy irregulares, hace del método EMD una herramienta interesante para aplicarla a la dinámica caótica del circuito de Chua. La esencia del método EMD es que dada una señal temporal  $X(t)$ , esta se puede descomponer en señales temporales oscilatorias de media cero, llamadas funciones implícitas de modo (Implicit Mode Functions). En este sentido se puede entender que este método permite obtener una radiografía temporal de la señal de la siguiente manera [3]:

$$X(t) = \sum_{i=1}^n h_i(t) + r(t) \tag{4}$$

donde las  $h_i$  son las IMF y  $r$  es el residuo (función de variación lenta con media cero). El algoritmo EMD para obtener la descomposición dada por la Ec. (3) es como sigue:

1. Encontrar los máximos y mínimos locales de  $X(t)$ .
2. Formar la envolvente superior e inferior,  $e_s(t)$  y  $e_i(t)$ , de los puntos extremos del paso 1.
3. Calcular la función media  $m_1(t)$  de  $e_s(t)$  y  $e_i(t)$ :  $m_1(t) = (e_s(t) + e_i(t)) / 2$ .
4. Sea  $d_1(t) = X(t) - m_1(t)$ . Si  $d_1(t)$  es una función de media cero, la iteración para  $d_1(t)$  es aceptada como la primer IMF:  $d_1(t) = h_1(t)$ .
5. En caso contrario, se usa  $d_1(t)$  como los nuevos datos y el proceso iterativo de los pasos del 1 al 4 continúa hasta encontrar la siguiente IMF.

**METODOLOGÍA**

La metodología consiste básicamente de tres pasos. Primero, se resuelve numéricamente el sistema (1) sujeto a la perturbación magnética (2), usando el paquete DynPac [4]. Segundo, la

información de las señales  $x$  e  $y$  se procesa para obtener la entropía de Shannon de acuerdo a la Ec. (3). El paso tercero consiste en descomponer separadamente las señales  $x$  e  $y$  mediante el método EMD de acuerdo al algoritmo descrito en la Ec. (4).

**RESULTADOS**

En la Fig. 3 se muestra la variación de la entropía de Shannon para un campo magnético estático. Las Figs, 4-6 presentan las variaciones de la entropía de Shannon para una perturbación magnética armónica.

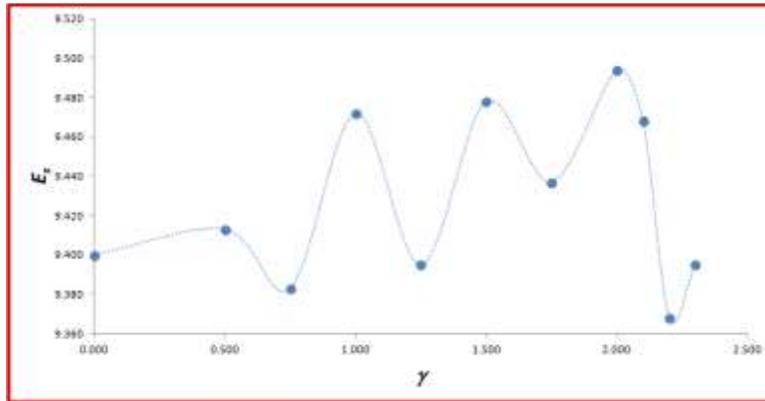


Figura 3. Variación de  $E_s$  para una perturbación magnética estática.

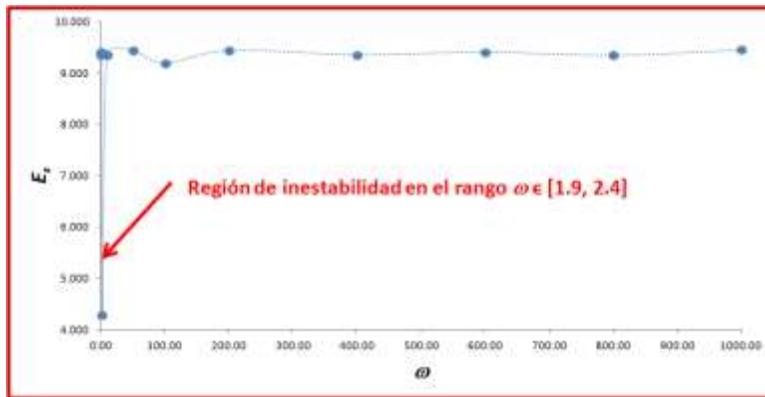


Figura 4. Variación de  $E_s$  para una perturbación magnética dinámica de amplitud  $\gamma=0.5$ .

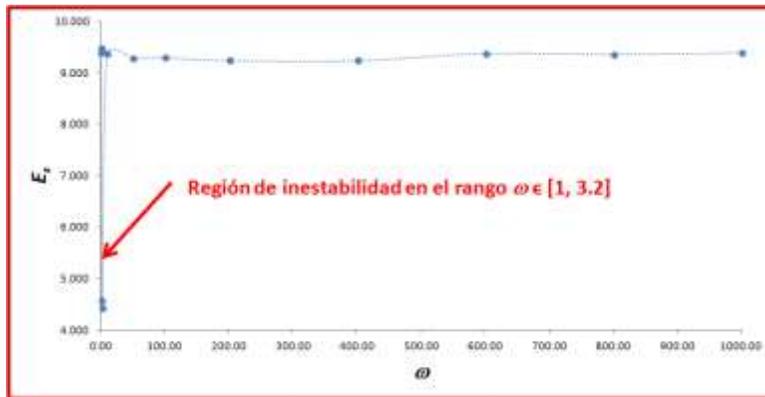


Figura 5. Variación de  $E_s$  para una perturbación magnética dinámica de amplitud  $\gamma=1.5$ .



Figura 6. Variación de  $E_s$  para una perturbación magnética dinámica de amplitud  $\gamma=2.3$ .

En la Fig. 7 se presentan las descomposiciones por el método EMD para las señales X e Y del sistema (1) en el caso de ausencia de perturbación magnética ( $\omega=\gamma=0$ ). Los gráficos etiquetados con la IMF con el número mayor corresponden al residuo correspondiente, Ec. (4).

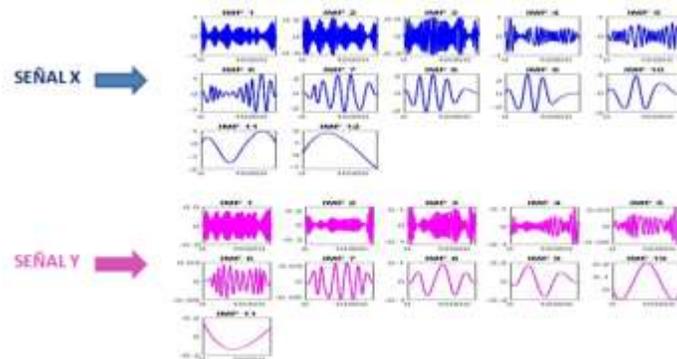


Figura 7. Descomposición EMD de las señales X e Y para el sistema de Chua no perturbado.

La Fig. 8 presenta las descomposiciones EMD de la señal X para una perturbación magnética estática a diferentes amplitudes. De manera similar, las Figs. 9-11 muestran descomposiciones

EMD de la señal X para perturbaciones magnéticas dinámicas a diferentes amplitudes y frecuencias.

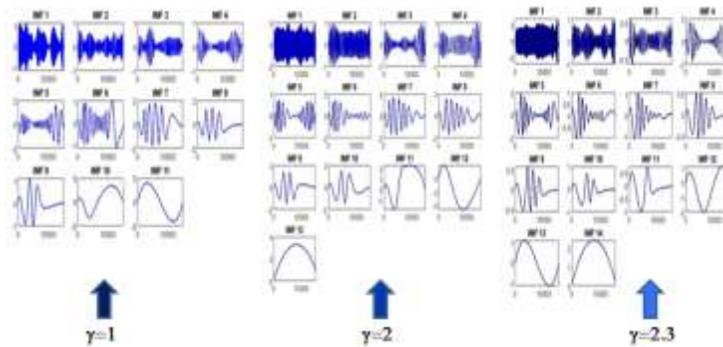


Figura 8. Descomposición EMD de la señal X para el sistema de Chua no perturbado.

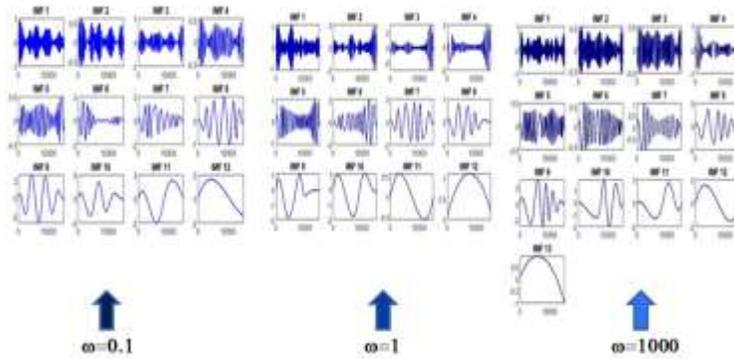


Figura 9. Descomposición EMD de la señal X para el sistema de Chua perturbado. Aquí  $\gamma = 0.1$ .

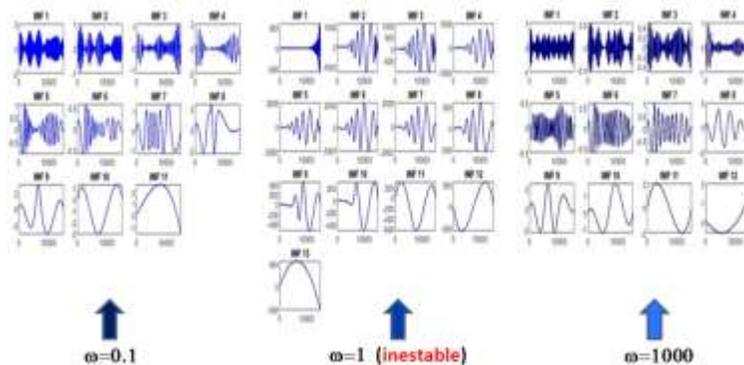


Figura 10. Descomposición EMD de la señal X para el sistema de Chua perturbado. Aquí  $\gamma = 1$ .

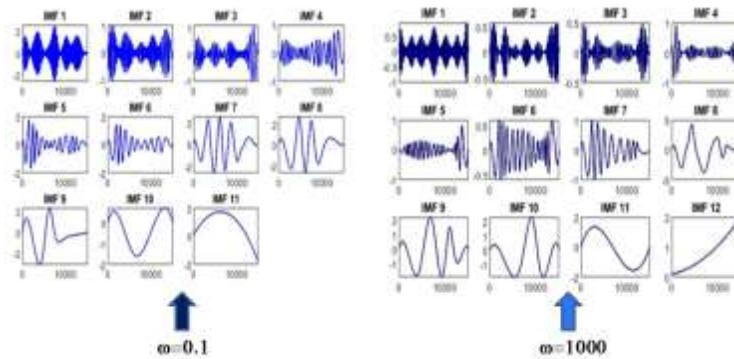


Figura 11. Descomposición EMD de la señal X para el sistema de Chua perturbado. Aquí  $\gamma = 2.3$ .

### CONCLUSIONES

En este trabajo se aplicó un análisis temporal de la dinámica del circuito de Chua cuando está sujeto a una perturbación magnética. La evolución temporal de la entropía de Shannon ( $E_s$ ) mostró características diferentes entre la perturbación estática y dinámica. En el caso de perturbación estática  $E_s$  mostró un comportamiento oscilatorio, en tanto que para perturbaciones dinámicas la evolución de  $E_s$  presentó regiones de inestabilidad del circuito para frecuencias de perturbación bajas. La descomposición EMD de la señal del canal X mostró componentes IMF diferentes entre los casos con perturbación y sin perturbación, tanto para IMFs de periodo corto (altas frecuencias) como de periodo largo (baja frecuencia). En el caso de perturbaciones dinámicas en que se presenta inestabilidad del circuito, la descomposición EMD presentó mayoritariamente IMFs de periodo y amplitud largos. Resultados similares se observaron para la descomposición EMD de la señal del canal Y.

Trabajo apoyado a través del proyecto CIC-UMSNH 2021.

### BIBLIOGRAFÍA

1. T. Kapitaniak, "Chaos for Engineers: Theory, Applications and Control" (Second Ed., Springer-Verlag, Berlin, Germany, 2000), pp. 120-127.
2. N. E. Huang, et al., The empirical mode decomposition and the Hilbert spectrum for nonlinear and non-stationary time series analysis, Proc. R. Soc. A, Vol. 454, 1998, pp. 903-995.
3. C. E. Shannon, "A mathematical theory of communication", The Bell System Technical Journal, Vol. 27, 1948, pp. 379-423, 623-656.
4. Clark, "DynPac: A dynamical systems package for Mathematica", disponible en: <http://www.me.rochester.edu/~clark/dynpac.html>. Fecha de consulta: abril de 2021.

## PROCESOS DIFUSIVOS EN UN SISTEMA DE REACCIÓN-DIFUSIÓN BIDIMENSIONAL CUASI-SINGULAR

Gabriel Arroyo Correa

Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas, UMSNH.

[garroyo@umich.mx](mailto:garroyo@umich.mx)

### RESUMEN

En este trabajo se analiza numéricamente las propiedades difusivas de un sistema de reacción-difusión basado en una generalización del sistema de Dixon que se hace para remover su singularidad en el origen [1], [2]. El método consiste en resolver numéricamente la ecuación de reacción-difusión, en donde la parte reactiva del sistema lo constituye el sistema de Dixon modificado y considerando constantes de difusión constantes. Se usa el esquema de diferencias finitas llamado método hacia adelante en el tiempo y centrado en el espacio, implementado en el lenguaje de programación Mathematica. Se consideraron diferentes condiciones de frontera (Dirichlet, Neumann, y condiciones periódicas), de condiciones iniciales. Se analizaron los patrones de Turing [3] y la evolución temporal del espacio de configuración del sistema. Los resultados obtenidos nos permitieron identificar: i) el efecto de las condiciones de frontera en la formación de los patrones de Turing; ii) el efecto de la simetría y asimetría en los valores de las constantes de difusión sobre la estabilidad de los patrones de Turing; iii) diferentes trayectorias de difusión asociadas al espacio de configuración del sistema. A modo de síntesis, los resultados obtenidos en este trabajo nos permiten concluir que las propiedades difusivas del sistema estudiado dependen tanto de la naturaleza de las condiciones de frontera como de las constantes de difusión. Los resultados de este trabajo se pueden aplicar a modelos de competencia de dos especies en donde se consideren efectos difusivos.

### INTRODUCCIÓN

Los sistemas de reacción-difusión son modelos matemáticos que describen cómo una o más partes de un sistema distribuidas en el espacio cambian bajo la influencia de dos procesos: reacciones locales y difusión. Los sistemas de reacción-difusión se aplican a la modelización de procesos dinámicos que se presentan en campos como la biología, la ecología, la geología, la química, la física, etc., por mencionar solo algunos. Desde que en 1952 Alan Turing los propuso como la base química de la morfogénesis [3], los sistemas de reacción-difusión se han utilizado para modelizar diversos procesos biológicos y no biológicos de formación de patrones. El sistema de Dixon es un modelo simplificado para describir la dinámica del campo magnético de una estrella de neutrones [2]. En este trabajo se analizan las propiedades difusivas del sistema de Dixon modificado, considerando diferentes condiciones de frontera (Dirichlet, Neumann, y condiciones periódicas), y de condiciones iniciales.

### TEORÍA

La ecuación de reacción-difusión en dos dimensiones está dada por [3]:

$$\begin{aligned}\frac{\partial U}{\partial t} &= a\nabla^2 U + F(U, V) \\ \frac{\partial V}{\partial t} &= b\nabla^2 V + G(U, V)\end{aligned}\quad (1)$$

En la Ec. (1), los parámetros  $a$  y  $b$  son los coeficientes de difusión (supuestos constantes:  $a=1$ ,  $b=0.02$ ) para las componentes  $U$  y  $V$  del sistema bidimensional analizado.  $\nabla^2$  es el operador laplaciano. Las partes reactivas del sistema de Dixon modificado están dadas por:

$$\begin{aligned}F(U, V) &= \frac{0.85 UV}{1 + U^2 + V^2} - 0.255 \\ G(U, V) &= \frac{0.85 V^2}{0.001 + U^2 + V^2} - 0.595V - \varepsilon\end{aligned}$$

(2)

El parámetro  $\varepsilon$  es un parámetro de control. Se considera una región rectangular y un paso en el tiempo de 0.44 y un espaciamiento espacial de 1.56 en ambas direcciones X e Y.

### METODOLOGÍA

La metodología consiste en resolver numéricamente las Ecs. (1) y (2). Se usó el esquema de diferencias finitas llamado método hacia adelante en el tiempo y centrado en el espacio, implementado en el lenguaje de programación Mathematica. Se considera una región cuadrada, un paso en el tiempo de 0.44 y un espaciamiento espacial de 1.56 en ambas direcciones X e Y. Se consideran dos tipos de condiciones iniciales: patrones iniciales aleatorios ( $t_0=0$ ) en ambas componentes, como se muestra en la Fig. 1, y patrones iniciales gaussianos ( $t_0=0$ ) en ambas componentes, Fig. 2.

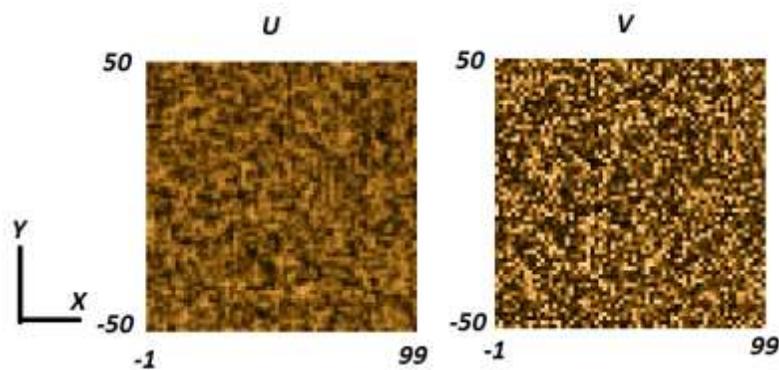


Figura 1. Distribuciones iniciales para el caso aleatorio.

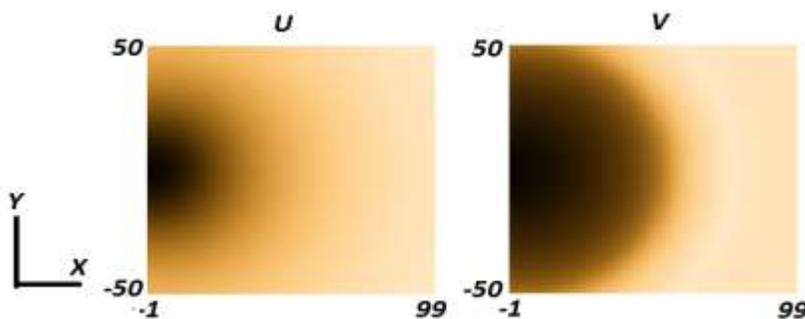


Figura 2. Distribuciones iniciales para el caso gaussiano.

### RESULTADOS

En las Figs, 3-9 se muestra los resultados para el caso correspondientes a las condiciones iniciales aleatorias de la Fig. 1, y para las tres condiciones de frontera indicadas: Dirichlet, Neumann y Periódicas. En todos los casos se muestran los patrones de Turing al tiempo  $t=88$  y para diferentes valores del factor de acoplamiento  $\varepsilon$  de la Ec. (2).

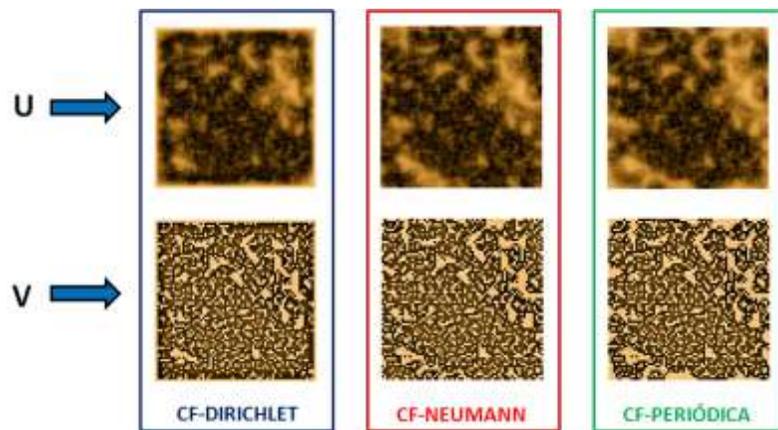


Figura 3. Patrones de Turing para el valor  $\varepsilon = 0.1$ .

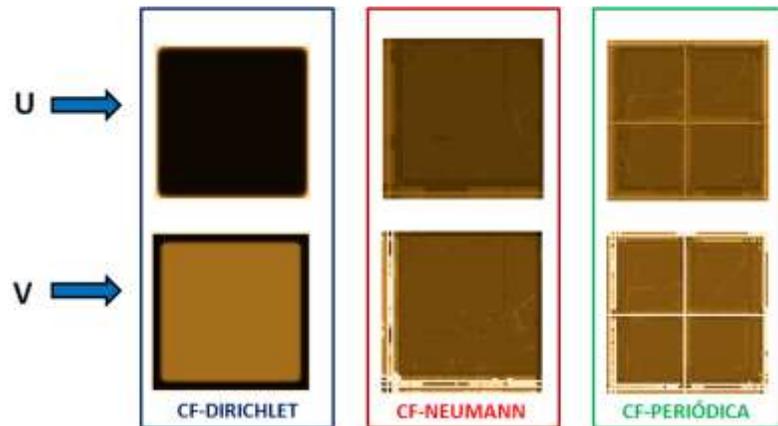


Figura 4. Patrones de Turing para el valor  $\varepsilon = -0.1$ .

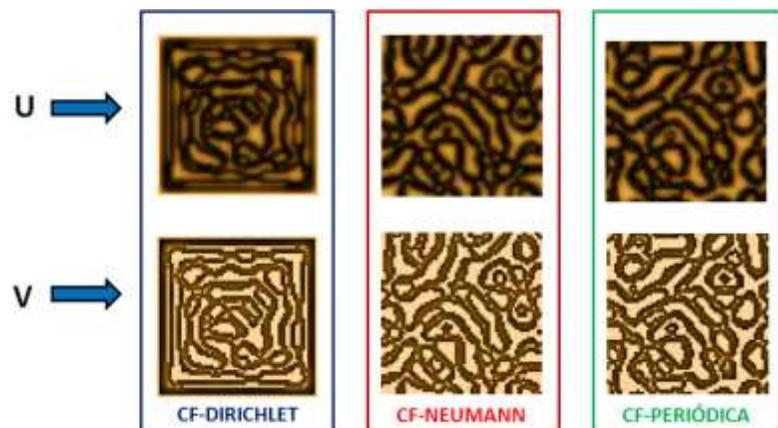


Figura 5. Patrones de Turing para el valor  $\varepsilon = 0.015$ .

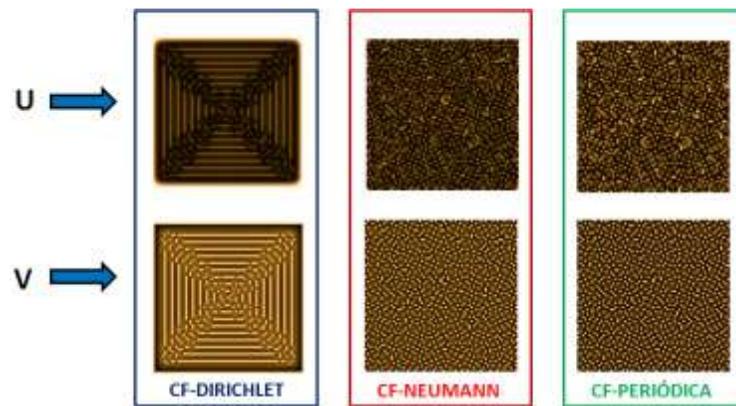


Figura 6. Patrones de Turing para el valor  $\varepsilon = -0.015$ .

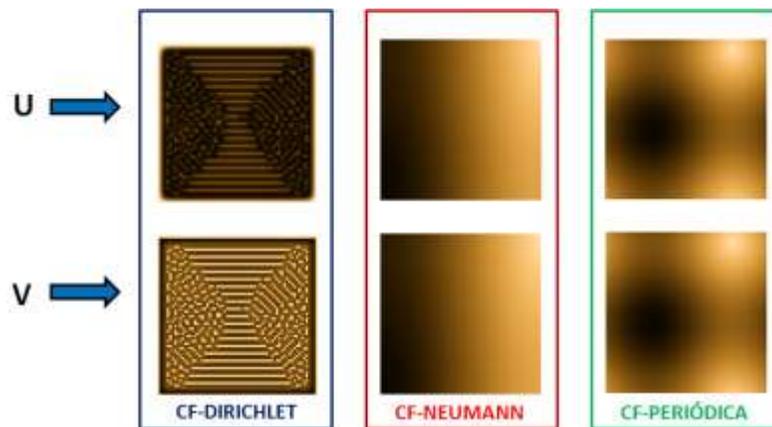


Figura 7. Patrones de Turing para el valor  $\varepsilon = 0.01$ .

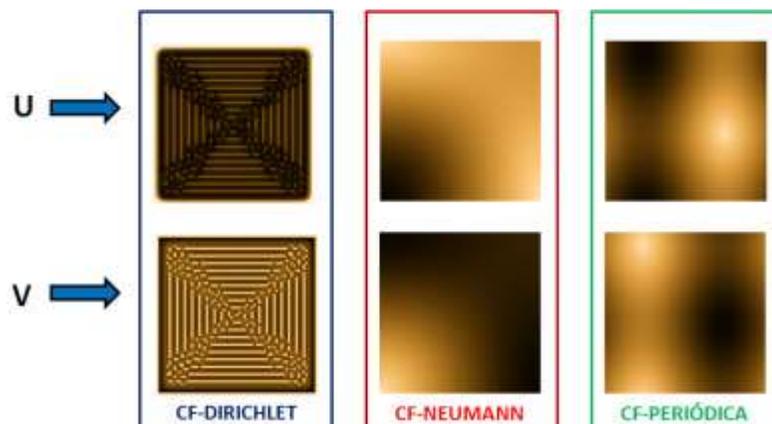


Figura 8. Patrones de Turing para el valor  $\varepsilon = -0.01$ .

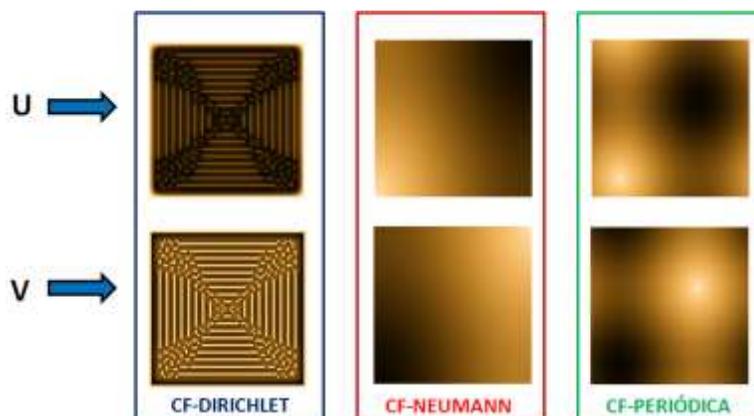


Figura 9. Patrones de Turing para el valor  $\varepsilon = 0$ .

De manera similar, en las Figs. 10-14 se muestra los resultados para el caso correspondientes a las condiciones iniciales de perfil gaussiano de la Fig. 2, y para las tres condiciones de frontera indicadas: Dirichlet, Neumann y Periódicas. En todos los casos se muestran los patrones de Turing al tiempo  $t=132$  y para diferentes valores del factor de acoplamiento  $\varepsilon$  de la Ec. (2).

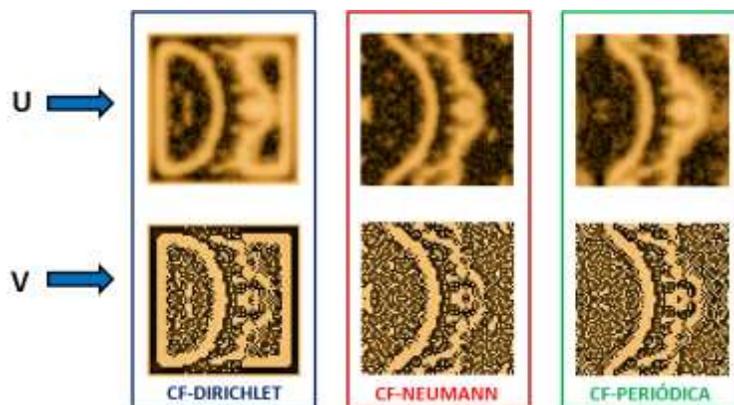


Figura 10. Patrones de Turing para el valor  $\varepsilon = 0.1$ .

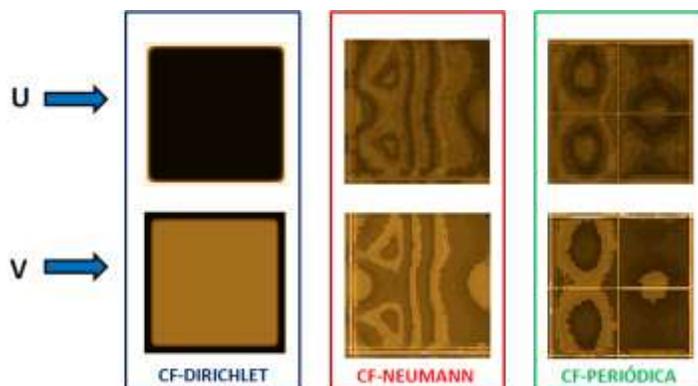


Figura 11. Patrones de Turing para el valor  $\varepsilon = -0.1$ .

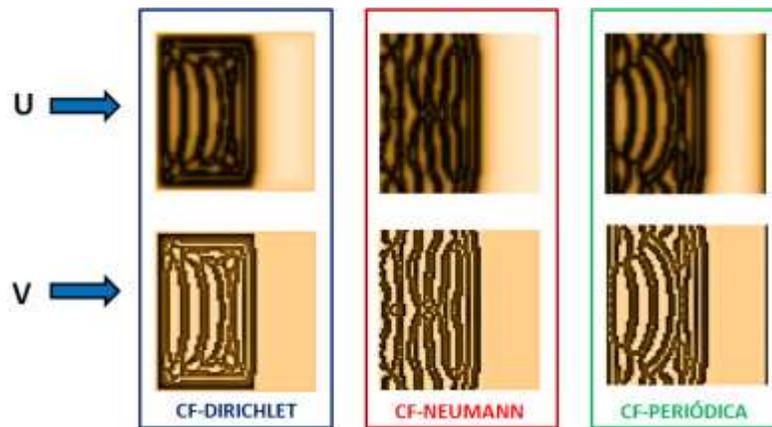


Figura 12. Patrones de Turing para el valor  $\varepsilon = 0.015$ .

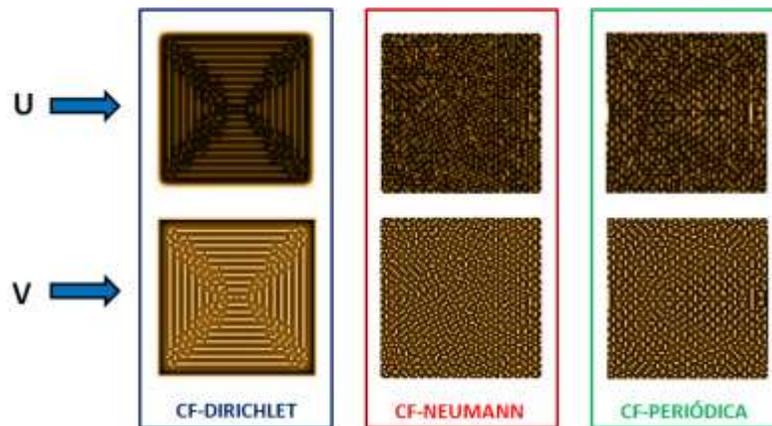


Figura 13. Patrones de Turing para el valor  $\varepsilon = -0.015$ .

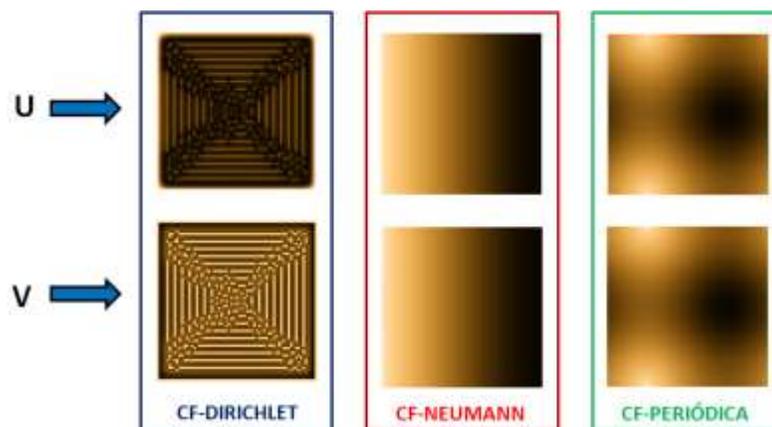


Figura 14. Patrones de Turing para el valor  $\varepsilon = 0$ .

**CONCLUSIONES**

En este trabajo se analizó numéricamente la dinámica espacial del sistema bidimensional de reacción-difusión basado en una generalización del sistema de Dixon. Se incluyó un parámetro de control y se consideraron diferentes condiciones de frontera así como de perfiles iniciales en las componentes del sistema. Los resultados numéricos muestran que las propiedades difusivas del sistema dependen tanto del valor del parámetro de control como de las condiciones de frontera que se tengan. Los resultados numéricos muestran también que las propiedades difusivas dependen del perfil inicial en las componentes del sistema. Sin embargo, para un valor nulo del parámetro de control, la dinámica difusiva es similar para los dos tipos de perfiles iniciales analizados: aleatorios y gaussianos.

Trabajo apoyado a través del proyecto CIC-UMSNH 2021.

**BIBLIOGRAFÍA**

1. G. Arroyo Correa. 11º Congreso Estatal de Ciencia, Tecnología e Innovación, 2016, Morelia, Mich.
2. J. C. Sprott. "Elegant chaos: Algebraically simple chaotic flows" (Singapore, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2014), pp. 109-111.
3. A. M. Turing. The Chemical Basis of Morphogenesis, Philosophical Transactions of the Royal Society of London B, Vol. 237, 641, 1952, pp. 37-72.

## DINÁMICA VIBRATORIA DE UNA MEMBRANA CUADRADA SUJETA A UN CORTE CUASI-FRACTAL EN UNO DE SUS LADOS

Gabriel Arroyo Correa

Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas, UMSNH.

[garroyo@umich.mx](mailto:garroyo@umich.mx)

### RESUMEN

El estudio de las propiedades mecánicas de membranas es importante en varios campos del conocimiento, debido a sus potenciales aplicaciones en tareas específicas que se presentan en sistemas físicos, químicos y biológicos. Desde el punto de vista analítico se conocen soluciones (eigenvalores y eigenfunciones) para geometrías simples (rectangulares, circulares y elípticas) y condiciones de frontera específicas, tanto del tipo Neumann como Dirichlet [1]. Sin embargo, cuando se tienen condiciones de frontera mixtas, el problema aún en geometrías simples puede requerir de soluciones numéricas [2]. En estos casos, el método de los elementos finitos permite aproximar con gran precisión soluciones numéricas al problema bajo estudio. En este trabajo se estudia numéricamente el problema de una membrana cuadrada, fija en su frontera, cuando en un uno de sus lados se hace un corte cuasi-fractal, con diferentes niveles de aproximación al conjunto de Cantor, sobre la frontera de definición de la membrana. Se analiza la dinámica vibratoria de la membrana en función del grado de profundidad del corte (entendido como el nivel de aproximación al conjunto de Cantor) usando el programa COMSOL v.3.5 [3]. Se cuantifica el corrimiento en los eigenvalores con respecto a los eigenvalores de la membrana sin corte y la distribución de las líneas nodales en las eigenfunciones correspondientes. Los resultados obtenidos muestran que dependiendo de la profundidad del corte, los eigenvalores y las eigenfunciones sufren modificaciones con respecto al caso de la membrana original sin corte. Los resultados obtenidos pueden ser utilizados en el diseño de membranas en donde se requiera modificar su distribución de energía.

### INTRODUCCIÓN

Las membranas son estructuras que aparecen en el mundo biológico o en dispositivos creados por el hombre para cumplir funciones determinadas. Las membranas son de vital importancia en los procesos celulares. En la industria y en la medicina las membranas artificiales encuentran una amplia gama de aplicaciones. Desde el punto de vista elemental de la física, una membrana es una superficie elástica delgada de cierta forma que se sujeta a lo largo de un contorno. La membrana vibrante es un ejemplo clásico que permite la comparación de las predicciones teóricas con los resultados experimentales. La matemática involucrada en el estudio de las vibraciones de una membrana implica el uso de derivadas parciales, en donde se pueden aplicar tanto métodos analíticos como numéricos. Solo los casos de geometría simple (rectangular, circular y elíptica), y cuando se consideran condiciones de frontera específicas, como lo son las del tipo Neumann o Dirichlet, permite obtener soluciones analíticas [1]. Sin embargo, en el caso de condiciones de frontera mixtas, el problema aún con geometrías simples puede requerir de métodos numéricos para su solución [2]. En estos casos, el método de los elementos finitos permite aproximar con gran precisión soluciones numéricas al problema bajo estudio. En este trabajo se estudia numéricamente la dinámica vibratoria de una membrana cuadrada, fija en su frontera, cuando en un uno de sus lados se hace un corte cuasi-fractal, con diferentes niveles de aproximación al conjunto de Cantor, sobre la frontera de definición de la membrana. Se hace uso del programa COMSOL v.3.5 [3].

### TEORÍA

La variación espacial de una membrana en dos dimensiones está dada por la ecuación de Helmholtz [1]:

$$\nabla^2 U = -\lambda U \quad (1)$$

en donde  $U(x,y)$  es la amplitud de vibración de la membrana asociada al eigenvalor  $\lambda$ , y  $\nabla^2$  es el operador laplaciano. En el caso de que la membrana esté fija en una parte de su contorno y tenga además un corte sobre este, se deben satisfacer las siguientes condiciones de contorno:

$$\begin{aligned}
 U &= 0 && \text{(perfil fijo)} \\
 \frac{\partial U}{\partial n} &= 0 && \text{(perfil del corte)}
 \end{aligned}
 \tag{2}$$

En la Ec. (2),  $n$  representa la normal al perfil definido por el corte. Para poder solucionar el problema de la dinámica vibratoria, derivado de las Ecs. (1) y (2), es necesario recurrir a métodos numéricos como es el método de elementos finitos [2].

**METODOLOGÍA**

La metodología consiste en resolver numéricamente las Ecs. (1) y (2), usando el paquete COMSOL v.3.5. En la Fig. 1 se muestra los perfiles de las membranas analizadas. Se cuantificó el corrimiento en los primeros 25 eigenvalores con respecto a los eigenvalores de la membrana sin corte (C0) y la distribución de las líneas nodales en las eigenfunciones correspondientes.

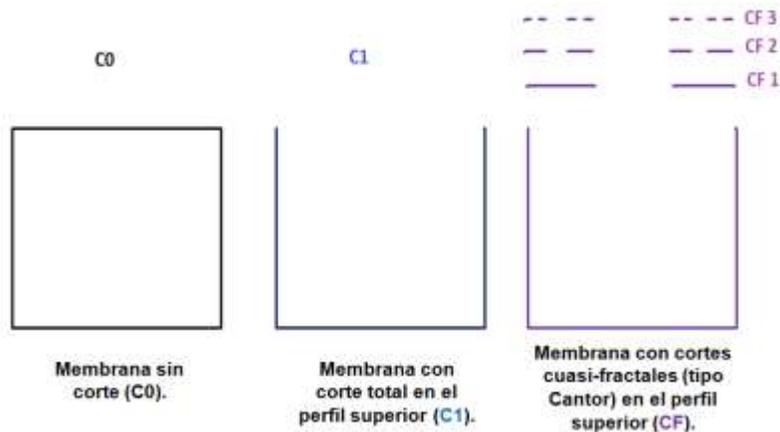


Figura 1. Perfiles de las membranas estudiadas.

**RESULTADOS**

En la Fig. 2 se muestra los resultados para la distribución de los primeros 25 eigenvalores y corrimiento en relación a los eigenvalores para el caso de la membrana sin corte C0.

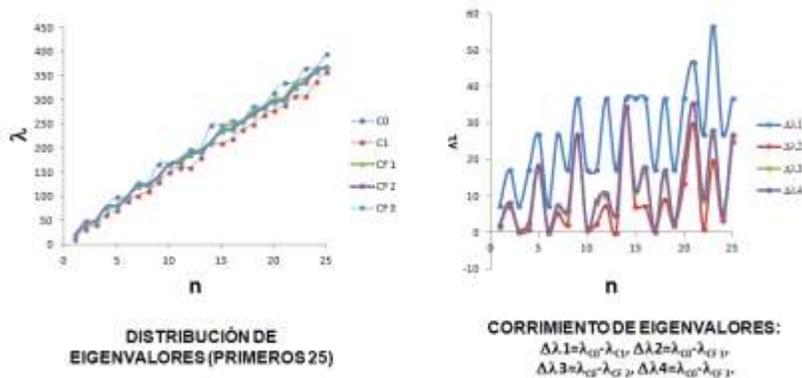


Figura 2. Distribución de eigenvalores y corrimientos con respecto al caso de la membrana C0.

Las Figs, 3-7 presentan los contornos de la parte espacial  $U(x,y)$  de las eigenfunciones correspondientes a los eigenvalores  $\lambda = 1, 10$  y  $25$ , y para las diferentes geometrías consideradas en este trabajo (Fig. 1).

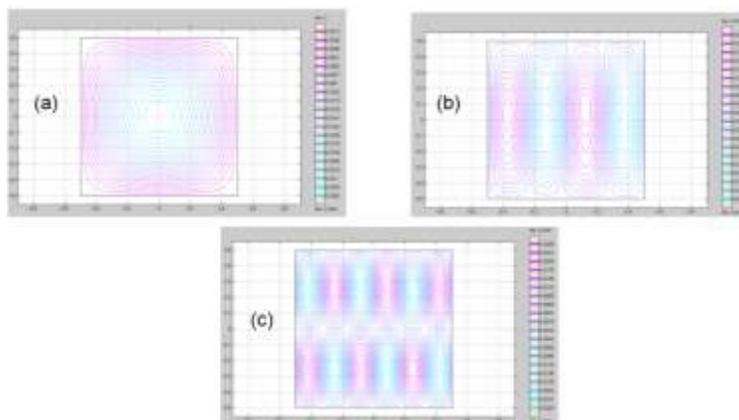


Figura 3. Contornos para para el corte C0 y para diferentes eigenvalores: (a),  $\lambda=1$ ; (b),  $\lambda=10$ ; (c),  $\lambda=25$ .

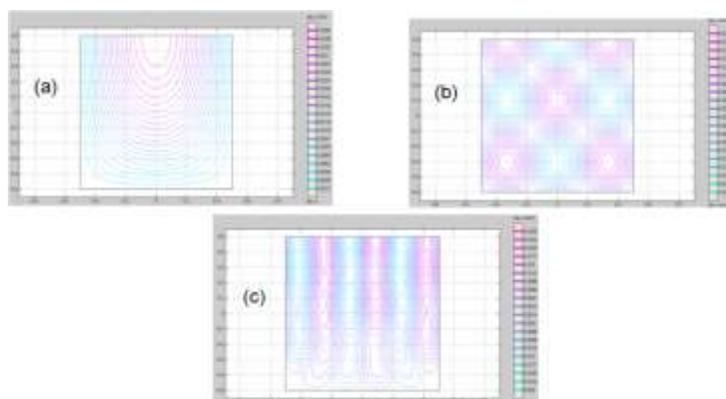


Figura 4. Contornos para el corte C1 y para diferentes eigenvalores: (a),  $\lambda=1$ ; (b),  $\lambda=10$ ; (c),  $\lambda=25$ .

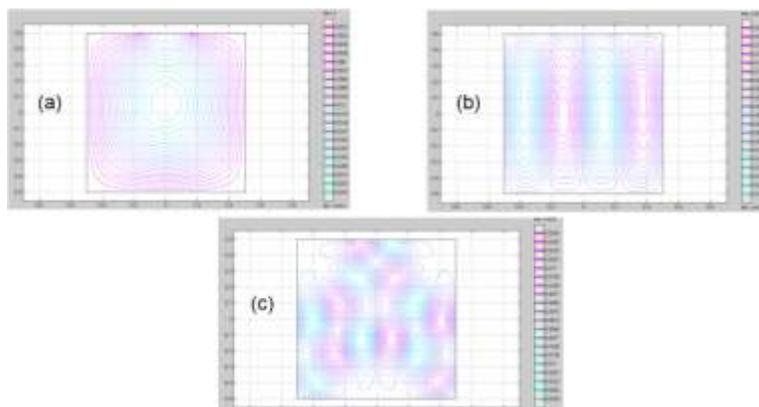


Figura 5. Contornos para el corte CF 1 y para diferentes eigenvalores: (a),  $\lambda=1$ ; (b),  $\lambda=10$ ; (c),  $\lambda=25$ .

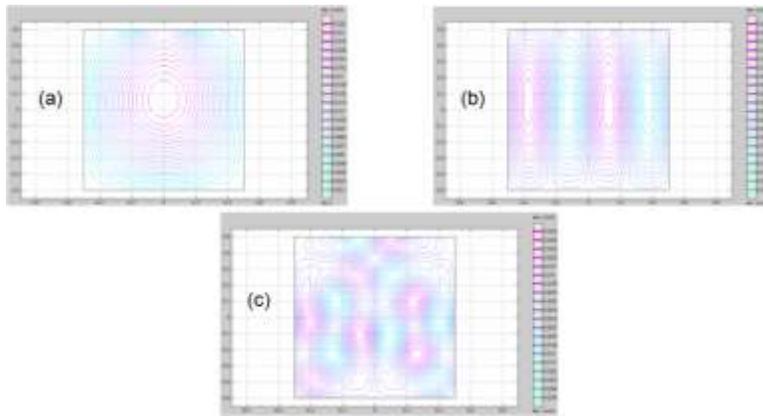


Figura 6. Contornos para el corte CF 2 y para diferentes eigenvalores: (a),  $\lambda=1$ ; (b),  $\lambda=10$ ; (c),  $\lambda=25$ .

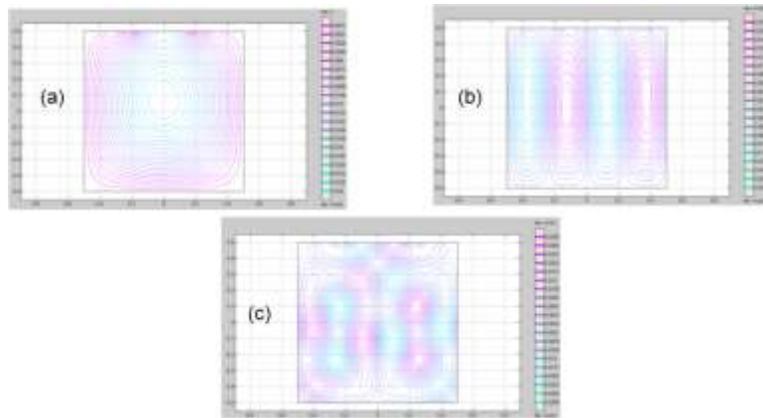


Figura 7. Contornos para el corte CF 3 y para diferentes eigenvalores: (a),  $\lambda=1$ ; (b),  $\lambda=10$ ; (c),  $\lambda=25$ .

## CONCLUSIONES

En este trabajo se estudió numéricamente el problema de la vibración de una membrana cuadrada fija en su frontera, cuando en un uno de sus lados se hace un corte lineal cuasi-fractal. La distribución de los eigenvalores para los cortes cuasi-fractales (CF 1, CF 2 y CF 3) están acotados entre los eigenvalores para la membrana sin corte (C0) y para el corte completo del perfil superior de la membrana (C1). La distribución de los corrimientos de los eigenvalores tiende a ser muy similar a medida que aumenta la profundidad del corte cuasi-fractal. Los resultados obtenidos mostraron que la distribución de los contornos de la parte espacial de las eigenfunciones cambia con la profundidad del corte cuasi-fractal.

Trabajo apoyado a través del proyecto CIC-UMSNH 2021.

## BIBLIOGRAFÍA

1. R. Courant, D. Hilbert, "Methods of Mathematical Physics" (Wiley Interscience, 1953), Vol. 1, pp. 275-396.
2. M. J. Gander, G. Wanner, "From Euler, Ritz and Galerkin to Modern Computing", SIAM Review, Vol. 54,4, 2012, pp. 1-40.
3. COMSOL AB, "COMSOL Multiphysics, version 3.5. Información técnica", 2008.

## UNA MIRADA A LA INTERACCIÓN DE PROTEÍNAS TAU UTILIZANDO EL MICROSCOPIO COMPUTACIONAL

Paola Melissa Aguilar Hernández<sup>1</sup>, Susana Figueroa-Gerstenmaier<sup>2</sup>, Gustavo Basurto-Islas<sup>2</sup>, Salvador Herrera-Velarde<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>Subdirección de Investigación y Posgrado, Instituto Tecnológico Superior de Xalapa, Xalapa, Veracruz, <sup>2</sup>División de Ciencias e Ingenierías, Campus León, Universidad de Guanajuato, León, Guanajuato.  
paolaaguilar1997@gmail.com

### RESUMEN

La proteína Tau juega un papel crucial en el desarrollo de la enfermedad de Alzheimer (EA). Las personas con esta patología se caracterizan por presentar placas amiloideas y marañas neurofibrilares en el cerebro (Morgenstern, 2011). La proteína Tau y sus variantes son el principal componente de filamentos insolubles que posteriormente se agregan formando marañas neurofibrilares (Fundación Alzheimer España, 2015). Tau, al ser una proteína intrínsecamente desordenada, no posee una estructura bien definida, dificultando su estudio con métodos experimentales convencionales y resultando un reto el obtener una descripción estructural de los filamentos y marañas a través de las etapas del proceso de agregación durante la EA. Debido a estas características de Tau, la simulación mediante el denominado microscopio computacional puede brindar información con detalle atómico de la dinámica de interacción entre dos proteínas Tau. Las simulaciones se trabajaron en un ambiente Linux con el software GROMACS, y para su visualización se utilizó el programa VMD. Para el protocolo de simulación se construyó la estructura inicial con ayuda de programas de bioinformática. En una primera etapa, se realizaron simulaciones con solvente explícito con la proteína extendida, sin embargo, resultó computacionalmente inviable por el gran número de moléculas de agua. Para aliviar esta situación se simuló al vacío durante 30 ps a 298 K, para colapsar la proteína a su valor de radio de giro experimental. Posteriormente, se simuló con solvente explícito a 335 K durante 35 ns. Por último, se llevaron a cabo dos simulaciones con el campo de fuerzas CHARMM36m usando el modelo de agua mTIP3P a 310 K. En la primera simulación se estudió un monómero Tau durante 25 ns. El segundo sistema consistió en la evaluación de dos monómeros de Tau durante 75 ns. Se analizó la estabilidad estructural de ambos sistemas a través del radio de giro, el RMSF y RMSD, formación de estructura secundaria y de puentes de hidrógeno. Para el sistema con dos monómeros de Tau se observó un reacomodo de las proteínas que corresponden a la configuración de mínima energía, donde la estructura inicial cambia completamente su configuración al final de la simulación. Dado que las proteínas están solvatadas sin exceso de iones y no hay moléculas que induzcan la agregación, no se observan indicios de formación de oligómeros, sin embargo, notamos que sí existe una interacción/acercamiento entre la región rica en prolina y la región N-terminal de las proteínas. Obtuvimos un sistema estable de la simulación, el cual es viable para estudiar el proceso de interacción Tau. Esta es la primera simulación atómica de dos proteínas Tau en solvente explícito. Los resultados estructurales y de dinámica obtenidos de nuestras simulaciones podrían ayudar a entender cómo es la interacción monómero-monómero y dar pie a nuevas investigaciones en condiciones más apegadas a condiciones fisiológicas.

### INTRODUCCIÓN

La forma más común de demencia es la EA, que es un desorden neurodegenerativo (Herrup, 2010). En la actualidad se desconoce qué desencadena este padecimiento, sin embargo, los investigadores proponen dos rutas como posibles respuestas: los péptidos beta amiloide que se acumulan formando las placas seniles, y en segundo lugar a la proteína Tau formando los ovillos neurofibrilares (Gra, Padrón y Libre, 2002). Tau es responsable de dar estabilidad a los microtúbulos de las neuronas, sin embargo, algunas modificaciones postraduccionales, como la hiperfosforilación, cambios conformacionales o truncación, promueven la pérdida de esta función y

comienza un proceso de agregación (Castro, Munteanu y Cavaco-Paulo, 2019; García-Sierra, Mondragón-Rodríguez y Basurto-Islas, 2008; Mondragón-Rodríguez, Basurto-Islas, Santa-María, Mena, Binder, Ávila, Smith, Perry y García-Sierra, 2008; Mondragón-Rodríguez, Basurto-Islas, Binder y Gracia Sierra 2008). La proteína Tau es del tipo intrínsecamente desordenada (IDP por sus siglas en inglés *intrinsically disordered protein*). Debido a esta característica resulta muy difícil poder caracterizar a nivel experimental a los agregados en las distintas fases del proceso de agregación (Battisti *et al.*, 2012).

La simulación computacional mediante Dinámica Molecular (DM) atomística es una herramienta muy útil, que puede proporcionar información de la dinámica de agregación y de la estructura de las moléculas. En este trabajo se presenta un estudio mediante DM atomística de la interacción entre dos monómeros de Tau para observar y analizar su comportamiento, se evaluaron algunas propiedades tales como la raíz de la desviación cuadrática media, la raíz de la fluctuación cuadrática media, el radio de giro, la estructura secundaria, los puentes de hidrógeno y su distribución de probabilidad.

## TEORÍA

La EA es una enfermedad neurodegenerativa del sistema nervioso central que afecta principalmente a los adultos mayores, conduciendo a la demencia. Las causas probables por las que una persona padece la EA son por patologías de placas amiloideas o seniles y ovillos neurofibrilares (Morgenstern, 2011). En las primeras, lo que ocurre es que se crean agregados de un péptido, conocido como beta amiloide, compuesto de 40 a 43 aminoácidos (Gra *et al.*, 2002), formando así las placas amiloideas y se cree que desencadenan mecanismos moleculares que conllevan al establecimiento de la EA. Por otra parte, la proteína Tau se agrega para formar los ovillos neurofibrilares, lo que genera una pérdida en la sinapsis entre las neuronas del cerebro, causando todos los padecimientos generales de la EA (Morgenstern, 2011).

Las proteínas intrínsecamente desordenadas son aquellas que carecen de una estructura 3D fija, ya sea en su totalidad o por fragmentos (Battisti, *et al.*, 2017). Este tipo de proteínas se asocian con funciones de control, reconocimiento y señalización dentro del organismo las cuales se deben de encontrar estrictamente reguladas. Sin embargo, hay ocasiones en las que están mal expresadas, procesadas o modificadas, provocando varios problemas patológicos. La mayoría de los casos que presentan cáncer y enfermedades neurodegenerativas se relacionan con un mal funcionamiento de alguna proteína desordenada (Kulkarni y Uversky, 2019).

La proteína Tau es una de las proteínas desordenadas más grandes que existen. Se encuentra ubicada a lo largo de los axones de las neuronas y su función principal es estabilizar y unir a los microtúbulos dentro de los axones para mantener la estructura y una buena funcionalidad de las neuronas (Battisti y Taenembaum, 2012; Castro, *et al.*, 2019). Cuenta con 6 isoformas y la más extensa de ellas contiene 441 aminoácidos (Battisti *et al.*, 2017; Instituto Roche, 2020). Esta isoforma se compone de: a) un dominio de proyección con dos inserciones en el extremo N-terminal, b) una región rica en prolina (la cual interactúa con otras proteínas, especialmente con la familia Src de proteínas quinasas, que tienen relación con la regulación de procesos celulares), c) la región de unión de microtúbulos con cuatro regiones repetidas asociadas a interacciones con membranas lipídicas y d) el extremo C-terminal. Tau presenta una carga negativa en el extremo N-terminal. Los resultados del estudio del RMSF indican que la región con más movilidad de la proteína se encuentra en el extremo N-terminal y el dominio de proyección, y, por el contrario, la región con menos movilidad o que se encuentra más rígida es la región rica en prolina (Castro, *et al.*, 2019).

La región rica en prolina es una sección de la proteína Tau donde se encuentra en gran cantidad el aminoácido no esencial, prolina. En algunas proteínas, la prolina cumple con la función de evitar plegamientos estructurales que perjudiquen a la biomolécula. Su cadena lateral es hidrofóbica y la prolina muy raramente es capaz de formar puentes de hidrógeno (Parada, 2019). Sin embargo, lo que hace que Tau sea una IDP es debido principalmente a esta región (Nizynski *et al.*, 2017).

La proteína Tau ha sido extensamente estudiada en los últimos años por su relación con las afecciones neurodegenerativas, dado que se han encontrado agregados de proteína Tau en el

cerebro de pacientes con la EA. Hay teorías que dicen que algunas alteraciones o mutaciones del cromosoma 17 (donde es codificada la síntesis de la proteína Tau), pueden inducir la hiperfosforilación. Este suceso pudiese conducir a que la proteína pierda su función estabilizadora, puesto que se debilita su afinidad con los microtúbulos (Herrup, 2010; Gra *et al.*, 2002). Su desestabilización daría paso a que la proteína se auto agregue formando los ovillos neurofibrilares. La agregación de la proteína impide la sinapsis entre las neuronas (comunicación y transporte de nutrientes), dando lugar al daño neuronal y cognitivo (Castro *et al.*, 2019).

Los sitios donde se presenta la fosforilación de la proteína Tau se encuentran en la región C-terminal y la región rica en prolina. Sin embargo, en la sección de unión de microtúbulos también hay pocos sitios, pero los que resultan importantes, son los sitios S258, S262, S289 y S356, siendo el sitio S262 uno de los encontrados en la EA (Nizynski *et al.*, 2017).

La amiloidogénesis (proceso de agregación) de la proteína Tau se puede representar por una polimerización nucleada. La cual consiste en que el cambio conformacional que presenta la isoforma patológica de Tau dé lugar a la agregación o a la formación de ovillos neurofibrilares mediante la creación de un núcleo (una etapa lenta). Después, una vez que se ha formado el núcleo, se da paso a adiciones rápidas de la proteína formando los agregados, acelerando el proceso (Gasset y Westaway, 2000; Nizynski *et al.*, 2017). El proceso de agregación de la proteína Tau presenta una cinética sigmoidea. Se presenta un incremento lento, después acelerado y, por último, un desaceleramiento o descenso del proceso (Millán, 2014). De acuerdo con esto, las tres fases que componen dicho proceso son: una fase de retraso, una de alargamiento y una fase de meseta (Nizynski *et al.*, 2017).

En recientes investigaciones se ha encontrado que, en la fase de retraso se crean de forma transitoria aglomerados no fibrilares y con una estructura heterogénea, los cuales, resultan ser de las formas más tóxicas de la proteína Tau. La capacidad de detectar experimentalmente estas formas transitorias es realmente difícil y los eventos que se dan en este punto no están del todo caracterizados y este arreglo estructural ha sido asociado con la región N-terminal y la región de unión de microtúbulos. Esta problemática dio pie a la realización de este trabajo. Nuestro objetivo es caracterizar la fase de retraso, la cual es la fase más lenta de todo el proceso, por cuestiones de naturaleza entrópica (desorden en el sistema), pero una vez que ha pasado por dicha fase, tendrá un ascenso acelerado en la formación de los ovillos neurofibrilares (Nizynski *et al.*, 2017).

La idea principal de una simulación de dinámica molecular es explicar cómo se comportan y se mueven las partículas. A partir de sus posiciones y momentos a lo largo del tiempo, de acuerdo con las leyes de la Mecánica Estadística, es posible obtener sus propiedades macroscópicas. Dentro de la dinámica molecular, las ecuaciones de movimiento de Newton se integran numéricamente para generar un camino o "trayectoria" a nivel atómico en cierto tiempo; y se puede utilizar para investigar distintas propiedades del sistema: estructurales, dinámicas o termodinámicas (Braun *et al.*, 2018). En este trabajo utilizamos el campo de fuerzas CHARMM36m (C36m) para describir las interacciones entre partículas. Este campo de fuerza se publicó recientemente, y es una versión mejorada de su antecesor, el CHARMM36 (C36). El C36m, es uno de los campos de fuerza más recientes y está parametrizado específicamente para reproducir el comportamiento de proteínas desordenadas (Huang *et al.*, 2017). Es importante mencionar que el campo de fuerza C36m es empleado junto con el TIP3P modificado (mTIP3P), el cual está también parametrizado para funcionar juntos. Las simulaciones se corrieron usando el software de libre distribución GROMACS (GROMACS, 2019), y para su posterior análisis, se usó (también software libre) VMD (VMD, 2019) para las visualizaciones y xmgrace (xmgrace, 2019) para hacer las gráficas.

Para poder analizar y cuantificar lo que ocurre en la simulación y obtener conclusiones, a partir de las trayectorias obtenidas del movimiento y de las interacciones en el mundo microscópico, se calculan observables (propiedades promedio). A continuación, se describen los observables que calculamos en este trabajo.

**RMSD:** la raíz de la desviación cuadrática media (RMSD, por sus siglas en inglés: *root-mean-square deviation*) calcula el cambio de las posiciones de las moléculas durante la simulación, superponiendo una estructura inicial con una final, lo cual muestra la estabilidad de una molécula

respecto a la otra (Olivares, 2019). Con ayuda del comando *rms* se puede calcular de forma sencilla en GROMACS.

**RMSF:** la raíz de la fluctuación cuadrática media (RMSF por sus siglas en inglés *root mean square fluctuation*). Nos indica el desplazamiento de un átomo en relación con la estructura completa del sistema promediado sobre el número de átomos, es decir, calcula las fluctuaciones de los átomos en relación con la estructura promedio de la simulación. Esto nos ayuda a saber la flexibilidad que tiene la estructura dentro del sistema, entre más alto sea el valor de RMSF, mayor flexibilidad tendrá el átomo o grupo de átomos en ese rango (Kleijnung, 2015; Zhao, Zeng y Massaiah, 2015). GROMACS nos permite hacer este cálculo de una forma muy sencilla con el comando *rmsf*.

**Radio de giro:** el radio de giro nos ayuda a indicar como se compacta una proteína (Battisti *et al.*, 2012). Entre más grande sea el valor del radio de giro, la proteína estará menos compactada, en cambio, si el valor del radio de giro va disminuyendo, la proteína se irá plegando más (Lobanov, Bogatyreva, y Galzitskaya, 2008). Calcular esto con GROMACS es simple; se utiliza el comando *gyrate*.

**Estructura secundaria:** Es la forma en como los segmentos del esqueleto de la proteína se orientan (McMurry, 2008). Para poder calcular esto en GROMACS, es necesario que se descargue previamente el programa DSSP que ayuda a la asignación de dicha estructura sin predecirla. Una vez que se haya descargado de forma exitosa se utiliza el comando *do\_dssp* para poder realizar el cálculo (GROMACS, 2014).

**Puentes de hidrógeno:** Se calcula el número de puentes de hidrógeno entre dos sistemas de referencia, contabilizando los sitios aceptores y donantes en una trayectoria (Kostal, 2016). Cabe resaltar que los puentes de hidrógeno son los responsables en darle estabilidad a la estructura secundaria de las proteínas (McKee y McKee, 2014). Su cálculo en GROMACS resulta ser relativamente fácil con ayuda del comando *hbond*, el cual se encarga de analizar los puentes de hidrógeno en función del radio de corte para los ángulos formados entre hidrógeno-donante-aceptor (los grupos OH Y NH son donantes y el oxígeno (O) siempre se considera como aceptor por sus pares de electrones libres) y cierta distancia definida entre el donante y el aceptor (GROMACS development team, 2018).

**Distribución de probabilidad:** Para poder definir una distribución de probabilidad debemos de tener claro el concepto de variable aleatoria continua. Las variables aleatorias son aquellas a las que se les asignan eventos posibles dentro de algún experimento aleatorio y, las variables aleatorias continuas abarcan valores de todos los números reales. Una distribución de probabilidad de este tipo de variables no nos dirá de forma exacta la probabilidad de que un evento de la variable ocurra, sino que nos dirá que tan probable es que dicho evento ocurra (Pérez-Porto y Gardey, 2016). Habrá un punto en donde los datos se agruparán en mayor cantidad, siendo los eventos con más probabilidad de ocurrir (Mendenhall, Beaver, y Beaver, 2010). Esta propiedad se calculó utilizando un código de Python realizado por nosotros.

## RESULTADOS

En la primera simulación llevada a cabo se montó el sistema en una caja cúbica con 1.0 nm de separación con respecto al borde de la caja. Al momento de hidratar el sistema se agregaron 347,742 moléculas de agua. El total de átomos en el sistema era de 1,465,450, lo cual resultaba ser un número de partículas muy grande para una simulación, ya que hace el proceso más costoso, computacionalmente hablando. Con la finalidad de reducir el tamaño del sistema para que resultara menos costoso, se optó por llevar la simulación al vacío, basándonos en el trabajo de Battisti *et al.* (2012). Posteriormente, con la proteína compactada mediante vacío se realizó otra simulación, para ello se ocupó una caja dodecaédrica por tener una forma casi esférica, y, por consiguiente, un menor volumen. Cuando se hidrató este sistema, se agregaron únicamente 159,326 moléculas de agua, teniendo en total 484,394 átomos en el sistema. Con esto, nos podemos dar cuenta que este método fue exitoso, al reducir más de un millón de átomos en nuestro sistema. A continuación, se muestra la comparación de la proteína Tau original (extendida) y de la proteína compactada (una vez que ya se corrió la simulación al vacío), así como de la proteína dentro del solvente donde es evidente la reducción del tamaño del sistema:

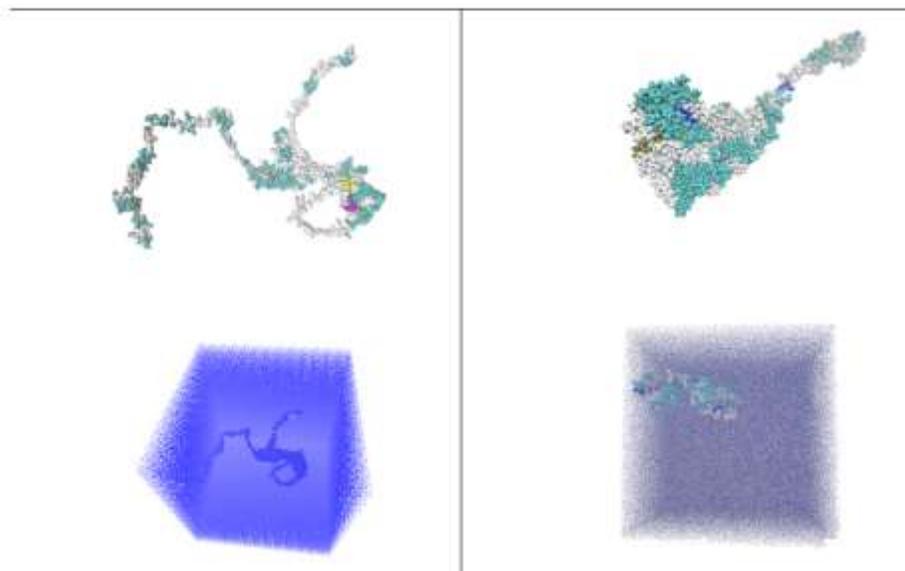
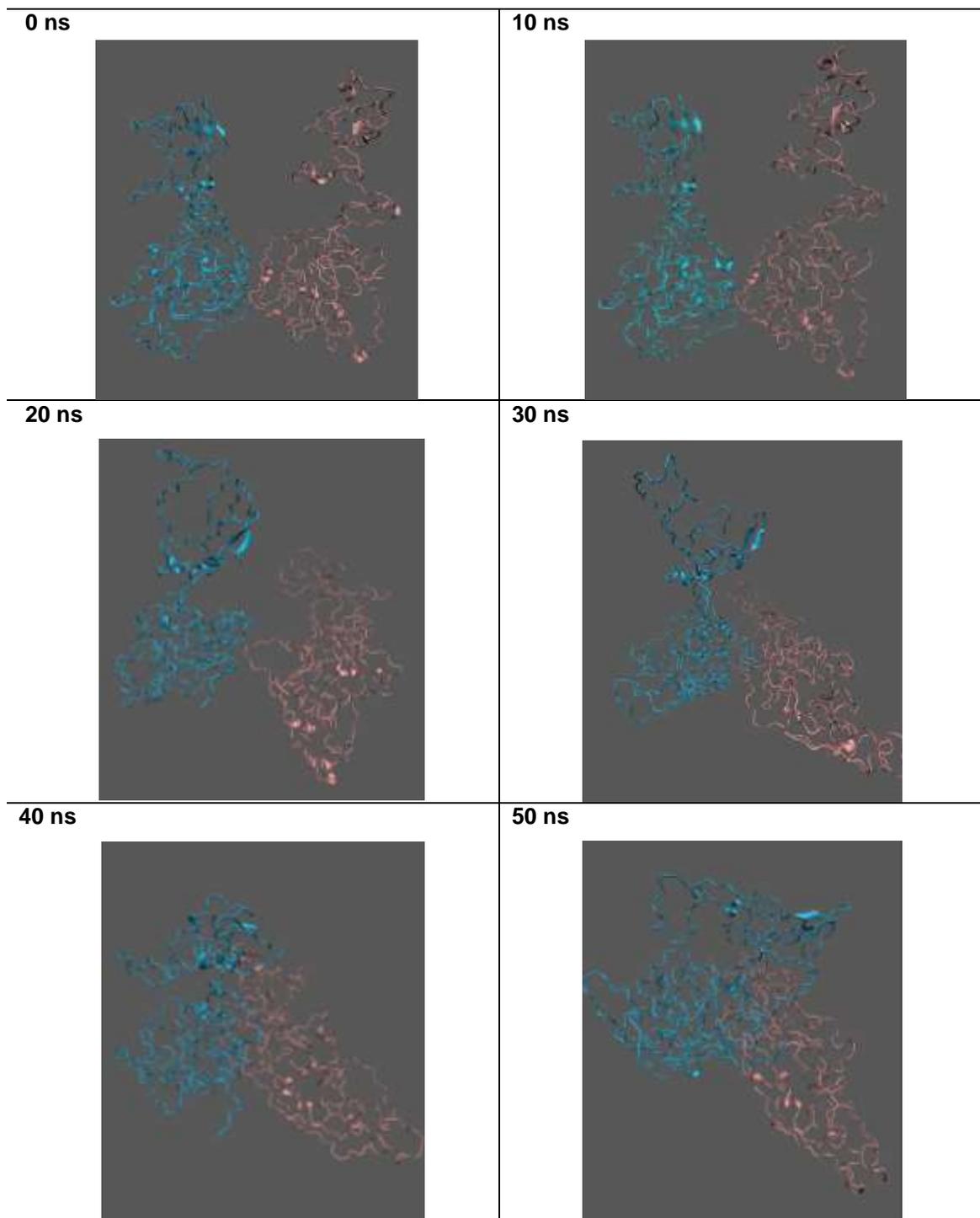


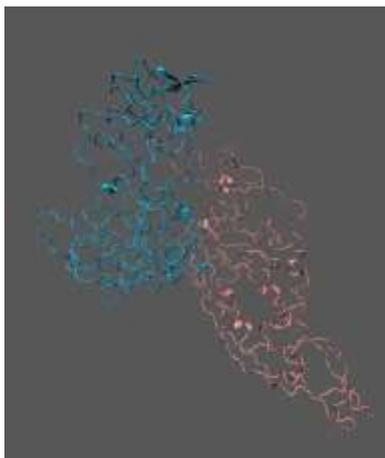
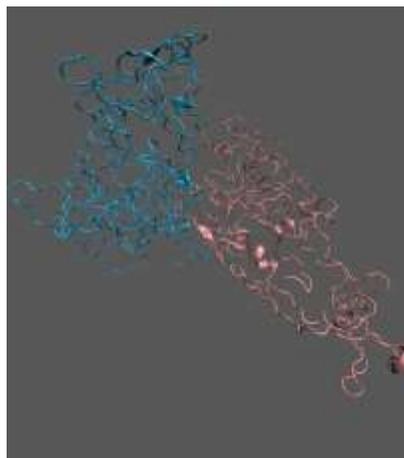
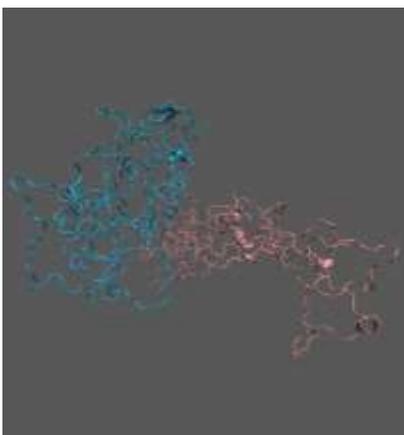
Figura 1 Comparación de la estructura de la proteína Tau antes y después de colapsarla al vacío. En la parte superior se muestran la molécula sola y en la parte inferior la caja de simulación conteniendo las moléculas de proteína y agua.

Como se observa en la figura 1, la simulación al vacío resultó favorable, puesto que la cantidad de moléculas de agua disminuyó drásticamente al compactar el tamaño ocupado por la proteína. Esto será de gran utilidad para cuando estudiemos el sistema de dos proteínas Tau.

Una vez que tuvimos una proteína Tau con un número accesible de moléculas de agua, se realizaron algunas simulaciones de prueba para explorar la estabilidad del sistema. Dichas simulaciones no presentaron problema alguno. Posteriormente se realizó una simulación de 26 ns en el ensamble NTP (número de partículas, presión y temperatura constantes). Esta primera simulación se llevó a cabo durante 1 ns en la fase de equilibración y 26 ns para la producción a 310 K. Usando el baróstato Parrinello-Rahman, el radio de corte de Verlet y el algoritmo de restricciones LINCS con un paso de tiempo de 0.002. La simulación para dos proteínas Tau alcanzó un tiempo de simulación de 75 ns. En la tabla 1 tenemos la serie de fotos de dicha simulación tomadas cada 10 ns. En estas imágenes, llamaremos a la proteína de la izquierda (azul) como proteína 1 y a la proteína de la derecha (rosa) proteína 2.

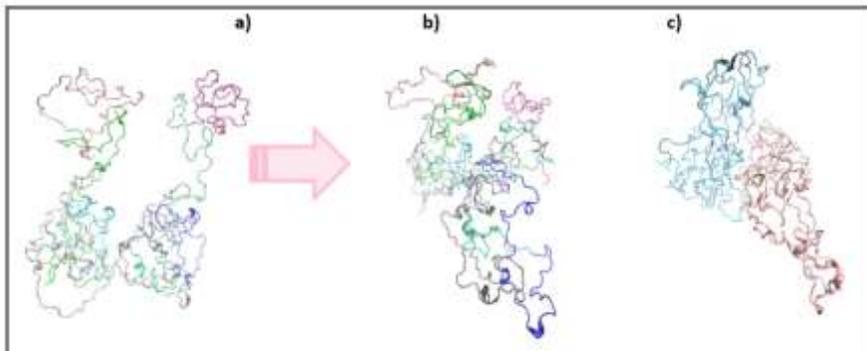
Tabla 1 Secuencia de fotos tomadas cada 10 ns de la simulación de dos proteínas Tau durante 75 ns.



**60 ns****70 ns****75 ns**

Podemos observar que durante el trayecto de la simulación ambas proteínas modifican tanto su conformación estructural como de orientación para favorecer la interacción entre ellas. A partir de los 30 ns se puede visualizar que la proteína 1 tiene un mayor movimiento y empieza a atraer a la proteína 2, la cual presenta visualmente un menor cambio estructural. Al final, en la última foto, se aprecia como ambas proteínas han cambiado su configuración inicial completamente. En la figura 33 se observa mejor como empieza a presentarse una interacción entre las proteínas, aunque aún no existe el proceso de agregación.

Figura 2 Foto de dos proteínas Tau al inicio y al final de la trayectoria de la simulación



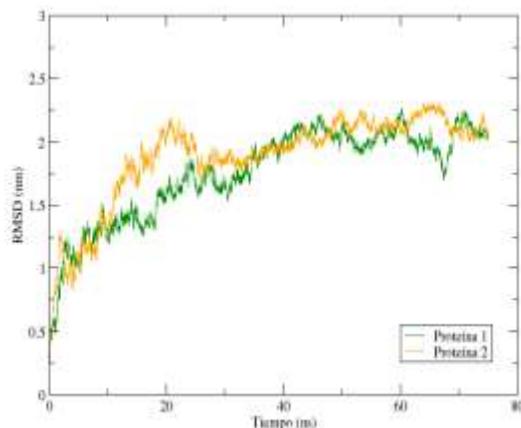
*Nota:* Sistema de 75 ns coloreadas por secciones (a y b) y por dos colores para distinguirlas (c). Podemos observar en la figura 2: a) una foto de las dos proteínas al iniciar la simulación. Cada proteína se encuentra coloreada por sus regiones correspondientes, con distintas tonalidades para diferenciarlas (el color gris es la región N-terminal y dominio de proyección, el color azul es la región rica en prolina, el color verde es la región de unión de microtúbulos y el color rosado es la región C-terminal), 2b) es una foto al finalizar la trayectoria de la simulación de 75 ns con sus regiones coloreadas con la misma descripción de colores que en la 2a, y, por último, en 2c) se muestran las proteínas en un solo color cada una para una mejor visualización. Podemos notar como las partes que tienen una mayor interacción entre ambas proteínas son la región N-terminal y la región rica en prolina, uno de los sitios más fosforilados (Niznski, 2017), así como una parte de la región de unión de microtúbulos. En la figura 2c se nota mejor como a pesar de tener un acomodo diferente y de que se encuentran más cerca, no llegan a tocarse entre sí, lo cual se puede apreciar de mejor forma en el vídeo obtenido de la simulación. Esto puede deberse a que la primera etapa del proceso de agregación, la fase de retraso, es el proceso que más tarda en concretarse; teniendo esto en cuenta, nos hace pensar que con un tiempo de simulación mayor podría verse dicha etapa finalizada, llegando a la agregación completa de ambas proteínas. Es importante recalcar que estas fotos son estáticas. Para una mejor apreciación del proceso de interacción se crearon películas a lo largo de la trayectoria de 75 ns. Gracias a estas películas, podemos tener una idea más clara y un mejor análisis visual de los cambios conformacionales y de orientación que experimentan ambas proteínas durante la simulación.

Los observables calculados y analizados para la fase de producción fueron 5: la raíz de la desviación cuadrática media (RMSD), la raíz de la fluctuación cuadrática media (RMSF), el radio de giro (Rg), la estructura secundaria y los puentes de hidrógeno. Este tipo de observables nos indican cambios en las propiedades termodinámicas y estructurales de ambas proteínas en el sistema.

#### **Raíz de la desviación cuadrática media**

Este observable es de los más utilizados cuando se quiere conocer la estabilidad del sistema mediante los cambios de posiciones de los átomos.

Figura 3 Cálculo de la raíz de la desviación cuadrática media.

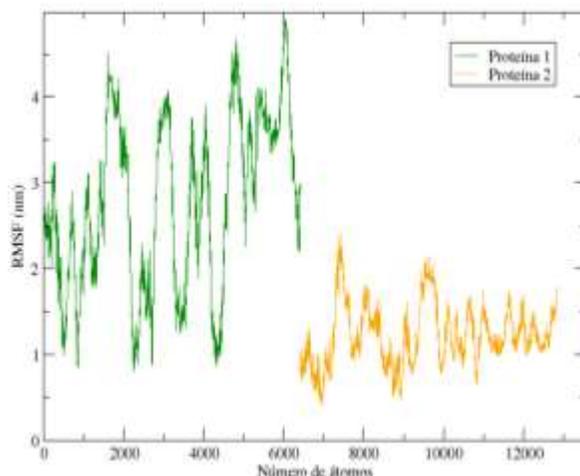


En la figura 3 tenemos dos curvas que representan al sistema de dos proteínas Tau. En color verde el RMSD de la proteína uno (ver tabla 1) y en color naranja el RMSD de la proteína 2 (ver tabla 1). Podemos ver que las curvas tienen un comportamiento bastante similar al sistema de una proteína, y el RMSD de cada proteína no llega a superar valores de 3 nm. Podemos ver que en los primeros 25 ns la proteína número 2 presenta un mayor cambio estructural que la proteína 1. Este cambio es más notorio en el RMSD de la proteína 2 y lo podemos corroborar con las fotos de la tabla número 6. En dicha tabla se observa que, en las primeras fotos, la proteína 2 cambia más significativamente su posición y la forma en que se encuentra compactada en comparación con la proteína 1. En los nanosegundos posteriores se observa que la proteína 1 pareciera tener valores más altos que la proteína 2, aunque sin variaciones muy grandes. Estos pequeños cambios los podemos asociar a la denominada fase de retraso, ya que no presentan cambios significativos.

#### Raíz de la fluctuación cuadrática media

Este observable nos ayuda a saber cómo se desplazan los átomos en comparación con la estructura promedio del sistema, es decir, se compara el cambio de posición de un átomo con la estructura inicial, en promedio con el número de átomos (Kleinjung, 2015).

Figura 4 Cálculo de la raíz de la fluctuación cuadrática media.

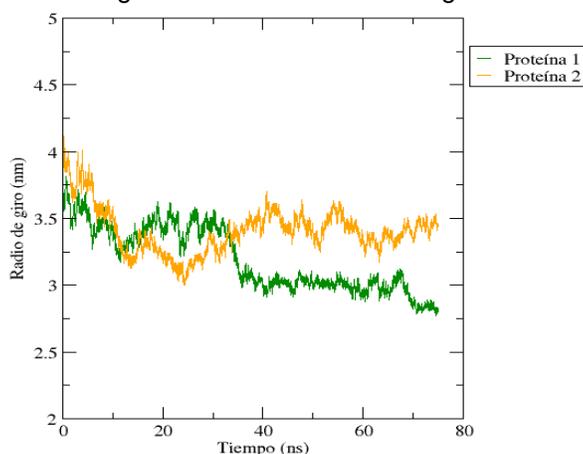


En la figura 4 tenemos el RMSF para el sistema de dos proteínas Tau durante 75 ns durante la fase de producción. El color verde representa a la proteína 1, mientras que el color naranja es la proteína 2. Observamos que, en este caso, las gráficas tienen un comienzo en el eje X distinto debido a que no se mide el tiempo como en otras gráficas, sino en el número del átomo. La proteína 1 va del átomo 1 al 6,414 y la proteína 2 va del átomo 6,415 al 12,828. Se observa que la proteína 1 tiene una mayor fluctuación en comparación con la proteína 2, lo cual concuerda con las gráficas del RMSD. La proteína 1 tiene su valor inicial en 2.5 nm y de ahí presenta valores que van desde los 0.75 nm hasta los 5 nm. Observamos que en la región N-terminal (átomos 1 al 2,091) y la región de unión de microtúbulos (átomos 3,417 al 5,305) son las regiones con mayor movilidad, así como la región C-terminal (átomos del 5,306 al 6,414), mientras que la región rica en prolina (átomos del 2,092 al 3,416) es la que se mantiene más estática con valores más bajos, lo cual concuerda con los resultados obtenidos en el trabajo de Castro, *et al.*, 2019. En cambio, la proteína 2 presenta fluctuaciones un poco menores, tiene su valor inicial en 1.2 nm aproximadamente y de ahí genera valores entre 0.5 y 2.5 nm, sin embargo, se mantiene estable alrededor de 1.5 nm. Observamos que cuando alcanza los valores más altos en esta gráfica están en la región N-terminal (átomos del 6415 al 8505) y en la parte final de la región rica en prolina (átomos del 8,506 al 9,830). Las regiones de unión de microtúbulos (átomos del 9831 al 11719) y la región C-terminal (átomos del 11,756 al 12,828) son las regiones más estables que presentan menos fluctuaciones.

### Radio de giro

El siguiente cálculo para ambos sistemas fue el radio de giro. Este observable nos indica como se pliega o se despliega una proteína. Su valor experimental es en promedio de 6.6 nm (Battisti *et al.*, 2012). A continuación, se presentan las gráficas obtenidas del radio de giro de la simulación del presente trabajo:

Figura 5 Cálculo del radio de giro.



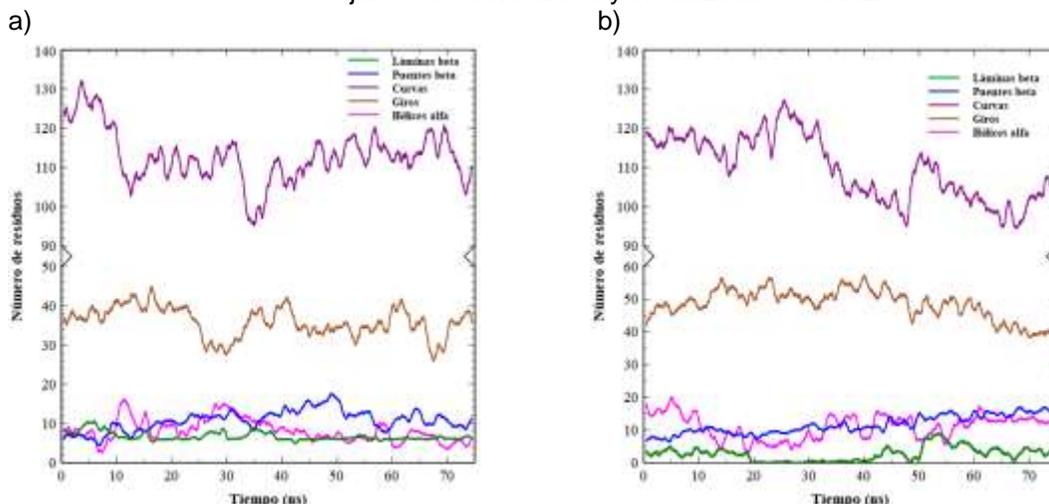
En la figura 5 tenemos las gráficas que representan el sistema de dos proteínas Tau durante 75 ns en la etapa de producción. Se puede apreciar que para el sistema de dos proteínas ambas tienen un valor de radio de giro menor al sistema de una sola proteína, esto debido a que el sistema de dos proteínas se encontraba más cerca del equilibrio. El color verde representa a la proteína 1 y el naranja a la proteína dos. El valor inicial de la proteína 1 es de aproximadamente de 3.51 nm y va reduciendo su valor a lo largo de la simulación hasta llegar a un valor cercano a 2.75 nm. Por otro lado, la proteína 2 tiene su valor inicial en 4.1 nm y al finalizar es de 3.5 nm. Con esto podemos ver que la proteína 1 presenta mayor compactación que la proteína 2; mostrándose estable alrededor de los 3.5 nm. Estos resultados concuerdan con los observables presentados con anterioridad del RMSD y el RMSF, en donde la proteína 1 presenta tanto mayor movilidad, fluctuación y compactación que la proteína 2. El valor inicial de ambas es más chico que la del sistema de una

sola proteína, esto se debe al procedimiento con el que se llevó a cabo, dónde se sometió la proteína al vacío, reduciendo así su radio de giro.

### Estructura Secundaria

El cálculo de la estructura secundaria se realizó con ayuda del programa DSSP en conjunto con GROMACS arrojando un archivo con extensión xvg. Se obtuvieron las tres gráficas que se muestran a continuación:

Figura 6 Cálculo de la estructura secundaria. A) Proteína 1 en el sistema de dos proteínas, b) proteína 2 en el sistema de dos proteínas durante 75 ns. Obtenida con el programa DSSP en conjunto con GROMACS y visualizada en veusz.

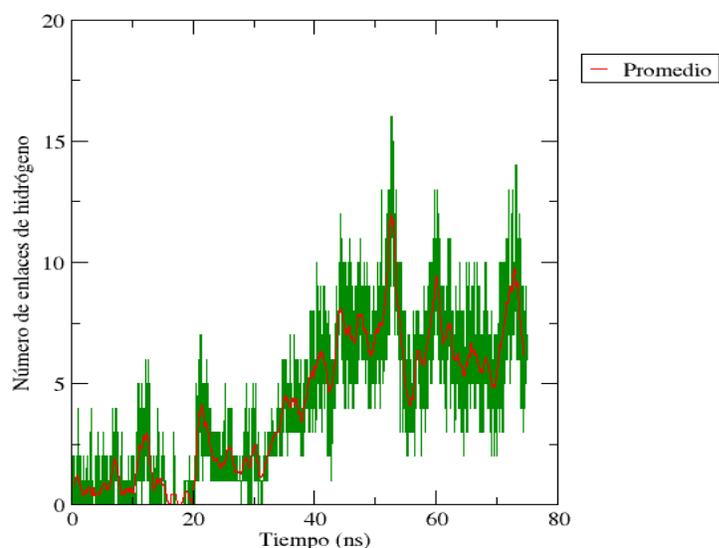


En la figura 6 podemos notar como se muestra gráficamente la estructura de la proteína, dónde en su mayoría se presentan giros y curvas. No obstante, se observa que tanto en la gráfica del sistema de una proteína como para las gráficas del sistema de dos proteínas en los primeros residuos (entre el 1 al 20) se encuentran los fragmentos de estructuras secundarias como las hélices o las láminas beta. Estos residuos corresponden a la región N-terminal y al dominio de proyección. También si lo relacionamos con el RMSF vemos que esta sección es la que más movilidad presenta.

### Puentes de hidrógeno

Se obtuvieron las siguientes gráficas con GROMACS, donde nos indica el número de puentes de hidrógeno respecto al tiempo de simulación. Se calcularon el número de puentes de hidrógeno entre las proteínas:

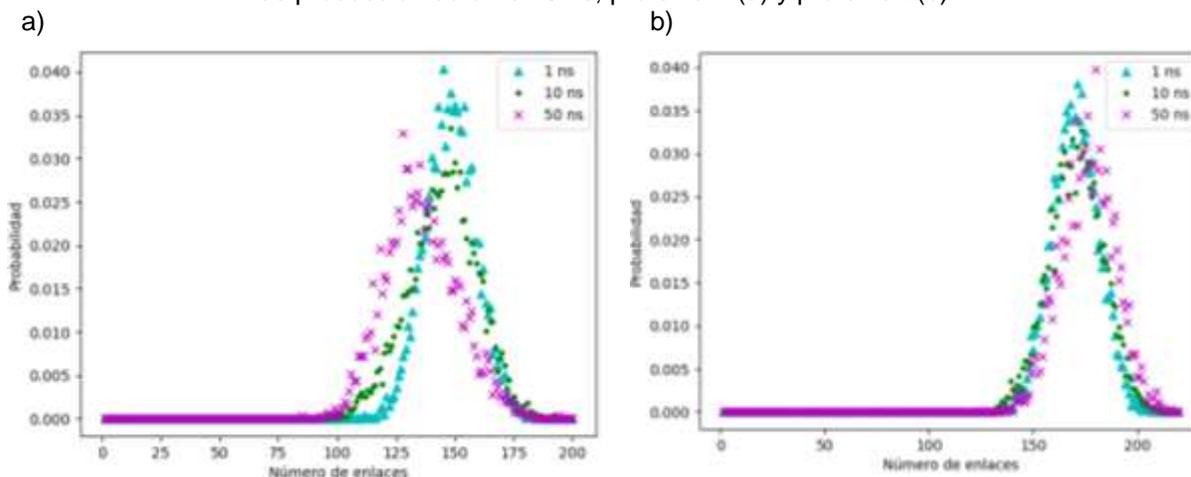
Figura 7 Cálculo del número de puentes de hidrógeno. Puentes de hidrógeno formados entre las dos proteínas Tau durante 75 ns.



En la figura 7 tenemos la gráfica que hace alusión a los puentes de hidrógeno formados entre la proteína 1 y la proteína 2 durante los 75 ns. Se puede ver que en los primeros nanosegundos de la simulación el sistema aún no se encuentra equilibrado. A partir de los 45 ns aproximadamente el sistema se empieza a estabilizar. Los valores en esta gráfica fluctúan en un rango de 2 a 18 puentes, con un promedio cercano a los 7 puentes aproximadamente. Esto quiere decir que, entre las dos proteínas hay una interacción, durante la etapa de producción, de aproximadamente 7 puentes; los cuales se forman y rompen durante este período. El punto más alto fue durante en el nanosegundo 45 aproximadamente, y la segunda incidencia (segundo pico) al finalizar la simulación.

Finalmente, para complementar el estudio de la formación y rompimiento de puentes de hidrógeno se calculó la distribución de probabilidad. Se escribió un código propio en el lenguaje de programación Python, tomando como datos de entrada el archivo xvg creado por GROMACS. Las distribuciones de probabilidad obtenidas se muestran en la figura:

Figura 8 Distribución de probabilidad del número de puentes. Sistema de dos proteínas en la etapa de producción durante 75 ns, proteína 1 (a) y proteína 2(b).



Las diferentes líneas representan las probabilidades de encontrar puentes de hidrógeno calculadas en tres tiempos consecutivos, usando la trayectoria del primer 1 ns, los siguientes 10 ns y los últimos 50 ns.

Para una mejor visualización, se separaron las distribuciones de probabilidad del sistema de dos proteínas, la figura 8a corresponde a la proteína 1 y la figura 8b de la proteína 2. El promedio de puentes de hidrógeno a lo largo de la simulación para la proteína 1 fue de 148, mientras que, para la proteína 2 fue de 170. Esto concuerda con lo discutido previamente. La proteína 2 contiene en promedio un mayor número de puentes de hidrógeno en comparación con la proteína 1. Para la proteína 1 en el primer ns el número con más probabilidad de aparición de puentes se ubica alrededor de los 148, para 10 ns 150 puentes de hidrógeno y para 50 ns poco menos de 125 puentes. En esta gráfica podemos ver que las curvas de 1 ns y 10 ns se encuentran alineadas, pero en la curva de 50 ns existe un corrimiento hacia la derecha y con una amplitud más ancha que las otras dos. Esto nos hace pensar que es debido a rompimientos de puentes de hidrógeno, disminuyendo la probabilidad de encontrar en ese tiempo. Si lo analizamos en conjunto con las gráficas del RMSF, RMSD y el radio de giro, así como con la gráfica de formación de puentes de hidrógeno con respecto al tiempo, concuerda con que la proteína 1 es la que presenta cambios más significativos en su estructura, por ello, el corrimiento más notorio en esta gráfica. Para la proteína 2, en 1 ns se tiene alrededor de 180 puentes de hidrógeno, para 10 ns 155-160, y para 50 ns entre 180 y 190. En estas curvas podemos observar que para 1 ns y 10 ns se encuentran alineadas y que la curva de 50 ns tiene un ligero corrimiento hacia la derecha, el cual no es tan notorio como el de la proteína 1. Con ello, podemos decir que la proteína 1 sufre mayores cambios estructurales en comparación con la proteína 2, lo cual se ha observado en todas las propiedades medidas a partir de la simulación.

## CONCLUSIONES

El estudio de proteínas intrínsecamente desordenadas es un gran reto actualmente y el uso de metodologías como la dinámica molecular es una gran ayuda para hacerlo, como es el caso de la proteína Tau. Una de las características que distingue este trabajo de otros, es el uso del campo de fuerza CHARMM36m recientemente propuesto para proteínas intrínsecamente desordenadas (Huang *et al.*, 2017). Es importante notar que para obtener mejores resultados con este campo de fuerzas se desarrolló un nuevo modelo de agua, el mTIP3P (Huang *et al.*, 2017). Con esta combinación se realizaron las simulaciones para el presente proyecto. Sin embargo, hay que destacar que este campo de fuerza es muy reciente y ha dado muy buenos resultados para proteínas pequeñas, siendo necesario realizar una mayor cantidad de estudios con proteínas de

gran tamaño. Hay que considerar de igual forma que existen muy pocos campos de fuerza adaptados o que se consideren óptimos para el análisis de proteínas intrínsecamente desordenadas (Robustelli, Piana y Shaw, 2018).

Respecto a la simulación de dos proteínas podemos observar que se relaciona lo que vemos en las imágenes de la trayectoria y los observables obtenidos con respecto a la estabilidad estructural, en donde la proteína 1 tiene mayor movilidad y un cambio más notable en comparación con la proteína 2, la cual parece ser atraída por la primera. De estas imágenes podemos deducir que las zonas que tienden a acercarse son la región rica en prolina de la proteína 1 con la región N-terminal de la proteína 2.

La fase de retraso es la etapa más lenta en el proceso de amiloidogénesis. Es aquí donde se presentan las primeras interacciones entre las dos proteínas para posteriormente dar lugar a la formación de aglomerados. Con la experiencia adquirida en este trabajo, una continuación o extensión natural es rotar u orientar a las proteínas en el espacio, de tal forma que se facilite la interacción y con ello se favorezca el proceso de agregación. Con esto esperamos que el proceso sea mucho más rápido ahorrando tiempo computacional.

Otra ruta que valdría la pena explorar, dado que el proceso de agregación es un evento muy lento sería introducir un solvente implícito en el sistema, esto disminuiría el tamaño del sistema, reduciendo el número de interacciones a calcular, propiciando que la simulación sea más rápida. El principal problema con esta ruta de trabajo, es que al igual que los campos de fuerzas con solvente explícito, los campos de fuerzas para solventes implícitos no son tan robustos y los existentes en la literatura necesitan ponerse a prueba de manera más exhaustiva, principalmente para proteínas grandes. Otra posible ruta sería utilizar un campo de fuerzas de tipo "coarse-grain", que, aunque no nos daría tanto detalle, nos permitiría abarcar una escala de tiempo mayor, pudiendo ver el fenómeno de agregación.

Otra cuestión importante a implementar en un trabajo posterior es re-crear las condiciones fisiológicas que se encuentran en el cerebro. La idea detrás de esto es crear un ambiente análogo a lo que realmente sucede alrededor de las proteínas Tau. Se espera que el incluir la presencia de iones que simulen el fluido cerebral las simulaciones sean una representación más fiel a la realidad y que los resultados obtenidos sean más exactos a lo que realmente ocurre. Además de incluir las sustancias que favorecen la agregación, como el ácido araquidónico.

## BIBLIOGRAFÍA

1. Battisti, A., Ciasca, G., Grottesi, A. y Tenenbaum, A. (2017). Thermal compaction of the intrinsically disordered protein Tau: entropic, structural and hydrophobic factors. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 19, 8435-8446.
2. Battisti, A., Ciasca, G., Grottesi, A., Bianconi, A. y Tenenbaum, A. (2012). Temporary secondary structures in Tau, an intrinsically disordered protein. *Taylor & Francis*, 38(7):525-533.
3. Benítez, J., Gonzalez-Neira, A., Malats, N., Osorio, A., Robledo, M., Rodríguez, S. y Urioste, M. (2020). Glosario de genética. *Instituto Roche*. <https://www.instituto Roche.es/recursos/glosario/isoformas#:~:text=Isoformas%20%2D%20Isoforms,exones%2C%20resultando%20en%20distintas%20prote%C3%ADnas>.
4. Braun, E., Gilmer J., Mayes H., Mobley D., Monore J., Prasad S. & Zuckerman D. (2018). Best Practices for Foundations in Molecular Simulations. *Living Journal of Computational Molecular Science*. 1(1), 1-28.
5. Castro, T. G., Munteanu, F. D. y Cavaco-Paulo, A. (2019). Electrostatics of Tau Protein by Molecular Dynamics. *Multidisciplinary Digital Publishing Institute*, 9(116):1-13.
6. Fundación Alzheimer España. (2015). El problema de diagnosticar Alzheimer. <http://www.alzfae.org/component/k2/item/152-problema-diagnostico-alzheimer>
7. García-Sierra, F., Mondragón-Rodríguez, S. y Basurto-Islas, G. (2008). Truncation of tau protein and its pathological significance in Alzheimer's disease. *J Alzheimers Dis*, 14(4):401-9. doi: 10.3233/jad-2008-14407. PMID: 18688090.

8. Gasset, M. y Westaway, D. (2000). Los priones y su biología. *Sociedad Valenciana de Neurología*. <https://www.svneurologia.org/congreso/priones-1.html>
9. González, J.M. (Sin fecha) Estructura secundaria de las proteínas. *Curso de biomoléculas*. <http://www.ehu.eus/biomoleculas/proteinas/prot42.htm>
10. Gra, S., Padrón, N., Libre J. J. (2002). Péptido beta amiloide, proteína Tau y enfermedad de Alzheimer. *Invest Biomed*, 21(4):253-259.
11. GROMACS (Nº de versión 2019.3). (2019). Linux. Groninga, Países Bajos: Universidad de Groninga.
12. GROMACS development team. (2018). gmx do\_dssp. *GROMACS 2018*. [https://manual.gromacs.org/archive/5.0/programs/gmx-do\\_dssp.html](https://manual.gromacs.org/archive/5.0/programs/gmx-do_dssp.html)
13. GROMACS development team. (2018). gmx hbond. *GROMACS 2018*. <http://manual.gromacs.org/documentation/2018/onlinehelp/gmx-hbond.html>
14. GROMACS. (2014). gmx do\_dssp. [http://manual.gromacs.org/archive/5.0/programs/gmx-do\\_dssp.html](http://manual.gromacs.org/archive/5.0/programs/gmx-do_dssp.html)
15. GROMACS development team. (2018). gmx rmsf. *GROMACS 2018*. <http://manual.gromacs.org/documentation/2018/onlinehelp/gmx-rmsf.html>
16. Herrup, K. (2010). Re-imagining Alzheimer's disease – an age-bases hypothesis. *J Neurosci*, 30(50), 1-8.
17. Huang, J., Rauscher, S., Nawrocki, G., Ran, T., Feig, M., de Groot, B. L., Grubmüller, H. y Mackerell, A. D. (2017). CHARMM36m: An Improved Force Field for Folded and Intrinsically Disordered Proteins. *Health and Human Services - Public Access*, 14(1): 71-73.
18. Kleinjung, J. (2015). Automatic Identification of Mobile and Rigid Substructures in Molecular Dynamics Simulations and Fractional Structural Fluctuation Analysis. *PLoS One*, 10(3).
19. Kostal, J. (2016). Chapter Four – Computational Chemistry in Predictive Toxicology: status quo et quo vadis? *Elsevier*, 10. 139-186. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-804700-2.00004-0>
20. Kulkarni, P. y Uversky, V. N. (2019). Intrinsically Disordered Proteins in Chronic Diseases. *Multidisciplinary Digital Publishing Institute*, 9(147):1.6.
21. Lobanov, M. Y., Bohatyreva, N. S. y Galzitskata, O.V. (2008). Radius of gyration as an indicator of protein structure compactness. *Molecular Biology*, 45:623-628.
22. McKee T. y McKee J.R. (2014). *Bioquímica de las bases moleculares de la vida*. McGraw-Hill/Interamericana de México.
23. McMurry, J., (2008). *Química Orgánica*. Cengage Learning.
24. Mendenhall, W., Beaver, R. y Beaver, B. (2010). *Introducción a la probabilidad y estadística*. Cengage Learning.
25. Mondragón-Rodríguez, S., Basurto-Islas, G., Binder, LI. Y García-Sierra, F. (2008). Conformational changes and cleavage; are these responsible for the tau aggregation in Alzheimer's disease? *Future Medicine*, 4(1). doi: <https://doi.org/10.2217/14796708.4.1.39>
26. Mondragón-Rodríguez, S., Basurto-Islas, G., Santa-Maria, I., Mena, R., Binder, LI., Avila, J., Smith, MA., Perry, G. y García-Sierra, F. (2008). Cleavage and conformational changes of tau protein follow phosphorylation during Alzheimer's disease. *Int J Exp Pathol*; 89(2):81-90. doi: 10.1111/j.1365-2613.2007.00568.x. PMID: 18336525; PMCID: PMC2525766.
27. Morgenstern, N. A. (2011). *Efectos del envejecimiento y le neurodegeneración sobre la plasticidad neuronal en el hipocampo* (Tesis doctoral). Universidad de Buenos Aires.
28. Morgenstern, N. A. (2011). *Efectos del envejecimiento y le neurodegeneración sobre la plasticidad neuronal en el hipocampo* (Tesis doctoral). Universidad de Buenos Aires.
29. Nizynski, B., Dzwolak, W. y Nieznanski, K. (2017). Amyloidogenesis of Tau protein. *The protein society*. <https://doi.org/10.1002/pro.3275>
30. Olivares, A.L. (2019). *Estudio de los efectos terminos y de campo eléctrico en proteínas mediante simulación computacional atómica*. (Tesis de pregrado). Instituto Tecnológico Superior de Xalapa.
31. Pérez-Porto, J. y Gardey, A. (2016). Definición de variable aleatoria. *Definición.de*. <https://definicion.de/variable-aleatoria/>

32. VMD (Nº de versión 1.9.3). (2019). Linux. Illinois, Estados Unidos: Universidad de Illinois.
33. xmgrace (Nº de versión 5.1.22). (2019). Linux. Loughborough, Leicestershire, Reino Unido: Paul Turner, Universidad de Loughborough.
34. Zhao, Y. y Zeng, C. (2015). Molecular Dynamics Simulation Reveals Insights into the Mechanism of Unfolding by the A130T/V Mutations within the MID1 Zinc-Binding Bbox1 Domain. *PLoS One*. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0124377>

## ANÁLISIS DE NUEVA FÍSICA EN UNA TEORÍA DE PARTÍCULAS CON CAMPOS MENSAJEROS LIGEROS OCULTOS.

M. del Rocío Aparicio Méndez, A. Cordero-Cid.

Facultad de Ciencias de la Electrónica, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Apdo. Postal 542, C.P. 72570, Puebla, Pue., México.  
E-mail: [adriana.cordero@correo.buap.mx](mailto:adriana.cordero@correo.buap.mx).

### RESUMEN

Se analiza una teoría de campos, conocida como Portal Effective Theory (PETs)<sup>1</sup>, en la cual se considera el Modelo Estándar (SM de sus siglas en inglés) más una extensión que incluye un nuevo grupo de partículas que se identifican como partículas mensajeras, y cuya finalidad es relacionar a las partículas del SM, con campos más pesados y no visibles a la escala de rompimiento espontáneo de la simetría electrodébil. Con esta idea, analizamos el sector escalar de dicho modelo, e identificamos la estructura general de interacciones escalares con violación de CP.

### INTRODUCCIÓN

El Modelo Estándar<sup>2</sup>, es una teoría cuántica de campos, que da una descripción correcta de un proceso de colisión entre partículas elementales, tal como ocurre en los actuales aceleradores de altas energías. Con el SM se describen las interacciones fuerte, débil y electromagnética entre las partículas que constituyen la materia, los fermiones, y bosones de norma, los mediadores de las fuerzas. También se considera la existencia de una partícula escalar, llamada bosón de Higgs<sup>3</sup>, la cual es necesaria para romper espontáneamente la simetría electrodébil y así generar el espectro de masas sin destruir la renormalizabilidad de la teoría. Los sectores de Higgs y de Yukawa son piezas importantes del modelo, no solo por dar información de gran importancia para la consistencia matemática de la teoría sino también por ser sectores que pueden constituir fuentes importantes de violación de algunas simetrías discretas, tales como la paridad (P) y la conjugación de carga (C). Cabe mencionar que el modelo viola maximalmente P y C en el sector fermiónico. Sin embargo, ambas simetrías son conservadas separadamente en el sector bosónico. Por otro lado, la operación CP, que es una combinación de la conjugación de carga y paridad, es conservada totalmente en los sectores leptónico y bosónico, pero no así en el sector de quarks, donde puede aparecer una fuente explícita de violación de esta simetría. Kobayashi y Maskawa en 1973, señalaron que la violación de CP se produciría automáticamente en el modelo si hubiera al menos seis sabores de quarks, Tal mecanismo de violación de CP tiene su origen en el sector de Yukawa de los quarks y resulta de la necesidad de realizar una rotación de estos campos con el objetivo de definir correctamente las masas de los mismos. La violación de CP aparece como una fase de la matriz relacionada con la rotación de las tres familias de quarks, conocida con el nombre de matriz de Kobayashi-Maskawa<sup>4</sup> (KM). Cabe mencionar que esta matriz da lugar a que ocurran los efectos de corrientes cargadas, mediadas por el bosón W, que cambian el sabor en el sector de quarks. Este fenómeno de interacciones a nivel de árbol entre dos quarks de diferentes familias y el bosón de norma W constituyen predicciones muy finas del modelo y son objeto de escrutinio experimental. Tal efecto no está presente en el sector de leptones, lo cual se debe a la ausencia de neutrinos derechos en el SM o, dicho de otra forma, a que los neutrinos no tienen masa en dicho modelo. Debido a que el SM contiene solo un doblete de Higgs, el efecto de la rotación de KM se cancela completamente en las interacciones de los bosones Z, fotón y el Higgs con los quarks y, por lo tanto, no se presenta el efecto de corrientes neutras que cambien sabor a nivel de árbol, mediadas por un Z, un fotón o un bosón de Higgs Sin embargo, este efecto se puede presentar a orden de un rizo en teoría de perturbaciones. Vale la pena mencionar que debido a que en el SM los neutrinos no tienen masa y también a que solo existe un doblete de Higgs, los efectos de corrientes neutras con cambio de sabor no se presentan a ningún orden de teoría de perturbaciones en el sector leptónico.

Como ya lo hemos mencionado, en el Modelo Estándar, la violación de CP se observa solo en el sector de quark, y podemos decir que todas las mediciones experimentales han sido consistentes con que ésta es la única fuente de violación de CP en el SM. Sin embargo, la búsqueda de física más allá del SM, ha llevado a explorar otros datos que pueden estar relacionados con una fuente de violación de CP, como la asimetría bariónica del universo, que se relaciona con el hecho de que existe más materia que anti-materia. Dicha asimetría, según Sakharov, se puede producir dinámicamente solo si se cumplen tres condiciones:

1. Las interacciones tienen que violar el número bariónico.
2. Las interacciones tienen que violar la conjugación de carga (C) y la combinación de la conjugación de carga con la paridad (CP).
3. Y que el universo tuvo una etapa en la que estaba fuera de equilibrio térmico.

Con estas ideas se analiza la posibilidad de detectar nueva física en la búsqueda de violación de CP a energías más altas que las del SM, lo que implica proponer una teoría de norma que se ajuste a un rango de energías más alto, lo que se conoce como una Extensión del Modelo Estándar. De tal modo, se propone la existencia de nuevos campos que podrían implicar efectos de nueva física a escalas de energías más altas. Existen varias extensiones del SM, entre las que destacan modelos con un sector escalar que comprende dos o tres dobletes de higgs y en algunos casos solo singletes, también existen modelos con un espectro fermiónico más amplio, etc. Por ejemplo, teorías que contienen al SM como un límite de bajas energías, requieren para su formulación de un creciente número de escalares. Un hecho importante es que toda extensión en el sector escalar del Modelo Estándar predice la existencia de escalares cargados. En principio, podemos así decir que existen dos formas de ampliar el número de escalares en el modelo, una de ellas consiste en introducir representaciones adicionales de escalares bajo el grupo de norma electrodébil. La otra resulta de una extensión del grupo de simetría electrodébil, lo cual, necesariamente, conduce a la proliferación de escalares físicos. La extensión más sencilla, no trivial bajo el grupo SU(2), corresponde a la formulada con dos dobletes de escalares. Esta extensión del Modelo Estándar debe su importancia a la incidencia que tiene en la construcción de una teoría supersimétrica a bajas energías y también a que corresponde a la forma más sencilla de introducir un escalar físico cargado. En el caso supersimétrico, la teoría que resulta es el llamado Modelo Estándar Supersimétrico<sup>5</sup> el cual contiene, además de las partículas ordinarias, las partículas supersimétricas. La supersimetría introduce algunas restricciones entre los parámetros de la teoría, dando como consecuencia algunas restricciones entre los parámetros de la teoría, y relaciones entre las masas de los escalares y los bosones de norma débiles. Podemos mencionar que esto no ocurre en el modelo general de dos dobletes, donde la invariancia de norma y renormalizabilidad son, en principio, las únicas restricciones que deben satisfacer las diversas interacciones entre los campos.

En este trabajo nos enfocamos en el estudio de un modelo basado en una teoría efectiva y conocido como Portal Effective Theory, la cual se caracteriza por incluir campos llamados mediadores y los cuales interactúan tanto con partículas del SM como con nuevos campos pesados ocultos. La versión del modelo que analizamos es tal que la partícula mediadora se considera como un bosón complejo de espín cero. Con el fin de buscar violación de CP en el sector escalar, proponemos que los acoplamientos con el doblete de Higgs sean complejos.

## RESULTADOS

En este trabajo se presenta el análisis del sector escalar de una PETs<sup>1</sup>, donde existen nuevos campos mensajeros que se entienden como partículas que interactúan por separado con campos físicos del Modelo Estándar y campos ocultos.

El Lagrangiano del modelo PETs, se propone de forma general como:

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{SM} + \mathcal{L}_{portal} + \mathcal{L}_{oculto}, \quad (1)$$

donde  $\mathcal{L}_{SM}$ , contiene la información de las interacciones de los campos del Modelo Estándar,  $\mathcal{L}_{portal}$ , contiene los operadores que describen las interacciones los campos mensajeros con el espectro de partículas del SM y los nuevos campos pesados, es decir, campos que interactúan por separado con partículas del SM, así como con los nuevos campos pesados ocultos. Por último, tenemos el  $\mathcal{L}_{oculto}$ , que contiene la información de las interacciones de los campos pesados ocultos.

Los campos mensajeros pueden considerarse con espín igual a 0,  $\frac{1}{2}$  y 1. De tal forma, podemos caracterizar el comportamiento de estos campos como el de partículas tipo escalares reales o complejos, si tienen espín 0; si son campos de espín  $\frac{1}{2}$  pueden ser fermiones de Weyl, Majorana o Dirac. Por último, campos mensajeros de espín 1 pueden ser del tipo campo vectoriales o axial-vector. Nosotros trabajamos con campos mediadores escalares, los cuales, con el fin de plantear el caso más general, pueden ser propuestos como escalares complejos, los cuales se acoplan de igual forma que un escalar real a los campos del SM. Así, suponemos a la partícula mediadora o mensajera como un escalar complejo, con la siguiente estructura:

$$s_a = (s_1 + i s_2) / \sqrt{2} \quad (2).$$

En general, el campo mensajero se puede acoplar al bosón de Higgs, partículas del sector de Yukawa así como campos de norma. En la siguiente tabla presentamos el listado de operadores de hasta dimensión 5, con campos del SM y partículas mensajeras,  $s_i$ , de espín 0:

Higgs	Yukawa + h.c.	Gauge Bosons
$s_{ij} H ^2$	$s_{i q_a} \bar{u}_b H^\dagger$	$s_i G_{\mu\nu}^a G_a^{\mu\nu}$
$s_{ij} H ^2$	$s_{i q_a} \bar{d}_b H^\dagger$	$s_i W_{\mu\nu}^a W_a^{\mu\nu}$
$s_i s_j s_k  H ^2$	$s_i l_a \bar{e}_b H^\dagger$	$s_i B_{\mu\nu} B^{\mu\nu}$
$s_i D^\mu H^\dagger D_\mu H$		$s_i G_{\mu\nu}^a \tilde{t}(G)_a^{\mu\nu}$
$s_i  H ^4$		$s_i W_{\mu\nu}^a \tilde{t}(W)_a^{\mu\nu}$
		$s_i B_{\mu\nu} \tilde{t}(B)^{\mu\nu}$

Así una teoría completa, considerando solo un campo escalar mensajero, incluiría todos los operadores que se muestran en la tabla, pudiendo analizar de esta manera todos los acoplamientos entre la partícula mensajera,  $s_i$ , y las partículas del Modelo Estándar. Sin embargo, en este trabajo, nos enfocamos en el sector escalar, de modo que solo estudiamos los acoplamientos entre el bosón de Higgs y el campo mensajero, definido como un escalar complejo.

El análisis realizado nos permite estudiar violación de CP<sup>6</sup>, tópicos de nuestro interés en la búsqueda de nueva física<sup>7</sup>. Con esta última idea, analizamos las interacciones en el sector de escalar, induciendo violación de CP en ciertos acoplamientos entre el bosón de Higgs del Modelo Estándar y la partícula mensajera.

Como se ha mencionado, estudiamos los acoplamientos del bosón de Higgs,  $h$ , con los campos mensajeros ligeros,  $s_i$ , los cuales planteamos con la siguiente estructura:

$$c_i s_i |H|^2, c_{ij} s_i s_j |H|^2, c_{ijk} s_i s_j s_k |H|^2, c_i s_i D^\mu H^\dagger D_\mu H, s_i |H|^4, \quad (3)$$

donde  $H$  es el doblete de Higgs, y las  $c_i, c_{ij}, c_{ijk}$ , representan los parámetros de acoplamiento. Por medio de los parámetros del tipo  $c_{ij}$ , de los términos de la forma  $c_{ij} s_i s_j |H|^2$ , se puede introducir la violación explícita de CP. Así al considerar los parámetros antes mencionados como complejos, se pueden generar los posibles efectos de violación de CP.

En un caso general, consideramos dos tipos de escalares mensajeros  $s_a$  y  $s_b$ , los cuales proponemos como campos complejos, de la forma:

$$s_a = (s_1 + i s_2) / \sqrt{2} \quad (4)$$

$$s_b = (s_3 + i s_4) / \sqrt{2} \quad (5),$$

donde hemos considerado dos tipos de escalares mensajeros con el fin es estudiar acoplamientos del tipo:

$$c_{ij} s_i s_j |H|^2, \quad (6)$$

considerando el caso más simple de  $i=j$ , o el caso más general donde  $i$  es diferente de  $j$ . Es decir, suponiendo acoplamiento entre dos escalares mensajeros iguales y un bosón de Higgs, o suponiendo interacciones entre dos escalares mensajeros diferentes y un bosón de Higgs.

Analizando el Lagrangiano y mediante el uso del programa LanHep determinamos la forma de los acoplamientos escalares del tipo  $s_i s_j h$ , para los cuales tenemos coeficientes dados como

$$4m_W s_w c_k / e, \quad (7)$$

donde  $m_W$  es la masa del bosón  $W$ ,  $s_w$  el seno del ángulo de Weinberg,  $e=1/128$ , y  $c_k$ , cambia según los escalares mensajeros considerados. Así podemos observar que el análisis de posibles decaimientos del bosón de Higgs a un par de escalares mensajeros es directamente proporcional a los parámetros  $c_{ij}$ , los cuales al ser complejos pueden inducir violación de CP.

## CONCLUSIONES

Con la teoría propuesta, PETs, se propone la existencia de nuevos campos físicos que se clasifican como mediadores o mensajeros y ocultos. Los primeros interactúan directamente con las partículas del SM y por tanto el análisis de estas interacciones puede dar indicios de nueva física. En este trabajo, particularmente se considera un modelo con mediadores escalares complejos, y se analiza únicamente el sector escalar donde se tendrían indicios de nueva física. Con el fin de estudiar los efectos de violación de CP en el sector escalar, los parámetros de acoplamiento entre dos escalares y un bosón de Higgs, se consideran complejos. Como parte del análisis, mediante el uso del programa LanHep, determinamos la forma de los acoplamientos del modelo, poniendo especial atención en los acoplamientos escalares del tipo  $s_i s_j h$ , donde se ha inducido una violación explícita de CP. Dado lo anterior podemos concluir que la importancia de este tipo de estudio, radica en que la detección de este tipo de acoplamientos representan un claro indicio de física más allá del Modelo Estándar.

## BIBLIOGRAFÍA

1. C. Arina, J. Hajer, P. Klose, "Portal Effective Theories: A framework for the model independent description of light hidden sector interactions" arXiv:2105.06477.
2. S. Weinberg, Phys. Rev. Lett. 19, 1264(1967); A. Salam, in "Elementary Particle Theory", ed. N. Svartholm (Almqvist and Wiksell, Stockholm, 1968).
3. J. Goldstone, A. Salam, S. Weinberg, Phys. Rev. 127, 965(1965) ; P.W. Higgs, Phys. Lett. 12, 132 (1964); P. W. Higgs, Phys. Rev. 145, 1156 (1966); J. Goldstone, Nuovo Cimento 19, 154 (1961); S. Weinberg, Phys. Rev. D7, 1068 (1973).
4. M. Kobayashi, K. Maskawa, Prog, Theor, Phys. 49,282 (1972).
5. P. Fayec, Nucl. Phys., B90, 104 (1975).
6. A. Cordero-Cid, J. Hernández-Sánchez, V. Keus, S. Moretti, D. Rojas-Ciofalo, D. Sokolowska, "Collider signatures of dark CP-violation". Phys. Rev. D. 101 (2020) 9, 095023.

7. J. Beacham et al., "Physics Beyond Colliders at CERN: Beyond the Standard Model Working Group Report". *J. Phys. G.* 47.1 (2020) p. 010501.

Agradecimiento: SNI-CONACyT, PRODEP-SEP y VIEP-BUAP.

## EFFECTO DE CAOS ELECTROMAGNÉTICO EN UNA GUÍA DE ONDAS METÁLICA DE CRISTAL FOTÓNICO

Karla Ivonne Serrano Arévalo, Gabriel Arroyo Correa, Hugo Alva Medrano y Héctor Pérez Aguilar

Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo

[kiserranoa@gmail.com](mailto:kiserranoa@gmail.com)

### RESUMEN

El estudio del comportamiento de la luz revela características y efectos al interactuar con la materia, ya que permite desarrollar algunas teorías sobre su naturaleza. En los últimos años se han hecho diversos estudios teóricos y numéricos acerca de cómo controlar las propiedades electromagnéticas de los materiales y el comportamiento de la luz a través de estos. Por ello, se tiene interés en diseñar materiales que sean capaces de controlar la propagación de ondas electromagnéticas con una longitud de onda específica, que controle las direcciones de propagación de ondas en el espacio; o bien, que permitan atrapar o localizar dichas ondas en una determinada región del espacio. Es por esto, que la tecnología nanofotónica se plantea como una candidata seria para resolver los problemas mencionados [1], ya que es un campo de investigación muy interesante para la comunidad científica debido a sus numerosas aplicaciones, como son: la espectroscopía, aplicaciones de sensado y bio-sensado o el desarrollo de un chip todo óptico, entre otras. De igual manera se ha investigado la presencia del caos en el transporte clásico a través de guías de ondas, mostrando un comportamiento diferente para la resistividad cuando el sistema es regular o caótico [2]. Teniendo esto en cuenta, en nuestro trabajo consideramos un sistema electromagnético compuesto por dos superficies planas conductoras y un arreglo periódico de inclusiones cilíndricas circulares de conductor real que forman una guía de ondas de cristal fotónico (PCW). Este sistema periódico tiene una estructura de bandas dada por una relación de dispersión que nos permite caracterizar los modos normales del sistema. Sin embargo, una PCW realista tiene siempre una longitud finita y para ello consideramos un número de periodos suficiente que representan la PCW conductora. Para abordar este problema, se usó una técnica numérica conocida como el Método de la Ecuación Integral, que permite obtener un sistema de ecuaciones integrales acopladas donde se puede obtener la respuesta óptica del sistema de estudio. Los resultados obtenidos muestran un patrón de la intensidad del campo desordenado que mediante el cálculo de algunas propiedades estadísticas; en particular, la función de autocorrelación y la longitud de correlación permitieron caracterizar el fenómeno del caos electromagnético en una PCW. Por otro lado, se analizó el caso clásico correspondiente y se realizó un comparativo equivalente con el caso electromagnético (patrones de la intensidad del campo desordenados). Una de las posibles aplicaciones de los resultados obtenidos es que se pueden aplicar, como ocurre en los esquemas tradicionales de sincronización de caos y diseñar configuraciones específicas para encriptar información [3].

### INTRODUCCIÓN

En los últimos años se han realizado estudios teóricos con respecto al estudio de los materiales y su respuesta ante la incidencia de luz, esto ha revolucionado la tecnología y generado muchos aportes al conocimiento. Con el descubrimiento de las numerosas aplicaciones de la nanofotónica, aparecen retos como la mejora de la eficiencia en el guiado de la luz sobre una guía de silicio o el radiado de ésta mediante el uso de nano-antenas [4]. Por consiguiente, la comunidad científica ha incursionado en la tarea de desarrollar nuevas e innovadoras tecnologías basadas en este enfoque particular, en un intento por consolidar con éxito una aplicación de desarrollo esencialmente fotónico.

Los dispositivos fotónicos ofrecen ciertas ventajas frente a los electrónicos. Principalmente, mayor velocidad de operación, derivada de la naturaleza intrínseca de los portadores (fotones frente a los electrones) y de los procesos involucrados en su funcionamiento (respuesta óptica frente a la

electrónica de los materiales) que conllevan a una menor disipación. Es por ello, que se tiene interés en saber que tipo de materiales nos permiten la manipulación de las propiedades ópticas; por lo que se darán las características de algunos materiales cuyas propiedades ópticas como electromagnéticas podamos controlar. Dentro de este tipo de materiales, tenemos a los cristales que se caracterizan por poseer una periodicidad perfecta en su estructura atómica y debido a ésta, presentan un potencial periódico para la propagación de electrones a través de estos. Por esta característica también se determina la mayor parte de las propiedades conductivas de dichos materiales [5].

Debido al reciente avance nanotecnológico, la aplicación práctica de los llamados cristales fotónicos (CFs) [6] ha tenido un gran interés científico en lo concerniente a la capacidad y la velocidad de la información que puede ser procesada en un determinado lapso de tiempo. Los CFs son arreglos periódicos de una, dos o tres dimensiones de diferentes materiales con una celda unitaria de la dimensión del orden de la longitud de onda como se aprecia en la Fig. 1. Los cuales son materiales en los que existe una modulación periódica y ordenada de la constante dieléctrica (o índice de refracción) y presentan bajas pérdidas por absorción.

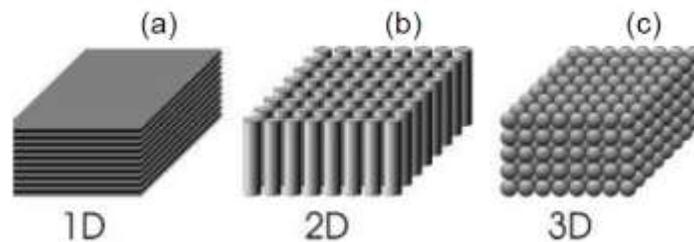


Figura 1: Ejemplos de una estructura fotónica (a) unidimensional, (b) bidimensional y (c) tridimensional.

Esta característica les confiere interesantes propiedades en regiones concretas del espectro electromagnético delimitadas por la periodicidad de la estructura y origina la existencia de gaps (es decir, bandas prohibidas) en determinadas zonas del espectro en las cuales se prohíbe la propagación de ondas con determinada frecuencia, definiendo así sus propiedades para la propagación de la luz [7]. Debido a que presentan estas características, recientemente han sido objeto de investigación los CFs, ya que tienen el potencial de desarrollar una nueva tecnología de circuitos ópticos integrados [8].

### Dinámica no lineal y caos

La dinámica es la ciencia que estudia la variación en el tiempo de diferentes magnitudes, es decir su movimiento. Básicamente existen tres tipos de movimientos: los estacionarios y de equilibrio; los periódicos y cuasi periódicos; y los caóticos, siendo este último en los que la predicción del movimiento en un tiempo lo suficientemente grande es casi imposible [9]. La palabra caos y el adjetivo caótico se usan para describir un sistema que aparentemente tiene un comportamiento irregular y que es sensible a pequeños cambios en sus condiciones iniciales. Un claro ejemplo de esto es el llamado efecto mariposa, que es tal vez la analogía más divulgada para dar a entender que en sistemas dinámicos caóticos las pequeñas variaciones en las condiciones iniciales pueden conducir a resultados inesperados.

En la naturaleza, los sistemas de ecuaciones lineales idealizados son poco comunes, esto se debe a que el comportamiento de las soluciones suele ser impredecibles, complejas y no cumplen el principio de superposición; es decir, son no lineales y muchas veces son caóticos. Los sistemas caóticos regularmente no tienen una solución exacta y en estos casos se recurre a métodos numéricos con lo que se puede hacer una aproximación a, sin perder las soluciones propias del sistema.

### Billar plano con inclusión circular

Muchos ejemplos interesantes de sistemas dinámicos de problemas dentro de la mecánica clásica, cuántica, estadística, acústica y óptica (especialmente aquellos en que la interacción entre partículas involucra colisiones elásticas) pueden ser reducidos a sistemas de billares. El hablar de sistemas de billares significará hablar de partículas puntuales moviéndose sobre alguna región (la "mesa de billar") que puede o no contener obstáculos convexos suaves y sufriendo colisiones elásticas contra ellos.

El sistema clásico análogo al presentado en este proyecto de tesis consta de un sistema de billar periódico con un obstáculo circular en el medio como se muestra en la Fig. 2. Si consideramos fotones como las partículas emitidas por un láser ideal que incide sobre el billar periódico de la Fig. 2, descartamos el concepto de elasticidad para choques elásticos, por una reflexión que tiene lugar sin pérdidas de energía. También se asume que las paredes reflectantes son conductores perfectos continuos en el sentido de la teoría electromagnética clásica [2].

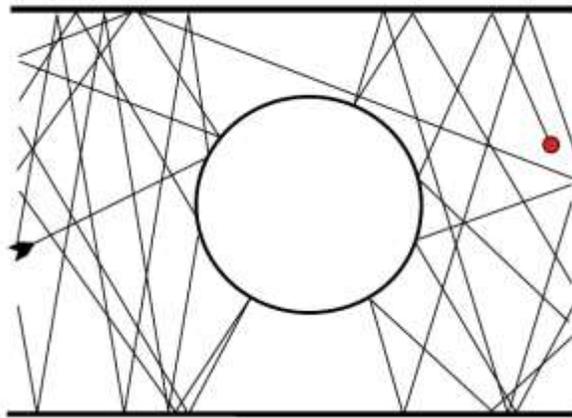


Figura 2: Diagrama de movimiento de fotones en un billar periódico con un obstáculo convexo.

En este sentido las trayectorias de los fotones pueden moverse de manera similar a bolas de billar en una mesa de billar con características similares a las planteadas en el sistema de la Fig. 2. Puesto que este tipo de sistemas es tema de interés, nuestro trabajo de investigación toma este arreglo del sistema para estudio y será desarrollado para un conductor real que es por ejemplo el metal.

El interés de este trabajo de manera general es realizar un estudio numérico sobre el comportamiento de los efectos caóticos en guías de ondas de cristal fotónicos (PCW) de tamaño infinito y finito. Estos sistemas están compuestos por superficies planas paralelas con un arreglo periódico de inclusiones cilíndricas circulares de conductor real. Para abordar este problema, se hará uso de una técnica numérica conocida como el Método de la Ecuación Integral, que permite obtener un sistema de ecuaciones integrales acopladas que involucran como incógnitas el campo y su derivada normal evaluados en las superficies involucradas. Al discretizar el sistema, se obtendrá un conjunto de ecuaciones algebraico homogéneo para el sistema infinito, cuya solución determinará la relación de dispersión y un sistema inhomogéneo de ecuaciones algebraicas para el sistema finito, donde, a partir de sus soluciones se puede obtener la respuesta óptica. Se calcularán algunas propiedades estadísticas de las intensidades obtenidas; en particular, la función de autocorrelación (ACF) y la longitud de correlación, que nos permitirán identificar el fenómeno de caos electromagnético. Por otro lado, se analizará el caso clásico correspondiente.

## TEORÍA

### Estudio del fenómeno del caos clásico para el sistema de Billares de Sinai

En los últimos años la investigación de sistemas caóticos ha sido de gran importancia en diferentes áreas de la ciencia y de la técnica [10]. En el caso de la física, los sistemas mecánicos (clásicos y cuánticos) de pocos grados de libertad han sido objeto de estudio, observándose en ellos propiedades y comportamientos dinámicos inesperados [11].

Al sistema dinámico que representa el movimiento de una partícula libre dentro de una región acotada del espacio, con reflexiones elásticas en las fronteras, se le conoce como un billar [12]. Las propiedades dinámicas de los billares están determinadas por la forma de la frontera y pueden variar desde los comportamientos totalmente regulares hasta los totalmente desordenados o caóticos, similares en muchos aspectos al de los sistemas de evolución aleatoria [13]. Los ejemplos mejor estudiados de esta última clase de sistemas son los billares de Sinai [14] y Bunimovich [15]. Particularmente, el billar de Sinai consiste en una partícula rebotando dentro de un cuadrado reflector con un dispersor circular central, igualmente reflector.

En este trabajo estudiamos, a la luz de la mecánica clásica, el billar de Sinai el cual es un sistema relativamente simple que presenta un comportamiento fuertemente caótico.

El sistema consiste en una partícula que se mueve en el plano dentro de un cuadrado (arista  $L$ ), en cuyo centro se coloca una inclusión circular (radio  $R$ ), tal como se muestra en la Fig. 3. Se supone que la partícula (masa  $m$ ) obedece las leyes de la mecánica clásica y sólo experimenta colisiones elásticas contra las paredes del cuadrado y contra el perímetro del obstáculo circular. Esto es, entre colisiones la partícula se mueve de manera libre siguiendo una trayectoria rectilínea.

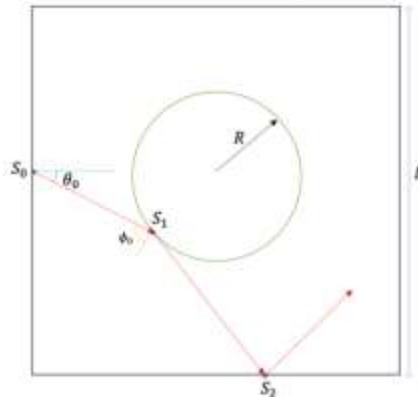


Figura 3: El biliar de Sinai está conformado por un cuadrado y una inclusión circular en su centro. La partícula se mueve clásicamente experimentando sólo colisiones elásticas.

Las colisiones de la partícula contra las paredes del cuadrado las enumeramos de manera consecutiva mediante el índice  $n$  que toma valores enteros,  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ . En cada colisión (digamos, la  $n$ ) se especifican dos variables, a saber: la posición del punto donde tiene lugar la colisión (variable  $S_n$ ) y el ángulo, la dirección del movimiento forma con la pared inmediatamente después de la colisión (ángulo  $\theta_n$ ). La posición  $S$ , la identificamos con la distancia a lo largo del perímetro medida a partir de la esquina inferior derecha del cuadrado.

En el instante de tiempo inicial la partícula está en el estado  $(S_0, \theta_0)$ , esto es, la partícula experimenta una colisión con la pared derecha en el punto  $S_0$  y emerge de la colisión formando un ángulo  $\theta_0$ , tal como se muestra en la Fig. 3. Conociendo  $(S_0, \theta_0)$ , queremos predecir el estado  $(S_1, \theta_1)$ , que corresponde a la siguiente colisión de la partícula contra una pared del cuadrado o posiblemente contra el objeto circular, la existencia de una colisión entre la partícula y el disco

central depende de los valores  $(S_0, \theta_0)$ , y del radio  $R$  del disco. Una vez determinado  $(S_1, \theta_1)$ , queremos en la siguiente etapa predecir el estado  $(S_2, \theta_2)$ , y así sucesivamente [16].

Para realizar este análisis hicimos uso del programa desarrollado por Lansel y Porter [17] para simular la dinámica de billares clásicos. La ventaja de este programa, escrito en Matlab, es que presenta una interfaz gráfica sumamente flexible para el análisis y postprocesamiento de los datos. Este módulo está destinado para ser utilizado como herramienta de investigación. En la actualidad, el programa simula de manera eficiente tablas que se construyen completamente a partir de segmentos de línea y arcos elípticos.

El programa se ejecuta iterativamente en su simulación de billar clásico. Dada la posición y la dirección de la colisión anterior, el programa calcula la posición y dirección de la partícula puntual después de su posterior colisión con el límite. Para encontrar la ubicación de la próxima colisión, el programa busca una intersección entre la línea que describe la ruta de la partícula puntual y cada una de colisiones contra las paredes del cuadro. Dadas todas estas intersecciones, el punto con la distancia mínima recorrida es el siguiente punto de intersección. Para encontrar la dirección en la que viaja la partícula puntual después de la colisión, el ángulo normal al límite se calcula a partir de las derivadas de las ecuaciones de la tabla en el punto de intersección. La suma y resta de ángulos se usa para calcular el ángulo de salida del ángulo normal y el ángulo de entrada:

$$\theta_n = 2\arctan\left(\frac{dy}{dt} / \frac{dx}{dt}\right)\Bigg|_{t_n} - \theta_{n-1}, \quad (1)$$

$$\phi_n = \arctan\left(\frac{dy}{dt} / \frac{dx}{dt}\right)\Bigg|_{t_n} - \theta_{n-1} + \pi/2, \quad (2)$$

donde  $\theta_n$  representa el ángulo con respecto a la horizontal de la  $n$ -ésima iteración,  $\phi_n$  representa el ángulo incidente de la  $n$ -ésima iteración,  $y(t)$  y  $x(t)$  son las ecuaciones paramétricas de la frontera del billar, y  $t_n$  es el valor de  $t$  que da la ubicación de la  $n$ -ésima intersección con la frontera.

### Estudio del fenómeno electromagnético en una guía de ondas metálica de cristal fotónico Propagación de la luz a través de la materia

En nuestro estudio de la propagación de la luz a través de la materia nos ocuparemos únicamente en los medios no magnéticos y eléctricamente neutros. Por tanto,  $M$  y  $\rho$  se toman igual a cero. Así, las ecuaciones de Maxwell, se reducen a:

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}, \quad (3)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} + \mathbf{J}, \quad (4)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = -\frac{1}{\epsilon_0} \nabla \cdot \mathbf{P}, \quad (5)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{H} = 0. \quad (6)$$

Tomando el rotacional de la Ec. (3) y la derivada respecto al tiempo de la Ec. (5) para eliminar  $\mathbf{H}$ , obtenemos la ecuación de onda para el campo eléctrico,

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = -\mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{P}}{\partial t^2} - \mu_0 \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t}. \quad (7)$$

Los términos del lado derecho de la ecuación anterior se llaman términos fuente. Se derivan de la presencia de las cargas de polarización y de conducción, respectivamente, dentro del medio. La manera en la que la propagación de la luz se ve afectada por los términos fuentes está incluida. En caso de tratarse de medios no conductores el término es de importancia, ya que conduce a una explicación de muchos efectos ópticos como: la dispersión, la doble refracción, por mencionar algunos. En el caso de los metales, el término de conducción  $-\mu_0 \partial \mathbf{J} / \partial t$  es el importante. Las soluciones resultantes de la ecuación de onda explican la gran opacidad y alta reflectancia de los

metales. Es por esto que consideraremos el caso de interacción de la luz con los medios conductores metálicos utilizando el Modelo de Drude.

**El Modelo de Drude**

Las características esenciales de los metales se pueden describir teóricamente con el Modelo de Drude [18]. En este modelo, existe una frecuencia crítica llamada frecuencia de plasma, por debajo de la cual la permitividad eléctrica es negativa y en consecuencia la propagación de ondas electromagnéticas está prohibida. Por encima de la frecuencia de plasma la permitividad es positiva, el medio es transparente y permite la propagación de ondas electromagnéticas.

En el caso general tenemos que el índice de refracción de un medio conductor real (metálico) es

$$n^2 = - \left[ \frac{\omega_p}{\omega^2 + i\omega\gamma} \right], \tag{8}$$

donde  $\omega_p = \sqrt{\frac{Ne^2}{me_0}}$  es la frecuencia de plasma.

Considerando que  $\epsilon(\omega) = n^2(\omega)$ , tenemos que la función dieléctrica para medios conductores está dada por

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_R(\omega) + i\epsilon_I(\omega) = n(\omega)^2 = \left( 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \gamma^2} \right) + i \left( \frac{\omega_p^2}{\omega^3 + \omega\gamma^2} \right).$$

Observamos que ya no es constante ya que depende de la frecuencia de la radiación que se utiliza para iluminar el material.

A continuación, se presenta una descripción del método de la ecuación integral, el cual nos permite calcular los modos electromagnéticos y la respuesta óptica (reflectancia y transmitancia) correspondiente a una guía de ondas de cristal fotónico, tanto de tamaño infinito como finito.

**Descripción del Método de la Ecuación Integral**

La descripción del siguiente método integral fue tomada de la Ref. [19]. Como el objetivo de este proyecto de trabajo es estudiar una PCW que contiene un conducto real en la inclusión de una celda cuadrada (ver Fig. 4) se hará una descripción general del método; sin embargo, cabe mencionar que el método se puede aplicar también a medios dieléctricos. Posteriormente, se tomará en cuenta las consideraciones para la propagación de ondas a través de la PCW finita como se muestra en la Fig. 5.

El sistema de estudio está formado por dos superficies planas infinitas y un arreglo periódicamente perfecto de inclusiones cilíndricas circulares, cuyo eje de simetría va a lo largo del eje z, como se muestra en la Fig. 4. Se considera que tiene un periodo P en los perfiles planos, una separación entre las placas de la guía dada por b y las inclusiones cilíndricas circulares de radio r, el cual puede estar en términos de la fracción de llenado f.

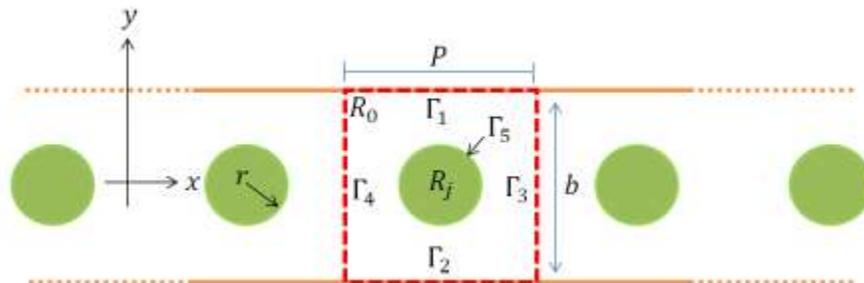


Figura 4: Diagrama de una guía de ondas infinita con inclusiones cilíndricas. Las líneas punteadas en rojo delimitan la región de la celda unitaria.

Asumiendo una dependencia armónica del tiempo  $e^{-i\omega t}$  para los campos electromagnéticos, la ecuación de onda es transformada en la ecuación de Helmholtz:

$$\nabla^2 \Psi_j(\mathbf{r}) + k^2 \Psi_j(\mathbf{r}) = 0, \quad (9)$$

donde  $j$  indica el  $j$ -ésimo medio,  $\mathbf{r}$  es el vector de posición del punto de observación y  $\Psi_j(\mathbf{r})$  representa el campo eléctrico o magnético. La magnitud del vector es  $k_j = n_j(\omega) \frac{\omega}{c}$ . La región 0 caracterizada por el índice de refracción real  $n_0(\omega) = \sqrt{\varepsilon_0(\omega)}$  y la región de la inclusión por  $n_j(\omega) = \pm \sqrt{\mu_j(\omega) \varepsilon_j(\omega)}$  el índice de refracción que involucra las propiedades de los materiales que se dan en términos de la permeabilidad magnética  $\mu(\omega)$  y de la permitividad eléctrica  $\varepsilon(\omega)$ . El signo que aparece en la expresión del índice de refracción debe ser tomado positivo para un conductor real. Para resolver la Ec. (9) consideramos una función de Green  $G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  como la solución de la ecuación

$$\nabla^2 G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + k_j^2 G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 4\pi \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (10)$$

donde  $G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  representa el propagador del campo debido a una fuente de luz puntual que emite a la frecuencia  $\omega$  en la posición  $\mathbf{r}'$  y correspondiente a cada medio. La  $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  es la delta de Dirac. Una función de Green que es solución de la Ec. (10) está dada por

$$G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = i\pi H_0^{(1)}(k_j |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|), \quad (11)$$

siendo  $H_0^{(1)}(z)$  la función de Hankel de primera clase y de orden cero. Esta función de Green para el vacío satisface una condición de radiación, mientras que para el interior del  $j$ -ésimo cuerpo satisface una condición de absorción.

Aplicando el segundo teorema integral de Green a las funciones  $\Psi_j(\mathbf{r})$  y  $G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  para cada región correspondiente al  $j$ -ésimo medio, obtenemos

$$\frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_j} \left[ G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_j(\mathbf{r}')}{\partial n'} - \Psi_j(\mathbf{r}') \frac{\partial G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \right] ds' = \Psi_j(\mathbf{r}) \theta(\mathbf{r}), \quad (12)$$

donde  $\theta(\mathbf{r}')$  es la función escalón,

$$\theta(\mathbf{r}') = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{r}' \in S_j, \\ 0 & \text{si } \mathbf{r}' \notin S_j, \end{cases}$$

siendo  $S_j$  una superficie cerrada que está limitada por el contorno cerrado  $\Gamma_j$  correspondiente.

Como el objetivo es calcular los modos electromagnéticos de bandas para una estructura fotónica infinita que tiene un arreglo periódico de inclusiones de algún material dispersivo, consideramos una celda unitaria cuadrada y una inclusión con geometría arbitraria como se muestra en la Fig. 4. La celda está formada por la región 0 que está limitada por los contornos  $C_1 = \Gamma_1 + \Gamma_2 + \Gamma_3 + \Gamma_4 + \Gamma_5$  y por la región interior de la inclusión. Los vectores normales correspondientes a los contornos  $\Gamma_j$  son  $\hat{\mathbf{n}}_1, \hat{\mathbf{n}}_2, \hat{\mathbf{n}}_3, \hat{\mathbf{n}}_4$  y  $\hat{\mathbf{n}}_5$ , hacia afuera de cada región, respectivamente. De la Ec. (9) vamos a llamar

$$I_G(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \oint_{C_j} G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_j(\mathbf{r}')}{\partial n'} ds', \quad (14)$$

$$I_\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \oint_{C_j} \Psi_j(\mathbf{r}') \frac{\partial G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} ds'. \quad (15)$$

Correspondientemente a cada una de las regiones de la celda unitaria, dividimos los contornos en pequeños segmentos de longitud de arco  $\Delta s$  suficientemente pequeños para poder realizar un muestreo fino.

Así, podemos considerar que el campo y su derivada normal son aproximadamente constantes y los podemos sacar de la integral de la siguiente manera

$$I_G(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \sum_n \Phi_n^j \oint_{\substack{s_n - \Delta s/2 \\ s_n + \Delta s/2}}^{s_n + \Delta s/2} G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') ds', \quad (16)$$

$$I_\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \sum_n \Psi_n^j \oint_{s_n - \Delta s/2}^{s_n + \Delta s/2} \frac{\partial G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} ds'. \quad (17)$$

En las Ecs. (16) y (17) hemos definido las funciones

$$\Phi_n^j = \left. \frac{\partial \Psi_j(\mathbf{r}')}{\partial n'} \right|_{\mathbf{r}' = \mathbf{r}'_n}, \quad (18)$$

$$\Psi_n^j = \Psi_j(\mathbf{r}') \Big|_{\mathbf{r}' = \mathbf{r}'_n}. \quad (19)$$

Evaluando las integrales de las Ecs. (16) y (17) en el punto de observación  $\mathbf{r} = \mathbf{r}'_m$ , podemos definir los elementos de matriz como:

$$L_{mn} = \frac{1}{4\pi} \oint_{\substack{s_n - \Delta s/2 \\ s_n + \Delta s/2}}^{s_n + \Delta s/2} G_j(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}') ds', \quad (20)$$

$$N_{mn} = \frac{1}{4\pi} \oint_{s_n - \Delta s/2}^{s_n + \Delta s/2} \frac{\partial G_j(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}')}{\partial n'} ds', \quad (21)$$

donde el subíndice  $m$  indica el punto de observación y el subíndice  $n$  el punto de integración. Estos elementos de matriz (para más detalles de su deducción ver la Ref. [20], están dados por las expresiones:

$$L_{mn}^{(j)} = \frac{i\Delta s}{4} H_0^{(1)}(k_j R_{mn}) (1 - \delta_{mn}) + \left[ \frac{i\Delta s}{4} H_0^{(1)}\left(k_j \frac{\Delta s}{2e}\right) \right] \delta_{mn}, \quad (22)$$

$$N_{mn}^{(j)} = \frac{i\Delta s}{4} k_j H_1^{(1)}(k_j R_{mn}) \hat{\mathbf{n}}_n \cdot \frac{\mathbf{R}_{mn}}{R_{mn}} (1 - \delta_{mn}) + \left[ \frac{1}{2} + \frac{\Delta s}{4\pi} \hat{\mathbf{n}}_n \cdot \hat{\mathbf{t}}'_n \right] \delta_{mn}, \quad (23)$$

Siendo

$$\hat{\mathbf{n}}_n \cdot \mathbf{R}_{mn} = -y'(s)(x_m - x_n) + x'(s)(y_m - y_n),$$

$$\hat{\mathbf{n}}_n \cdot \hat{\mathbf{t}}'_n = x'(s)y''(s) - y'(s)x''(s),$$

$$R_{mn} = \sqrt{(x_m - x_n)^2 + (y_m - y_n)^2}.$$

Así, haciendo uso de las Ecs. (20) y (21) podemos reescribir las Ecs. (16) y (17) como:

$$\frac{1}{4\pi} \sum_n \Phi_n^j \oint_{\substack{s_n - \Delta s/2 \\ s_n + \Delta s/2}}^{s_n + \Delta s/2} G_j(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}') ds' \approx \sum_{n=-\infty}^{\infty} L_{mn}^j \Phi_n^j, \quad (24)$$

$$\frac{1}{4\pi} \sum_n \Psi_n^j \oint_{s_n - \Delta s/2}^{s_n + \Delta s/2} \frac{\partial G_j(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}')}{\partial n'} ds' \approx \sum_{n=-\infty}^{\infty} N_{mn}^j \Psi_n^j. \quad (25)$$

Sustituyendo las Ecs. (24) y (25) en las Ecs. (16) y (17) tenemos que

$$I_{G(r)} \approx \sum_{n=-\infty}^{\infty} L_{mn}^j \Phi_n^j, \tag{26}$$

$$I_{\Psi(r)} \approx \sum_{n=-\infty}^{\infty} N_{mn}^j \Psi_n^j. \tag{27}$$

Además, la periodicidad que tiene el sistema en la dirección horizontal es una condición de simetría que es especialmente considerada. Debido a esta propiedad y a la forma de la Ec. (7), el teorema de Bloch, establece una condición de periodicidad  $\Psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} \Psi(\mathbf{r})$  que se puede aplicar. Es

decir,  $\Psi(x - P, y) = \exp(-iK_x P) \Psi(x, y)$  por lo que las condiciones de periodicidad del campo en los contornos  $\Gamma_3$  y  $\Gamma_4$  son

$$\Psi_n^4 = \exp(iK_x P) \Psi_n^3 \quad \text{y} \quad \Phi_n^4 = -\exp(iK_x P) \Phi_n^3. \tag{28}$$

Además  $P$  y  $K$  son el periodo del sistema y la componente en  $x$  del vector de Bloch, respectivamente. Por otro lado, tenemos que las condiciones de frontera para los contornos  $\Gamma_1$  y  $\Gamma_2$  son:

$$\Psi^{(1)} = \Psi^{(2)} \quad \text{y} \quad \Phi^{(1)} = \frac{f_1}{f_2} \Phi^{(2)}, \tag{29}$$

donde

$$f_j = \begin{cases} \mu_j(\omega) & \text{para pol. TE,} \\ \varepsilon_j(\omega) & \text{para pol. TM,} \end{cases} \tag{30}$$

que en caso de tratarse de medios dieléctricos o metálicos  $\mu_1 \approx \mu_2 \approx \mu_0$ , pero de tratarse de un metamaterial la condición anterior no se cumple, es decir,  $\mu_1 \neq \mu_2$ . Con estas consideraciones encontramos un sistema lineal  $M(\omega) F(\omega) = 0$  que tiene una matriz representativa  $M$ , que depende de la frecuencia  $\omega$  y el vector de Bloch  $K$ , el cual modelará nuestro sistema de estudio. Dado que el sistema es homogéneo, una solución no trivial puede obtenerse si el determinante de tal matriz es cero. Para determinar la frecuencia  $\omega$ , definimos la función

$$D(K, \omega) = \ln |\det(M)|, \tag{31}$$

que numéricamente presenta puntos mínimos locales que nos darán la relación de dispersión numérica  $\omega = \omega(K)$ .

El método desarrollado anteriormente puede calcular la estructura de bandas asociada a una estructura fotónica infinita. Sin embargo, en la realidad, una estructura fotónica tiene un tamaño finito (ver Fig. 5), por lo que vamos a estudiar la respuesta óptica del sistema mediante este método integral.

Para esto consideraremos el problema de una estructura fotónica finita que se ilumina con un campo incidente que puede ser una onda plana o un haz Gaussiano. El sistema formado se considera como un sistema de  $M$  cuerpos como se ve en la Fig. 5.



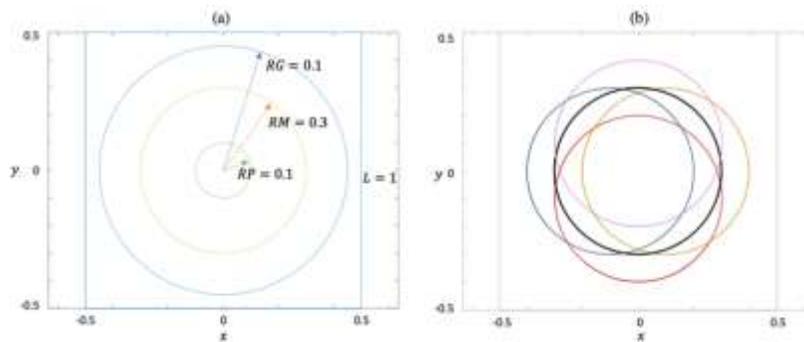


Figura 6: (a) Espacio de configuración para los radios  $RP$ ,  $RM$  y  $RG$  de la inclusión circular. (b) Desplazamientos grandes para  $RM$ .

Por otro lado, para cada caso consideramos tres rayos incidentes, de tal manera que cada uno de nuestros rayos colisione contra la inclusión circular (en una primera iteración) dentro del segundo cuadrante del plano en una parte baja ( $RI1$ ), en una parte media ( $RI2$ ) y en una parte alta ( $RI3$ ) de la misma (como se puede observar en la Fig. 7).

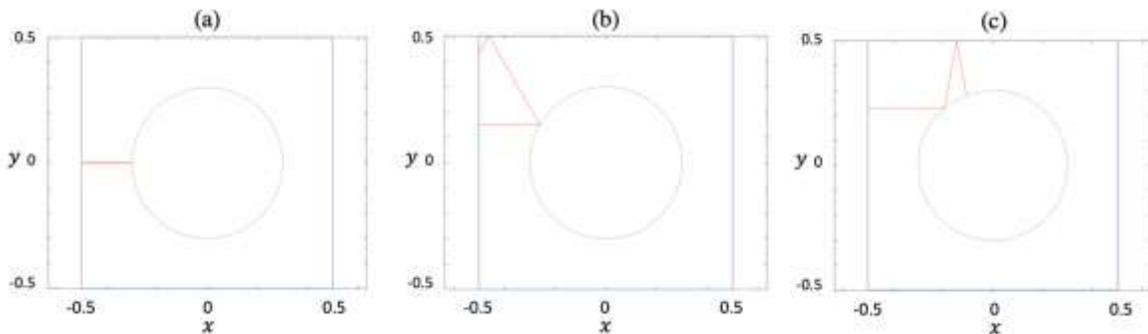


Figura 7: Espacio de configuración para  $RM$  con 2 iteraciones para: (a)  $RI1$ , (b)  $RI2$  y (c)  $RI3$ .

Para nuestro análisis se hizo una combinación con los radios de la inclusión ( $RP$ ,  $RM$  y  $RG$ ) y con cada uno de los rayos  $RI2$  y  $RI3$ , pues se observó que  $RI1$  no representa un caso importante de estudio para nuestro problema. Para nuestro estudio numérico se consideraron dos mil iteraciones en para cada caso. A su vez en cada caso se estudiaron también los desplazamientos  $DG$  y  $DP$  en todas las direcciones como se muestra en la siguiente tabla:

Número	Desplazamiento	Nomenclatura	Centro de la inclusión
1	$DP$ - Arriba	DPA	(0,0.01)
2	$DG$ - Arriba	DGA	(0,0.1)
3	$DP$ - Abajo	DPB	(0,-0.01)
4	$DG$ - Abajo	DGB	(0,-0.1)
5	Origen	C	(0,0)
6	$DP$ - Derecha	DPD	(0.01,0)
7	$DG$ - Derecha	DGD	(0.1,0)
8	$DP$ - Izquierda	DPI	(-0.01,0)
9	$DG$ - Izquierda	DGI	(-0.1,0)
10	$DP$ - Diagonal (Cuadrante 1)	DPDC1	(0.01,0.01)
11	$DG$ - Diagonal (Cuadrante 1)	DGDC1	(0.1,0.1)
12	$DP$ - Diagonal (Cuadrante 3)	DPDC3	(-0.01,-0.01)
13	$DG$ - Diagonal (Cuadrante 3)	DGDC3	(-0.1,-0.1)

En la Fig. 8 se muestran dos de nuestros 78 casos analizados. En la Fig. 8 se muestra: (a) la configuración para el sistema de billares con inclusión circular  $RP$  y rayo de incidencia  $RI2$  y desplazamiento  $DGA$ , en (b) se muestra la configuración para el sistema de billares con inclusión

circular  $RG$  y rayo de incidencia  $RI3$  y desplazamiento sobre la diagonal en el tercer cuadrante DPDC3.

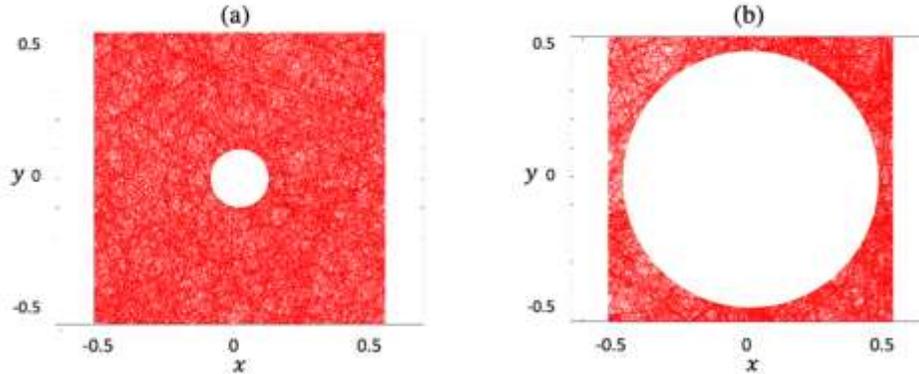


Figura 8: Espacio de configuración para: (a)  $RP$  con  $RI2$  – DGA y (b)  $RG$  con  $RI3$  – DPDC3.

Para nuestro problema es de suma importancia conocer dos parámetros importantes, los cuales son la entropía de la imagen ( $E_i$ ) y la intensidad media de la imagen ( $I_m$ ) de cada uno de nuestros sistemas. Para realizar el cálculo de estos dos parámetros hacemos uso del software Wolfram Mathematica, versión 12. La imagen que se toma es la trayectoria en el espacio de configuración que resulta después de 2000 iteraciones.

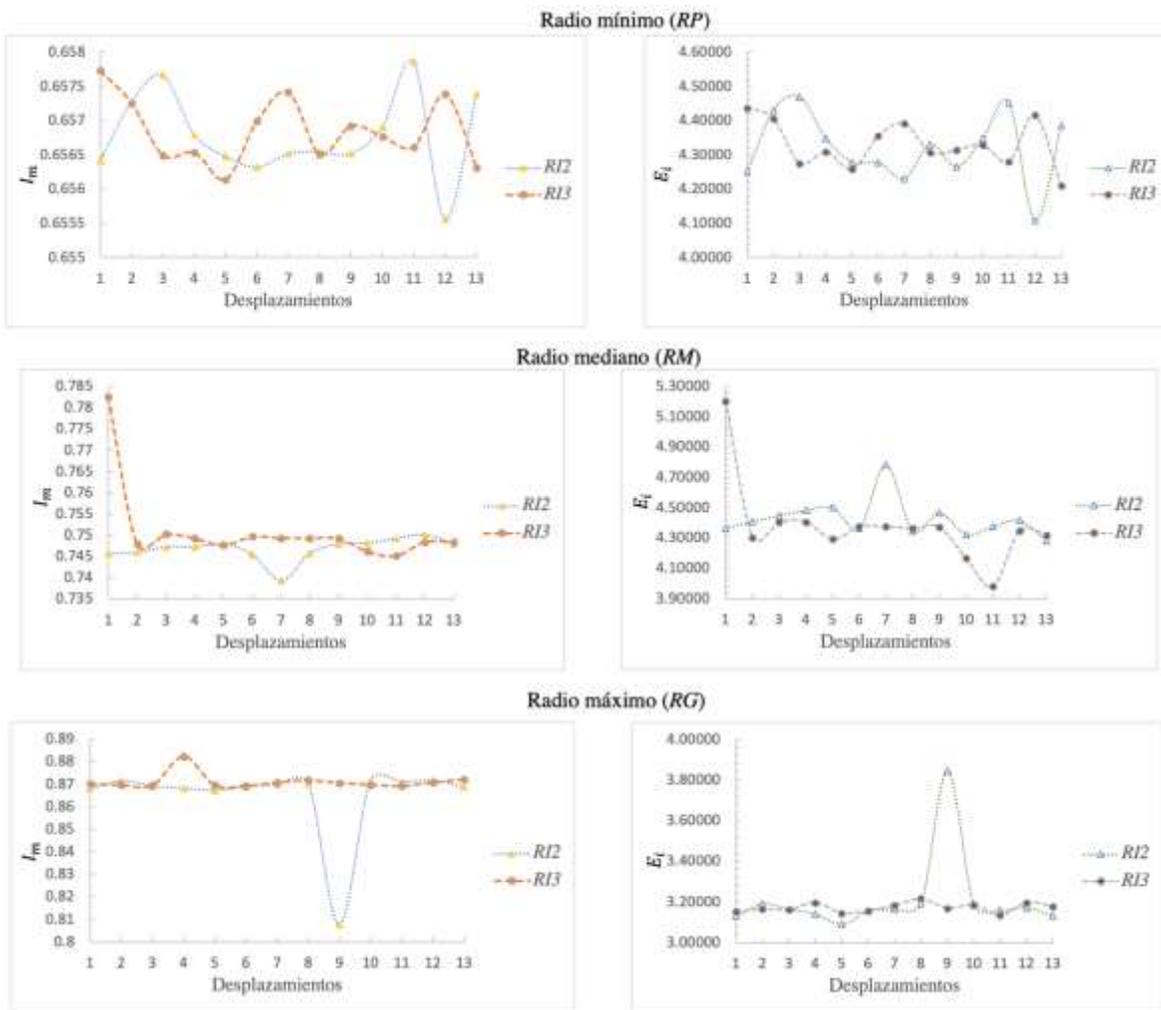
La entropía es una medida estadística de aleatoriedad que se puede utilizar para caracterizar la textura de la imagen de entrada. Para realizar el cálculo de esta medida este software pone nuestra imagen en píxeles y la convierte en tonos de grises, a cada píxel le asigna un valor referente al tono de gris (siendo 0 si el píxel es completamente negro y 1 si es completamente blanco), a esta asignación de valor se le llama valor de probabilidad. El total de píxeles que conforman nuestra imagen es equivalente al número de datos que tenemos. En general lo que hace el programa es aplicar la definición de entropía siguiente:

$$E_i = - \sum_k p_k \log_2(p_k), \quad (32)$$

en donde  $p_k$  es el valor de probabilidad asociada al nivel en la escala de grises.

De igual manera para la intensidad media de la imagen, lo que hace el software es tomar uno por uno cada píxel de la misma y analiza como esta conformado, una vez visto que el píxel esta conformado por varios tonos de grises toma un promedio y se le asigna un valor numérico al píxel, lo mismo para todos los de más y así obtener un promedio general para toda la imagen, por lo que los valores para la intensidad media están dados entre 0 y 1.

Una vez calculados los parámetros  $E_i$  e  $I_m$  se realizó el siguiente análisis: para cada uno de los radios se hizo un comparativo para  $RI2$  y  $RI3$  con los datos obtenidos para  $E_i$  e  $I_m$  y los resultados fueron los siguientes:



**Estudio del fenómeno electromagnético en una guía de ondas metálica de cristal fotónico  
Caso infinito**

En esta sección se muestran con los resultados del campo obtenido para un sistema de una PCW infinita con periodicidad  $P = 2\pi$  de inclusiones cilíndricas circulares de radio  $a = 0.3b$ , donde  $b = 1.5$  es la separación entre las placas (ver Fig. 4). Estas intensidades del campo para dos frecuencias reducidas  $\omega_r = 1.1429$  y  $\omega_r = 70.0676$  son mostradas en las Figs. 9 (a) y (c), respectivamente; las cuales serán comparadas con nuestros resultados del caso finito. Para ambos casos, se calcularon las correspondientes funciones de autocorrelación (ACFs) (Figs. 9 (b) y (d)) y sus longitudes de correlación definidas como la desviación estándar de la función de autocorrelación. Para la PCW infinita, por simplicidad se consideró el vector de Bloch reducido  $K_r = 0$  bajo la polarización TE.

Para la obtención de resultados confiables en el caso de frecuencias bajas y altas, es necesario utilizar intervalos de discretización pequeños. Para los cálculos del sistema infinito se utilizó  $\Delta s = (P/\omega_{nMax})/20$  para bajas frecuencias y  $\Delta s = (P/\omega_{Max})/10$  para frecuencias altas en la guía de ondas con inclusiones cilíndricas circulares de plata ( $n + ik = 0.051585 + i3.9046$ ).

Para la frecuencia más baja, la longitud de correlación obtenida es  $l_c = 0.54624$  y para la frecuencia más alta se obtiene una menor de  $l_c = 0.10879$ . En especial para la frecuencia más alta

se puede apreciar en la Fig. 9(c) que muestra una distribución de los patrones del campo con mayor desorden; además por el criterio que se tiene cuando la longitud de correlación tiende a cero da indicios del fenómeno de caos electromagnético.

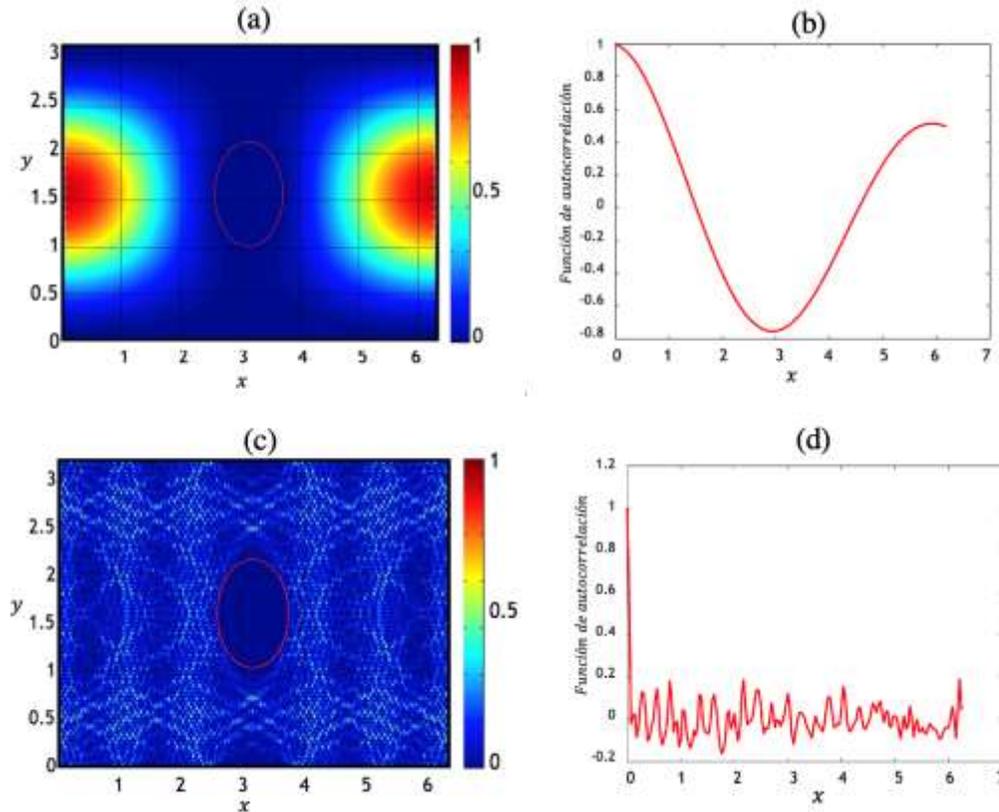


Figura 9: Intensidades del campo para una PCW infinita con inclusiones cilíndricas de plata para la frecuencia reducida (a)  $\omega_r=1.1419$  con su ACF en (b) y (d)  $\omega_r=70.0676$  con su ACF en (d).

### Caso finito

En los resultados anteriores, asumimos una PCW de longitud infinita; sin embargo, las guías de ondas que podemos analizar experimentalmente son de longitud finita. Por consiguiente, vamos a ver si el patrón del campo desordenado de la PCW ideal (longitud infinita) aparece en el caso de una PCW de longitud finita. Para ello, vamos a considerar una PCW con 3 inclusiones cilíndricas circulares iluminadas con un haz incidente con polarización TE a incidencia normal. El sistema está formado por dos bloques de conductor real que forman la guía de ondas con separación entre las placas de  $b = \pi$ , espesor  $l = 13.42$  y longitud  $d = 6\pi$ , con inclusiones cilíndricas de radio  $a=0.56$  (ver Fig. 5).

Como ejemplo para las frecuencias reducidas  $\omega_r = 2.9246$  y  $\omega_r = 3.1212$ , las intensidades de campo obtenidas se muestran en las Figs. 10 (a) y (c). Las curvas de las ACFs de las Figs. 10 (b) y (d) fueron obtenidas con la región superior de la celda debido a la simetría de la PCW. Además, las longitudes de autocorrelación fueron  $l_c = 0.4485$  para la frecuencia menor y para la frecuencia mayor de  $l_c = 42539$ .

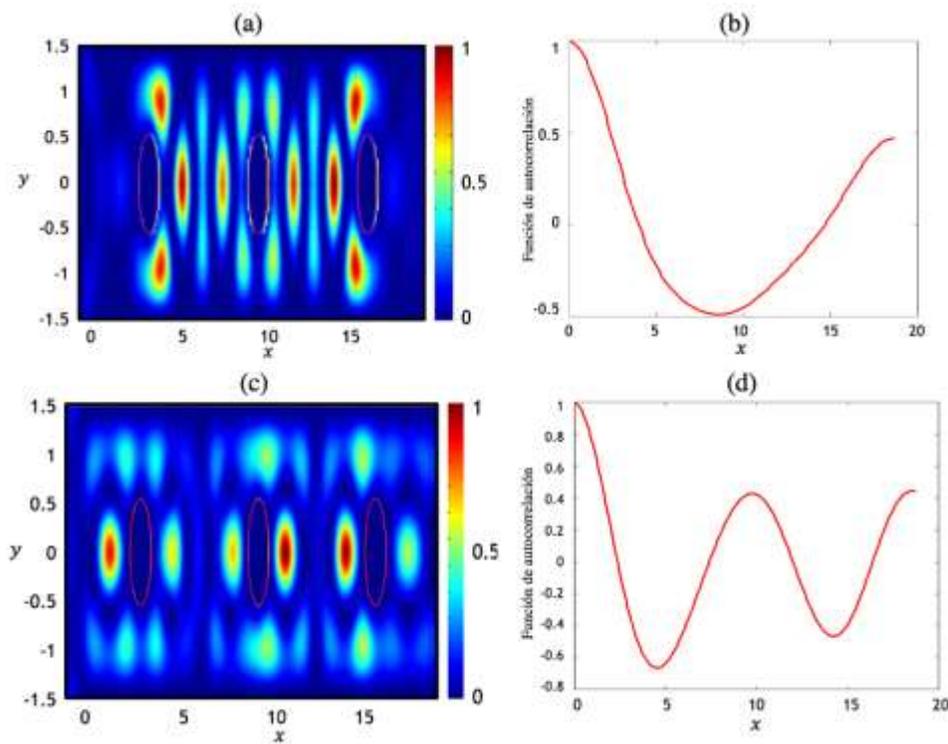


Figura10: Intensidades del campo para una PCW finita con 3 inclusiones cilíndricas de metal para frecuencias reducidas (a)  $\omega_r = 2.9246$  con su ACF en (b) y (c)  $\omega_r = 3.1212$  con su ACF en (d).

## CONCLUSIONES

Después de realizar el análisis numérico para el caso clásico podemos concluir: que para la  $E_i$  encontramos un mayor número de diferencias que para  $I_m$  con una gran serie de oscilaciones, los casos que presentan mayor entropía son los casos mas caóticos, los casos mas caóticos se presentan en  $RP$  para  $RI2 - DPB$ , en  $RM$  para  $RI3 - DPA$  y en  $RG$  para  $RI2 - DGI$ , mientras que los casos menos caóticos se presentan en  $RP$  para  $RI2 - DPDC3$ , en  $RM$  para  $RI3 - DGDC1$  y en  $RG$  para  $RI2 - C$ .

Estos resultados son de suma importancia para nuestro trabajo de investigación, pues de aquí partimos al objetivo final de estudio que será tratar de investigar cuál es el tipo de caos que podemos esperar, es decir, podremos realizar un análisis para ver el caos en estos sistemas como aproximación en un mapa. A partir de esto podremos también realizar un análisis del espacio fase para nuestros sistemas, así como un estudio de la entropía de Shannon.

Se aplicó un método integral numérico a la ecuación de Helmholtz para estudiar el fenómeno de caos electromagnético en una PCW de longitud finita e infinita con inclusiones cilíndricas circulares. Para la PCW infinita con frecuencias reducidas altas (valor alrededor de 70), se obtienen patrones desordenados de la intensidad del campo. Estos patrones desordenados están asociados con sistemas caóticos, por lo que este resultado confirma que una PCW con inclusiones cilíndricas circulares también presenta este fenómeno. Creemos que un fenómeno, como el mostrado en el caso de la PCW infinita, para patrones de intensidades de campo desordenados, debe comenzarse a observar en la guía finita para frecuencias reducidas del orden de 70. Sin embargo, requiere un poder computacional muy alto. No obstante, son interesantes estos resultados ya que tienen posibles aplicaciones en criptografía.

**BIBLIOGRAFÍA**

1. Bravo-Abad, J. (2006). "Transmisión resonante de luz a través de láminas metálicas Nanoestructuradas". Tesis de doctorado. Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada de la Universidad Autónoma de Madrid, Madrid, España. 170 págs.
2. Bucio Gutiérrez, A. (2021). "Efecto de caos electromagnético en guía de ondas de cristal fotónico de inclusiones cilíndricas". Tesis de Licenciatura, Facultad de Ciencias Físico Matemáticas de la UMSNH.
3. Bocaletti, S., "Phys". Rep. 366, 1101 (2002).
4. Cortijo-Munuera, M. (2015). "Resonancias Fano en nanopartículas metálicas sobre guía de silicio". Tesis de licenciatura, Universidad Politécnica de Valencia, Valencia, España. 70 págs.
5. Kittel, C. (1996). "Introduction to Solid State Physics". John Wiley and Sons, Inc., Madrid, España, seventh edition. Pp. 804.
6. Joannopoulos, J. D., Johnson, S. G., Winn, J. N., and Meade, R. D. (2008). "Photonic crystals: molding the flow of light". Princeton University Press, New York, second edition. Pp. 286.
7. Hernández-Juárez, B. (2005). "Síntesis de materiales de interés en el desarrollo de cristales fotónicos autoensamblados". Tesis de Doctorado, Universidad Autónoma de Madrid, Departamento de Física de Materiales.
8. Teo, S. H. G., Liu, A. Q., Yu, M. B., y Singh, J. (2006). "Fabrication and demonstration of square lattice two-dimensional rodtype photonic band gap crystal optical intersections". *Photonics Nanostruct. Fundam. Appl.*, 4: 103-115.
9. Strogatz, S.H., *Nonlinear "Dynamics and Chaos"*. Perseus Books (1994).
10. Mullin, Tom (1995). "The Nature of Chaos". Oxford: Clarendon Press.
11. Blümel, R. y Reinhardt, W.P. (1995). "Chaos in Atomic Physics". Cambridge: Cambridge University Press.
12. Birkoff, G. (1927). "On the periodic motions of dynamics". *Acta Math*, 50, 359-379.
13. Mikoss, Imre y García, P. (2010). "Una Aproximación Geométrica a la Caracterización del Billar de Sinai". *Rev. Fac. Ing. UCV.*, vol.25, N° 1, pp. 105-111. ISSN 0798-4065.
14. Sinai, Y. G. (1969). "Dynamical Systems with Elastic Reflections". *Russ. Math. Surv.* 25, 137-189.
15. Bunimovich, L. A. (1979). "On the Ergodic Properties of Nowhere Dispersing Billiards". *Commun Math Phys*, 65, 279-312.
16. Triana, S. A. y Campos, D. (1999). "El Billar de Sinai Clásico". *Rev. Acad. Colomb. Cienc.* 23(86):61-71.
17. Linsel, S. y Porter, M. A. (2004). "Graphical User Interface to Simulate Classical Billiard Systems". School of Mathematics and Center for Nonlinear Science, School of Physics. <https://arxiv.org/pdf/nlin/0405003.pdf>
18. Fowles, G. R. (1968). "Introduction to modern optics". Dover Publications, Inc., New York, 2th edition.
19. Mendoza-Suárez, A., Villa-Villa, F., and Gaspar-Armenta, J.A. (2007). "Band structure of two-dimensional photonic crystals that include dispersive left-handed materials and dielectrics in the unit cell". *J. Opt. Soc. Am. B*, 24(12): 3091-3098.
20. Centeno, T. P. (2014). "Estructuras de bandas de cristales fotónicos en 2D con superficies rugosas usando un método integral". Tesis de Licenciatura, Facultad de Ciencias Físico Matemáticas de la UMSNH.

## ESTRUCTURAS DE BANDAS FOTÓNICAS DE UN LABERINTO DE FRACTAL DE KOCH

Eduardo Mellado Villaseñor, Hugo Alva Medrano, Héctor Pérez Aguilar.

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo  
[meveduardo@gmail.com](mailto:meveduardo@gmail.com), [hugoalva9@gmail.com](mailto:hugoalva9@gmail.com), [hiperezag@hotmail.com](mailto:hiperezag@hotmail.com)

### RESUMEN

El estudio de ciertas herramientas geométricas permiten ser utilizadas en muchos métodos de investigación, esto hace que se descubran aplicaciones de gran interés; por ejemplo, la geometría peculiar conocida como fractales. En este trabajo se construyó un método referente a un cristal fotónico haciendo uso de las estructuras de bandas basado en la adopción de un fractal de Koch. Esto con la finalidad de hacer un estudio teórico y numérico de la respuesta electromagnética de una guía de ondas de un cristal fotónico (PCW) infinita para distintos materiales; en particular, para un conductor perfecto. Este problema fue abordado haciendo uso de una técnica numérica conocida como el Método de la Ecuación Integral, que parte de la segunda identidad de Green para resolver la ecuación de Helmholtz bidimensional. Los resultados obtenidos de las estructuras de bandas fotónicas mostraron la presencia de bandas prohibidas, que dependiendo del tamaño de las inclusiones formadas por el laberinto de fractal de Koch se van ensanchando y formando modos discretos. Esto promete excelentes aplicaciones ópticas interesantes tales como el enfocamiento óptico mejorado, el filtraje y el efecto del índice de refracción negativo que han atraído un gran interés de investigación por parte de los investigadores de diferentes campos. Particularmente el campo de las celdas solares, lo cual promete mejorar la eficiencia de la absorción de estos dispositivos y que significaría un enorme desarrollo tecnológico.

### INTRODUCCIÓN

El estudio de problemas cotidianos en la vida real, ha hecho que las ciencias de todo tipo se conviertan en una parte fundamental en el desarrollo industrial y tecnológico del país. Lo que significa que la demanda y exigencia de sistemas de alta calidad que se exigen en múltiples áreas lo que implica la implementación de dispositivos de vanguardia cada vez más novedosos, con base en la aplicación de elementos electrónicos y de diseño en la producción de medios cada vez más eficientes. Siendo así, un problema limitado, con capacidad y velocidad de la información que puede ser procesada en un determinado lapso de tiempo. Por ende, la tecnología actual basada en materiales del estado sólido está llegando al límite físico real, dentro del cual, ya no es posible aumentar la densidad de los componentes electrónicos presentes en los dispositivos que forman parte de nuestro peculiar estilo de vida, pero tampoco es factible continuar incrementando la rapidez de los mismos, sin alterar nuevamente, las dimensiones inherentemente asociadas.

Dada las exigencias descritas, un claro ejemplo de avance tecnológico es la sustitución de cable de cobre por fibra óptica para la transmisión de señales. Esta sustitución permite tener una favorable transmisión de información a grandes velocidades. De ahí que, entre tantas líneas de generación de investigación existe una alternativa con las estructuras cristalinas periódicas tal que cuentan con un empuje considerable. En la actualidad, en los países desarrollados cuentan con esta tecnología tan innovadora que resulta de su estudio. Por consiguiente, la comunidad científica ha incursionado en la tarea de desarrollar nuevos enfoques basados en esta perspectiva particular, en un intento por consolidar con éxito una aplicación esencialmente fotónica. Con los avances nanotecnológicos recientes, la aplicación práctica de los cristales fotónicos (CFs) ha tenido un gran interés científico en lo concerniente a la capacidad y la velocidad de la información que puede ser procesada en un determinado lapso de tiempo.

Los CFs se propusieron a finales de la década de los ochenta en un intento por establecer una solución tentativa al control de la emisión espontánea y de la localización de la luz [1, 2]. Sin embargo, sólo en los últimos años se han conseguido las primeras aplicaciones prácticas de elevado

impacto tecnológico, como son los láseres de CFs o las guías de onda nanoestructuradas con bandas prohibidas [3, 4]. Dichas estructuras poseen una modulación periódica del índice de refracción, siendo su periodo del orden de la longitud de onda del campo electromagnético en el rango óptico. Tal disposición provoca un comportamiento de los fotones similar al de los electrones en la estructura cristalina de un semiconductor [5]. Lo interesante de estos sistemas (i.e. los CFs) es que si el tamaño de las celdas es del orden de la longitud de onda de la luz, se pueden diseñar de tal modo que al ser iluminadas con un haz, éste pueda ser completamente reflejado. Ésta es una de las propiedades más relevantes de los CFs: tienen la posibilidad de presentar bandas prohibidas, produciendo efectos no observados en la óptica tradicional [6]. Otra propiedad interesante de los CFs, es que dentro de ellos se pueden construir canales (guías de ondas), a través de los cuales la luz puede viajar con pérdidas despreciablemente pequeñas permitiendo un control total de la propagación incidente. Fueron necesarias varias décadas de ardua investigación, antes de que se lograra la obtención de resultados sobresalientes que fuesen aplicables en innovaciones nanotecnológicas, tales como láseres de CFs, fibras ópticas microestructuradas, guías de ondas nanoestructuradas con bandas prohibidas, por mencionar algunos ejemplos notables. Los estudios relacionados con la modelación de cristales fotónicos, a pesar de los avances significativos en la actualidad, es un proyecto que aún se encuentra en vías de desarrollo. Existe una gran cantidad de problemas abiertos, entre los cuales podemos mencionar: modelar la respuesta óptica de superficies con estructura fractal; procesar señales ópticas en guías de onda que tienen integrados dispositivos tales como láseres, sensores, etc.; corregir errores y defectos en el proceso de fabricación de cristales fotónicos, entre otros [7]. Parte del desarrollo de este trabajo está enfocado a la aplicación de un fractal de Koch para la iteración inicial.

La estructura de este artículo en este extenso se conforma por la parte teórica donde se introduce la teoría básica del método integral para calcular las estructuras de bandas de las guías de ondas fotónicas periódicas en 1D con longitud infinita; además de incrustar en la parte central de la celda unitaria un fractal de Koch. Posteriormente, en la siguiente sección se presentan resultados numéricos obtenidos de los modelos teóricos. Finalmente en las conclusiones se mencionan las observaciones más sobresalientes de dicho trabajo.

## TEORÍA

La metodología para resolver el problema está basada en conceptos teóricos y en el uso de herramientas propuestas en artículos de investigación descritas anteriormente en relación de metamateriales, fractales y métodos numéricos.

### Construcción de fractales

Con lo descrito anteriormente, se introduce una semi-geometría muy peculiar conocida como fractales que de igual forma permiten ciertas aplicaciones. *La geometría fractal de la naturaleza*. La estética de la naturaleza está influenciada por la complejidad fractal [8]. La recursividad es el número de repeticiones de patrones a través de escalas y la dimensión fractal  $D$  es la tasa de encogimiento del patrón entre repeticiones. El patrón fractal general, determina así su complejidad visual. El carácter de la repetición del patrón ("estadístico" versus "exacto") influye aún más en la complejidad percibida, al igual que el grado de simetría espacial del patrón (la presencia de transformaciones geométricas invariantes como reflejos y rotaciones). La dependencia de la preferencia estética de la complejidad se ha establecido tanto para estadísticas como para repeticiones exactas de patrones fractales. Los fractales estadísticos prevalecen en paisajes naturales (por ejemplo, árboles, montañas, nubes, ríos) [8] y se ha demostrado que la preferencia por ellos alcanza su punto máximo en una complejidad baja-moderada (aproximadamente  $D = 1.3 - 1.4$  en una escala entre  $D = 1.1$  y  $1.9$ ) y disminuyen de manera constante con la complejidad adicional. Las pinturas de Jackson Pollock [9] reflejan estos hallazgos en que las capas de pintura del artista establecen una estructura fractal, y la preferencia por las versiones recortadas en blanco y negro de estas obras alcanza su punto máximo en la complejidad media. Además, el arte tradicional y

contemporáneo de diversas culturas contiene propiedades fractales, lo que sugiere una preferencia universal por patrones de complejidad percibida baja-moderada con subgrupos de preferencia por diferentes valores  $D$ . En particular, un análisis de obras de arte famosas indica una preferencia por valores de las dimensiones de  $D$  más bajos con afecciones relacionadas con la edad, incluidas las enfermedades de Alzheimer y Parkinson. Al contrastar la preferencia general por los fractales estadísticos de complejidad media-baja, el aumento de la tolerancia de la complejidad fractal provocada por las simetrías y la repetición precisa de los fractales exactos genera preferencia por valores de  $D$  más altos [10].

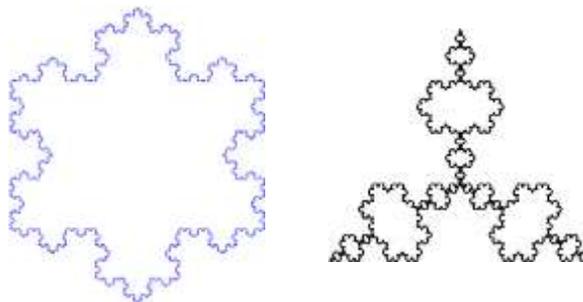
Los fractales cuentan con varias características que los definen tales como:

Presentan *autosimilaridad*. De acuerdo a Mandelbrot, los fractales pueden presentar 3 clases diferentes de autosimilitud, lo que significa que las partes tienen la misma estructura que el conjunto total:

- *Autosimilitud exacta*. El fractal resulta idéntico a cualquier escala como: el copo de nieve de Koch, el triángulo de Sierpinski o fractal de Mandelbrot.
- *Cuasi-autosimilitud o Autosimilitud aproximada*. Con el cambio de escala, las copias del conjunto son muy semejantes, pero no idénticas por ejemplo, el brócoli romanesco.
- *Autosimilitud estadística*. El fractal debe tener dimensiones estadísticas o de número que se conserven con la variación de la escala tales como: las montañas o en los cráteres lunares.

Su dimensión fractal tiene que ser mayor que su dimensión topológica. Los fractales no son diferenciables en ningún punto.

En las Figs. 1(a) y (b) se muestra un fractal conocido como copo de nieve de Koch e inverso, respectivamente. En la Fig. 2 se muestran ejemplos de diferentes tipos de fractales pertenecientes a los diferentes tipos de autosimilitud. Como se puede observar, existe una gran variedad de tipos de fractales que se utilizan para estudiar muchos fenómenos desde las encimas hasta los terremotos, los movimientos de la bolsa, compresión de imágenes, neurociencia, sistemas dinámicos y muchos otros más [11–16]. Los fractales también aparecen en la naturaleza y en el arte, esto último se ha estudiado con la dimensión fractal para determinar la autenticidad de los cuadros de Jackson Pollock que valen millones de pesos [9]. En fin los fractales tienen un gran conjunto de aplicaciones.



a) Fractal de Koch. (b) Fractal de Koch inverso.

Figura 1: Representación de un copo de nieve de Koch e inverso de clase de autosimilitud exacta.

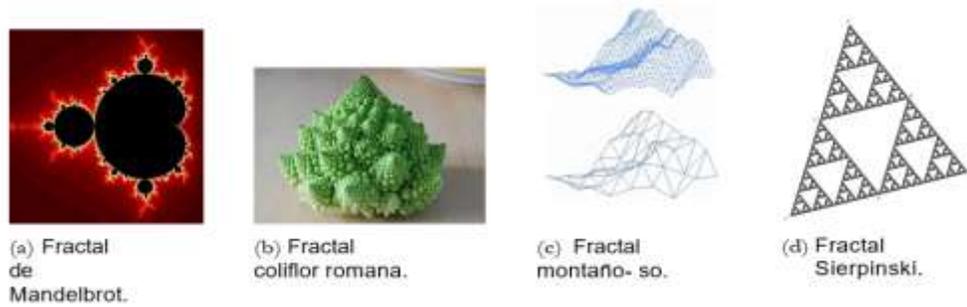


Figura 2: Representación de fractales con autosimilitud.

**Método de la Ecuación Integral**

El sistema de estudio está formado por dos superficies planas infinitas y un arreglo periódicamente perfecto de inclusiones de un laberinto de estructuras fractales, cuyo eje de simetría va a lo largo del eje z, como se muestra en la Fig. 3. Se considera que tiene un periodo *P* en los perfiles planos, una separación entre las placas de la guía dada por *b* y las inclusiones fractales de Koch para una cierta iteración, el cual puede estar en términos de la fracción de llenado *f*.

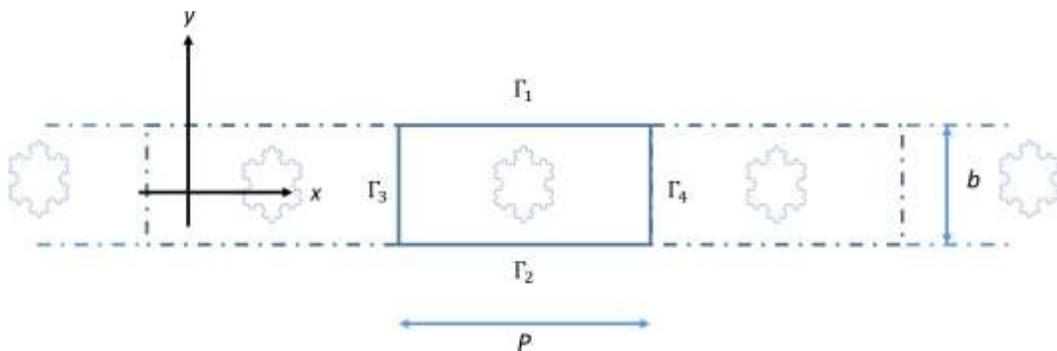


Figura 3: Descripción esquemática de la guía de ondas periódica con superficies perfectamente conductoras.

Se consideran las dos ecuaciones de Maxwell correspondientes a la ley de Faraday y la ley de Ampere, respectivamente, en su forma diferencial para un medio libre sin cargas ni corrientes, cuya permitividad eléctrica  $\epsilon$  y permeabilidad magnética  $\mu$ ,

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}, \tag{1}$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \epsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \tag{2}$$

donde  $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{H}$  son los campos eléctrico y magnético, respectivamente. Recordando que las ecuaciones constitutivas de los campos eléctrico y magnético para materiales lineales están dadas como:

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}, \tag{3}$$

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}, \tag{4}$$

donde  $\mathbf{D}$  y  $\mathbf{B}$  son los campos de desplazamiento eléctrico e inducción magnética, respectivamente.

Para determinar esencialmente la estructura de bandas del sistema original propuesto, es

necesario encontrar la relación de dispersión  $\omega = \omega(K)$ . Se asume una dependencia armónica del tiempo  $e^{-i\omega t}$

para los campos electromagnéticos y la ecuación de onda es transformada en la ecuación de Helmholtz:

$$\nabla^2 \psi_j(\mathbf{r}) + k_j^2 \psi_j(\mathbf{r}) = 0, \quad (5)$$

donde la  $j$  indica el  $j$ ésimo medio,  $\mathbf{r}$  es el vector de posición del punto de observación y  $\psi_j(\mathbf{r})$  representa el campo eléctrico o magnético. La magnitud del vector de onda está dada por:

$$k_j = n_j \frac{\omega}{c}, \quad (6)$$

donde el índice de refracción  $n_j = \sqrt{\mu_j \epsilon_j}$  involucra las propiedades de los materiales está dado en términos de la permeabilidad magnética  $\mu_j$  y de la permitividad eléctrica  $\epsilon_j$  relativas. Para resolver la Ec. (5), consideremos una función de Green  $G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  para el  $j$ -ésimo medio,

$$\nabla^2 G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + k_j^2 G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -4\pi \delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}'), \quad (7)$$

donde  $G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  representa el propagador del campo debido a una fuente de luz puntual que emite a la frecuencia  $\omega$  en la posición  $\mathbf{r}'$  y  $\delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  es la delta de Dirac. Una solución de la Ec. (7) está representada por la siguiente función de Green,

$$G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = i\pi H_0^1(k_j |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|), \quad (8)$$

siendo  $H_0^1(k_j |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$  la función de Hankel de primera clase y de orden cero. Esta función de Green para el vacío satisface una condición de radiación, mientras que para el interior del  $j$ -ésimo cuerpo satisface una condición de absorción.

Aplicando la segunda identidad del teorema integral de Green a las funciones  $\psi_j(\mathbf{r}')$  y  $G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  para cada región correspondiente al  $j$ -ésimo medio, obtenemos

$$\frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_j} \left[ G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \psi_j(\mathbf{r}')}{\partial n'} - \psi_j(\mathbf{r}') \frac{\partial G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \right] ds' = \oint_{S_j} \psi_j(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') da' \quad (9)$$

siendo  $S_j$  una superficie cerrada que está limitada por el contorno cerrado  $\Gamma_j$  correspondiente,  $ds'$  el diferencial de la longitud de arco y  $da'$  el diferencial de área.

En el lado izquierdo de la Ec. (9) tenemos dos integrales de contorno que al dividir en  $n$  pequeños segmentos de longitud de arco  $\Delta s$ , las integrales se pueden expresar como

$$\frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_j} G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \psi_j(\mathbf{r}')}{\partial n'} ds' \approx \frac{1}{4\pi} \sum_n \phi_n^j \int_{s_n - \Delta s/2}^{s_n + \Delta s/2} G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') ds', \quad (10)$$

$$\frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_j} \psi_j(\mathbf{r}') \frac{\partial G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} ds' \approx \frac{1}{4\pi} \sum_n \psi_n^j \int_{s_n - \Delta s/2}^{s_n + \Delta s/2} \frac{\partial G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} ds', \quad (11)$$

$$\psi_n^j = \psi_j(\mathbf{r}') \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \text{ y } \phi_n^j = \frac{\partial \psi_j(\mathbf{r}')}{\partial n'} \Big|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}'_n}$$

Donde  $\psi_n^j$  y  $\phi_n^j$  indican el campo y su derivada normal, respectivamente,

evaluados en los puntos correspondientes al contorno cerrado  $\Gamma_j$ .

Evaluando las integrales de las Ecs. (10) y (11) en el punto de observación  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_m$  se tienen los elementos de matriz definidos por

$$L_{mn} = \frac{1}{4\pi} \sum_n \phi_n^j \int_{s_n-\Delta s/2}^{s_n+\Delta s/2} G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') ds', \tag{12}$$

$$N_{mn} = \frac{1}{4\pi} \sum_n \psi_n^j \int_{s_n-\Delta s/2}^{s_n+\Delta s/2} \frac{\partial G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} ds'. \tag{13}$$

Estos elementos de matriz, ya calculados, están dados por las expresiones [17,18]

$$L_{mn}^{(j)} = \frac{i\Delta s}{4} H_0^{(1)}(k_j R_{mn})(1 - \delta_{mn}) + \left[ \frac{i\Delta s}{4} H_0^{(1)} \left( k_j \frac{\Delta s}{2e} \right) \right] \delta_{mn}, \tag{14}$$

$$N_{mn}^j = \frac{i\Delta s}{4} k_j H_1^{(1)}(k_j R_{mn}) \hat{\mathbf{n}}_n \cdot \frac{\mathbf{R}_{mn}}{R_{mn}} (1 - \delta_{mn}) + \left[ \frac{1}{2} + \frac{\Delta s}{4\pi} \hat{\mathbf{n}}_n \cdot \hat{\mathbf{t}}'_n \right], \tag{15}$$

Siendo

$$\hat{\mathbf{n}}_n \cdot \vec{\mathbf{R}}_{mn} = -y'_n(x_m - x_n) + x'_n(y_m - y_n), \tag{16}$$

$$\hat{\mathbf{n}}_n \cdot \hat{\mathbf{t}}'_n = x'_n y''_n - y'_n x''_n, \tag{17}$$

$$R_{nm} = \sqrt{(x_m - x_n)^2 + (y_m - y_n)^2}. \tag{18}$$

Al aplicar la Ec. (9) a cada uno de los contornos que forman el sistema de estudio (ver Fig. 3), permite que se pueda reescribir como un sistema de ecuaciones algebraico. Una vez resuelto el sistema algebraico bajo las condiciones de frontera dadas por

$$\psi_i^{(1)} = \psi_i^{(2)}, \quad \frac{1}{f_1} \frac{\partial \psi_i^{(1)}}{\partial n} = \frac{1}{f_2} \frac{\partial \psi_i^{(2)}}{\partial n}, \tag{19}$$

donde

$$f_j = \begin{cases} 1 & \text{para polarización TE,} \\ \epsilon_j & \text{para polarización TM.} \end{cases} \tag{20}$$

siendo  $j = 1$  y  $2$ , se obtiene el campo y su derivada normal que con ellos se obtiene la estructura de bandas. Con estas consideraciones encontramos un sistema de ecuaciones lineal  $M(\omega)F(\omega) = 0$  que tiene una matriz representativa  $M$ , que depende de la frecuencia  $\omega$  y el vector de Bloch  $K$ , el cual modelara nuestro sistema de estudio. Dado que el sistema es homogéneo, una solución trivial no puede obtenerse si el determinante de tal matriz es cero. Para determinar la frecuencia  $\omega$  definimos la función:

$$D(K, \omega) = \ln|\det(M)|, \tag{21}$$

que numéricamente presenta puntos mínimos locales que nos darán la relación de dispersión numérica  $\omega = \omega(K)$ .

Una vez explicado los términos teóricos para poder calcular la estructura de bandas de la guía de ondas de cristal fotónico con una inclusión de fractal de Koch. La idea principal para resolver esto es crear un fractal como el de la Fig. 1(a) para diferentes iteraciones. La forma en la que se construye este fractal, está basado en un concepto simple donde un segmento de tamaño  $L$  que se divide entre 3, luego se elimina el segmento central para construir un triángulo equilátero de tamaño  $L/3$  tal como se muestra en la Fig. 4(a) lo que representa la primera iteración para  $n = 1$ . Posteriormente, repetimos el paso anterior y ahora se toman nuevamente los mismos segmentos de longitud  $L/3$  para luego dividir en 3 partes iguales quedando de longitud  $L/6$  (ver Fig. 4(b)), esto corresponde a la iteración  $n = 2$ . Finalmente, se repite la misma dinámica para obtener la iteración  $n = 3$  como se muestra en la Fig. 4(c) y de manera sucesiva se obtienen los siguientes segmentos.

Durante las investigaciones no se pudo encontrar como tal una expresión matemática del fractal de Koch, ya que si hubiese sido así, resultaría más fácil su construcción. Sin embargo, siguiendo los pasos



Figura 4: Iteración del copo de nieve de Koch de la clase de autosimilitud exacta.

descritos anteriormente se logró generar dichos fractales. Como se puede observar en la Figs. 5 y 6 un conjunto de figuras para cuatro iteraciones. En la Figs. 5(a) y (b), 6(a) y (b) de lado izquierdo se muestra el fractal como tal para cada iteración con líneas continuas y del lado derecho el fractal discretizado para dichos fines; en particular resultados para la iteración  $n = 0$ . Tal y como se describió en la teoría, como no es posible tomar en cuenta las esquinas de los fractales debido a que la derivada no está definida en esos puntos, es necesario no tomarlos en cuenta. Esto se resolvió definiendo las respectivas rectas de cada uno de los vértices generados para luego discretizar dicha recta y definir la cantidad de puntos a necesitar. Por ejemplo, en la Fig. 5(a) del lado derecho se encuentra dicha recta discretizada; es decir, se contruyeron 6 puntos para cada lado y se quitaron los puntos de los extremos de cada lado, nos restan 4. Aunque para este proyecto, sólo se trabajó para la iteración  $n = 0$  en futuros trabajos se presentará para el resto de los fractales.

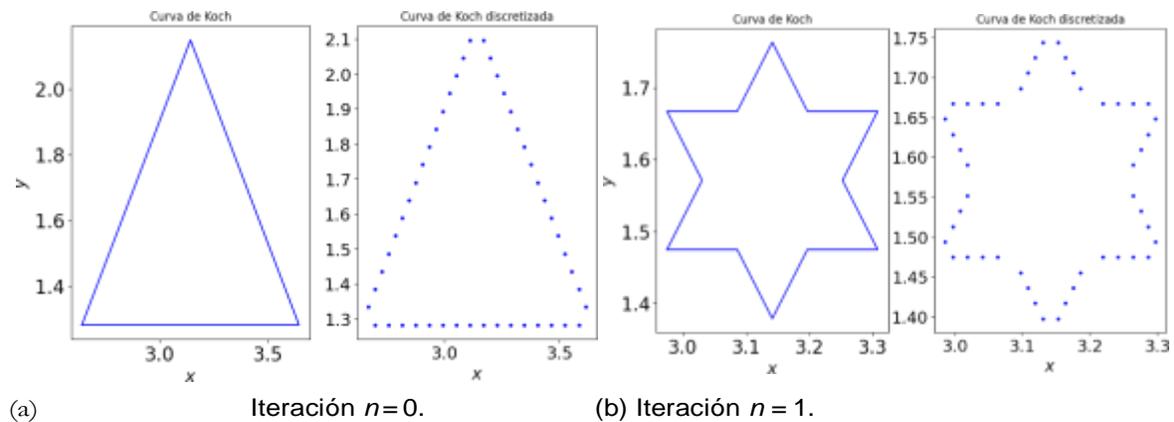


Figura 5: Iteración del copo de nieve de Koch de la clase de autosimilitud exacta.

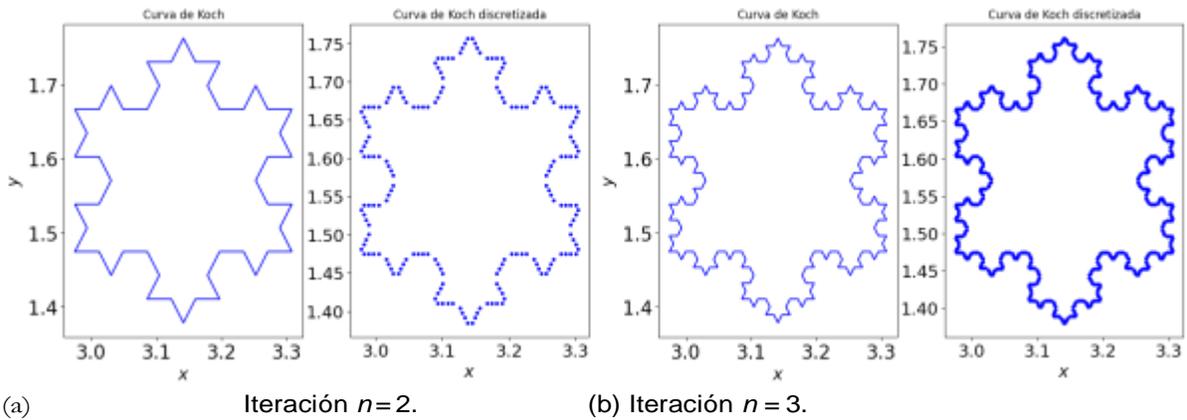


Figura 6: Iteración del copo de nieve de Koch de la clase de autosimilitud exacta.

**RESULTADOS**

En la Fig. 7 se muestran las estructuras de bandas de la guía de ondas de cristal fotónico con un arreglo de inclusiones formado con la estructura de fractal de Koch de orden  $n = 0$  (Fig. 5(a)) de conductor perfecto. Primeramente se presenta el caso de la PCW sin inclusiones en la Fig. 7(a). Posteriormente, cuando la PCW tiene diferentes tamaños de las inclusiones con  $L = 1/3$  (Fig. 7(b)),  $L = 3/4$  (Fig. 7(c)) y  $L = 1$  (Fig. 7(d)). Cada caso se hizo con el paso de discretización Delta  $s = 1/$ .

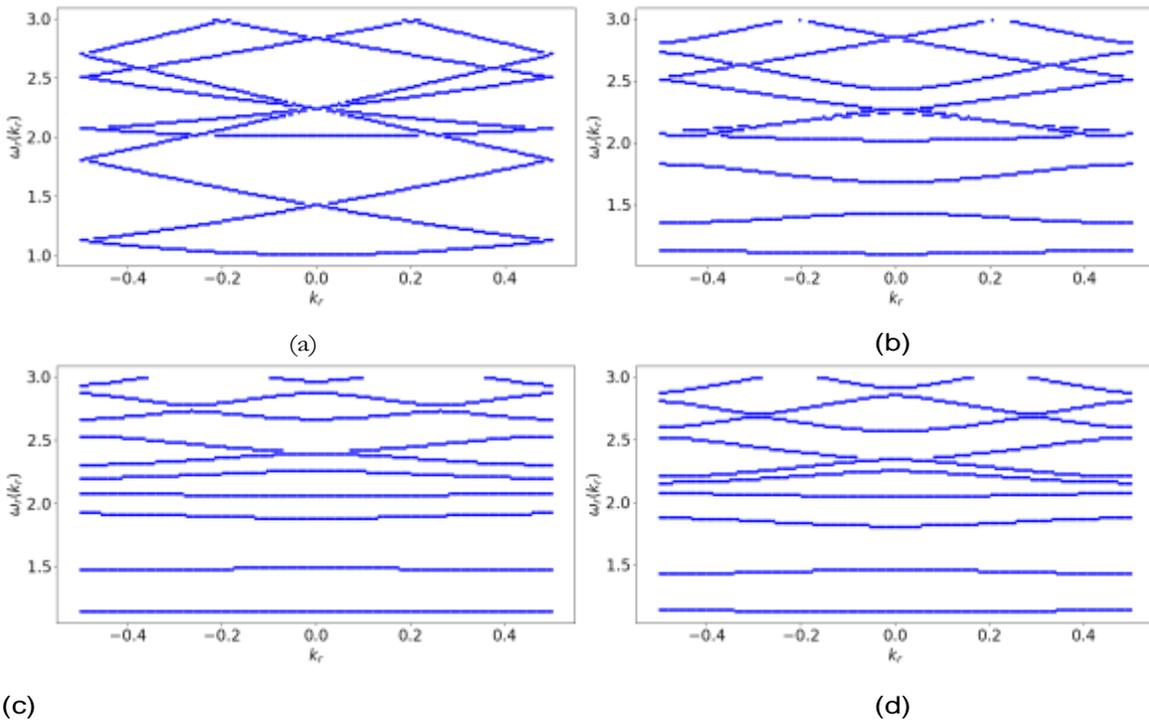


Figura 7: Estructura de bandas de una PCW con inclusiones de conductor perfecto formadas con la estructura del fractal de Koch ( $n = 0$ ) para (a)  $L = 0$ , (b)  $L = 1/3$ , (c)  $L = 3/4$  y (d)  $L = 1$ .

En la Fig. 7 observamos que en el primer caso sin inclusiones la estructura de bandas no tiene bandas prohibidas. En cambio, cuando la PCW tiene un arreglo de inclusiones las estructuras de bandas fotónicas muestran la presencia de bandas prohibidas, que dependiendo del tamaño de las

inclusiones formadas por el laberinto de fractal de Koch se van ensanchando y formando modos discretos.

## CONCLUSIONES

Se desarrolló un método integral numérico para calcular las estructuras de bandas fotónicas de una PCW perfectamente conductora con inclusiones formadas con el fractal de Koch de orden 0. Los resultados numéricos mostraron la presencia de bandas prohibidas, que dependiendo del tamaño de las inclusiones formadas por el laberinto de fractal de Koch se van ensanchando y formando modos discretos. Esto promete excelentes aplicaciones ópticas interesantes que podrían significar un enorme desarrollo tecnológico.

## BIBLIOGRAFÍA

1. Eli Yablonovitch. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics. *Phys. Rev. Lett.*, 58:2059–2062, May 1987.
2. Sajeev John. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices. *Phys. Rev. Lett.*, 58:2486–2489, Jun 1987.
3. JS Foresi, Pierre R Villeneuve, J Ferrera, ER Thoen, G Steinmeyer, S Fan, JD Joannopoulos, LC Kimerling, Henry I Smith, and EP Ippen. Photonic-bandgap microcavities in optical waveguides. *nature*, 390(6656):143–145, 1997.
4. Yurii A Vlasov, Xiang-Zheng Bo, James C Sturm, and David J Norris. On-chip natural assembly of silicon photonic bandgap crystals. *Nature*, 414(6861):289–293, 2001.
5. Jan G. Korvink and Andreas Greiner. *Semiconductors for Micro and Nanotechnology—An Introduction for Engineers*. Wiley-VCH, Germany, 2002.
6. Joannopoulos. *Photonic crystals: Molding the own of light*. Princeton University Press, New York, 2008.
7. María Claudia Guillén Gallegos. *Respuesta óptica de guías de ondas de cristales fotónicos en 1d usando métodos integrales*. UMNSH, 2015.
8. B.B. Mandelbrot, W.H. Freeman, and Company. *The Fractal Geometry of Nature*. Einaudi paperbacks. Henry Holt and Company, 1983.
9. Richard P Taylor, Adam P Micolich, and David Jonas. Fractal analysis of pollock's drip paintings. *Nature*, 399(6735):422–422, 1999.
10. Kelly E Robles, Nicole A Liaw, Richard P Taylor, Dare A Baldwin, and Margaret E Sereno. A shared fractal aesthetic across development. *Humanities and Social Sciences Communications*, 7(1):1–8, 2020.
11. Christian Goltz. Fractal and chaotic properties of earthquakes. In *Fractal and Chaotic Properties of Earthquakes*, pages 3–164. Springer, 1997.
12. Douglas H Fockink and Urio. Enzymatic hydrolysis of steam-treated sugarcane bagasse: Effect of enzyme loading and substrate total solids on its fractal kinetic modeling and rheological properties. *Energy & Fuels*, 31(6):6211–6220, 2017.
13. Swetadri Samadder, Koushik Ghosh, and Tapasendra Basu. Fractal analysis of prime indian stock market indices. *Fractals*, 21(01):1350003, 2013.
14. Yuval Fisher. Fractal image compression. *Fractals*, 2(03):347–361, 1994.
15. Herbert F Jelinek, N Elston, and Brendan Zietsch. Fractal analysis: pitfalls and revelations in neuroscience. In *Fractals in biology and medicine*, pages 85–94. Springer, 2005.
16. Ya B Pesin, Yakov B Pesin, and Vaughn Climenhaga. *Lectures on fractal geometry and dynamical systems*, volume 52. American Mathematical Soc., 2009.
17. Héctor I Pérez, Claudio I Valencia, Eugenio R Méndez, and José A Sánchez-Gil. On the transmission of diffuse light through thick slits. *JOSA A*, 26(4):909–918, 2009.
18. Alberto Mendoza-Suárez, Francisco Villa-Villa, and Jorge A Gaspar-Armenta. Numerical method based on the solution of integral equations for the calculation of the band structure and reflectance of one-and two-dimensional photonic crystals. *JOSA B*, 23(10):2249–

- 2256, 2006.
20. Luis Eduardo Punete Días. *Estructuras de bandas de cristales fotónicos en 2D con superficies rugosas que contienen metamaterial dispersivo*. PhD thesis, Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, Agosto 2015.

## ESTUDIO NUMÉRICO DE LA RESPUESTA ÓPTICA DE UN SISTEMA DE MULTICAPAS USANDO EL MÉTODO DE LA ECUACIÓN INTEGRAL

Sergio Sánchez López, José E. Medina Magallón, Eric Didier Galván Navarro, Héctor Pérez Aguilar

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo  
[sergiosanz125@gmail.com](mailto:sergiosanz125@gmail.com), [jmedinamagallon@gmail.com](mailto:jmedinamagallon@gmail.com), [e.d.g.n.19@gmail.com](mailto:e.d.g.n.19@gmail.com),  
[hiperezag@gmail.com](mailto:hiperezag@gmail.com)

### RESUMEN

Las estructuras multicapas han sido estudiadas durante varias décadas, debido al gran interés en el desarrollo de nuevas aplicaciones tecnológicas. Por ejemplo, los recubrimientos dieléctricos o metálicos de multicapas se utilizan ampliamente para la fabricación de diversos componentes ópticos; así como en el diseño de sensores plasmónicos para la detección de moléculas. El conocimiento preciso de las constantes ópticas y del grosor de las distintas capas es uno de los factores más importantes para diseñar y producir con éxito recubrimientos ópticos con un rendimiento óptimo. Por tal motivo, en este trabajo presentamos un estudio teórico y numérico de la respuesta óptica de un sistema multicapas que está formado por varias interfaces entre medios dieléctricos y metálicos. Para abordar el problema, se hace uso de una técnica numérica conocida como el Método de la Ecuación Integral para sistemas finitos. Los resultados numéricos obtenidos fueron comparados con los resultados analíticos (usando las ecuaciones de Fresnel), mostrando una buena correspondencia entre ellos. El error relativo obtenido en el cálculo de reflectancia y transmitancia para la polarización TE es aproximadamente de 3%, mientras que en el cálculo para la polarización TM, es alrededor de 2%. Así, el cálculo numérico que hemos realizado se ajusta correctamente a los resultados del cálculo analítico para ambas polarizaciones. Además, esto permite tener una gran cantidad de aplicaciones en diversos campos de la ciencia y la tecnología.

### INTRODUCCIÓN

El estudio de los sistemas multicapas son de gran interés debido a sus propiedades ópticas especiales como la resonancia de plasmones superficiales [1], la cual se basa en el confinamiento de ondas electromagnéticas en la superficie de un metal fuertemente acopladas a oscilaciones colectivas de los electrones libres. El fuerte confinamiento de estas resonancias a la superficie del metal explica su excepcional sensibilidad a los cambios en el entorno dieléctrico y constituye el mecanismo de detección que ampliamente se utiliza hoy en día en aplicaciones como biomedicina, detección de patógenos o en terapias alternativas para tratamientos de cáncer [2,3]. El estudio de los plasmones de superficie fue desarrollada a principios del siglo XX en el contexto de ondas de radio que se propagaban a lo largo de la superficie de un conductor de conductividad finita. Sin embargo, el trabajo más importante para comprender la naturaleza de los plasmones fue presentado por Ritchie [4], quién utilizó las ecuaciones de Maxwell para demostrar que una onda electromagnética puede existir y confinarse a una interfaz entre un metal y un dieléctrico. La amplitud de esta onda decae exponencialmente hacia el interior del dieléctrico y la longitud de decaimiento depende de la longitud de onda del campo incidente y de las propiedades ópticas del metal. Las oscilaciones de plasmones superficiales pueden excitarse mediante un estímulo eléctrico u óptico. Sin embargo, la excitación no puede realizarse haciendo incidir directamente luz sobre la superficie metálica debido a que el vector de onda de los fotones es siempre menor que el de los plasmones. Por lo que la curva de dispersión de los plasmones estará siempre por debajo de la curva de dispersión de los fotones propagándose en el dieléctrico y para que se produzca la excitación plasmónica es necesario que ambos vectores sean iguales. Para dar solución a este inconveniente se han usado diferentes técnicas, entre las que se destacan es el acoplamiento con un prisma o bien llamada, configuración de Kretschmann [5]. La cual consiste en hacer incidir la luz a través de un prisma dieléctrico sobre la superficie metálica. De esta forma, cuando cambia el índice de refracción del material, cambiará el ángulo en el que se debe apuntar el haz para que el dispositivo entre en resonancia. Este es el principio de los sensores de resonancia plasmónica, esencialmente miden cambios en el índice de refracción en el medio cercano a la superficie

metálica que se traduce en un cambio en el ángulo de resonancia. Por tanto, conocidas las condiciones de excitación de plasmones superficiales, se puede obtener el espesor dado el índice de refracción, o viceversa.

Por ello, en este trabajo se tiene el interés de estudiar las propiedades ópticas de un sistema de multicapas que está formado por medios dieléctricos y de metal. Para estudiar el comportamiento de la luz en este tipo de sistemas se requiere dominar no sólo los aspectos teóricos si no también los modelos numéricos. Así, para estudio de la propagación de ondas electromagnéticas en estructuras multicapas finitas, se basa en métodos numéricos que ha desarrollado el grupo de cristales fotónicos de la FCFM de la UMSNH [6,7].

Este artículo está organizado de la siguiente manera. En la sección de teoría se presenta el sistema de estudio, la descripción del Método de la Ecuación Integral y una breve descripción de las ecuaciones de Fresnel, que se utiliza para resolver el problema planteado. En la sección de resultados presentaremos el análisis numérico de la respuesta óptica del sistema. Finalmente, en la sección de conclusiones presentaremos nuestras principales conclusiones de este trabajo.

## TEORÍA

A continuación, se presenta un breve desarrollo descriptivo de la base teórica que se pretende utilizar para resolver nuestro problema de estudio.

### Propagación de la luz a través de la materia

Todos los problemas sobre electromagnetismo, siempre que nos mantengamos en una situación macroscópica como es el caso de la propagación de la luz a través de sólidos, pueden tratarse mediante las ecuaciones de Maxwell. En nuestro estudio de la propagación de la luz a través de la materia nos ocuparemos únicamente en los medios magnéticos y eléctricamente neutros. Por lo tanto,  $\mathbf{M}$  y  $\rho$  se toman igual a cero. Así, las ecuaciones de Maxwell, se reducen a:

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\mu_0 \left( \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \right), \quad (1)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \varepsilon_0 \left( \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \right) + \left( \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} \right) + \mathbf{J}, \quad (2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = -\left( \frac{1}{\varepsilon_0} \right) \nabla \cdot \mathbf{P}, \quad (3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{H} = 0. \quad (4)$$

Tomando el rotacional de la Ec. (1) y la derivada respecto al tiempo de la Ec. (2) para eliminar  $\mathbf{H}$ , obtenemos la ecuación de onda para el campo eléctrico

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) + \left( \frac{1}{c^2} \right) \left( \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} \right) = -\mu_0 \left( \frac{\partial^2 \mathbf{P}}{\partial t^2} \right) - \mu_0 \left( \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t} \right). \quad (5)$$

Los términos del lado derecho de la ecuación anterior se llaman términos fuente. Se derivan de la presencia de las cargas de polarización y de conducción, respectivamente dentro del medio. La manera en la que la propagación de la luz se ve afectada por los términos fuentes está incluida. En caso de tratarse de medios no conductores, el término  $-\mu_0 \partial^2 \mathbf{P} / \partial t^2$  es de importancia, ya que conduce a una explicación de muchos efectos ópticos como: la dispersión y la doble refracción, por mencionar algunos. En el caso de los metales, el término de conducción  $-\mu_0 \partial \mathbf{J} / \partial t$  es el importante. Así, las soluciones resultantes de la ecuación de onda explican la gran opacidad y alta reflectancia de los metales. Es por esto que consideraremos el caso de interacción de la luz con los medios conductores metálicos utilizando el Modelo de Drude-Lorentz [8].

### Método de la Ecuación Integral

El Método de la Ecuación Integral está basado en la solución numérica de la ecuación de Helmholtz usando ecuaciones integrales [9]. El método parte del segundo teorema integral de Green permitiendo obtener un par de ecuaciones integrales acopladas que involucran, como incógnitas el modo del campo y su derivada normal evaluados en las fronteras o superficies involucradas. La discretización del sistema resulta en una ecuación matricial homogénea cuya solución determina las funciones fuente, con las que se calcula la estructura de bandas o la respuesta óptica del sistema. El método Integral también es adecuado para el cálculo de la distribución del campo electromagnético en las regiones del campo cercano y lejano para sistemas finitos. En virtud de lo cual es apropiado a nuestro problema de estudio que se describe a continuación.

Consideremos el caso de un sistema formado por tres interfaces entre cuatro medios como el mostrado en la Fig. 1 y aplicando el teorema de Green en la región  $R_0$  en la cual hay una onda incidente, obtenemos el campo total

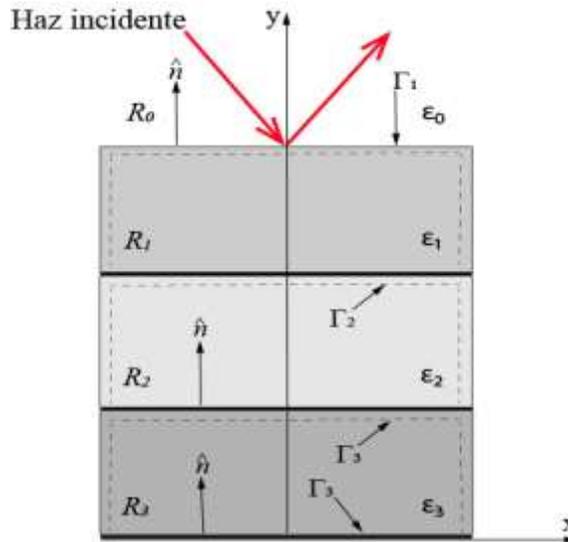


Figura 1. Sistema finito formado por tres interfaces entre cuatro medios con constantes dieléctricas  $\epsilon_0, \epsilon_1, \epsilon_2$  y  $\epsilon_3$ , respectivamente.

$$\Psi_{inc}(\mathbf{r}) + \frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_1} \left[ G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_0(\mathbf{r}')}{\partial n'} - \frac{\partial G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \Psi_0(\mathbf{r}') \right] ds' = \Psi(\mathbf{r}), \tag{6}$$

donde  $\Psi_{inc}(\mathbf{r})$  representa el campo incidente y  $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  es la función de Green en la región del vacío.

Para la región  $R_1$ , el campo total está determinado por

$$\frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_1} \left[ G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_1(\mathbf{r}')}{\partial n'} - \frac{\partial G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \Psi_1(\mathbf{r}') \right] ds' - \frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_2} \left[ G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_1(\mathbf{r}')}{\partial n'} - \frac{\partial G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \Psi_1(\mathbf{r}') \right] ds' = \Psi(\mathbf{r}), \tag{7}$$

donde  $\Gamma_1$  y  $\Gamma_2$  son los contornos que delimitan a la región  $R_1$ .

Para la región  $R_2$ , el campo total está dado por

(8)

$$\frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_1} \left[ G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_2(\mathbf{r}')}{\partial n'} - \frac{\partial G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \Psi_2(\mathbf{r}') \right] ds' - \frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_3} \left[ G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_2(\mathbf{r}')}{\partial n'} - \frac{\partial G_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \Psi_2(\mathbf{r}') \right] ds' = \Psi(\mathbf{r}),$$

y para la región  $R_3$ , el campo total está determinado por

$$\frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_3} \left[ G_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_3(\mathbf{r}')}{\partial n'} - \frac{\partial G_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} \Psi_3(\mathbf{r}') \right] ds' = 0, \quad (9)$$

siendo  $G_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  la función de Green en la región  $R_3$ .

El sistema de ecuaciones integrales descritos anteriormente, se pueden representar de la siguiente manera

$$I_{G^1}^{(0)}(\mathbf{r}) - I_{\Psi^1}^{(0)}(\mathbf{r}) = \Psi^{(0)}(\mathbf{r}) + \Psi^{inc}(\mathbf{r}) \quad (10)$$

$$I_{G^1}^{(1)}(\mathbf{r}) - I_{\Psi^1}^{(1)}(\mathbf{r}) - I_{G^2}^{(1)}(\mathbf{r}) + I_{\Psi^2}^{(1)}(\mathbf{r}) = \Psi^{(1)}(\mathbf{r}), \quad (11)$$

$$I_{G^2}^{(2)}(\mathbf{r}) - I_{\Psi^2}^{(2)}(\mathbf{r}) - I_{G^3}^{(2)}(\mathbf{r}) + I_{\Psi^3}^{(2)}(\mathbf{r}) = \Psi^{(2)}(\mathbf{r}), \quad (12)$$

$$I_{G^3}^{(3)}(\mathbf{r}) - I_{\Psi^3}^{(3)}(\mathbf{r}) = 0, \quad (13)$$

donde

$$I_G^{(j)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma} G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_j(\mathbf{r}')}{\partial n'} ds' \quad (14)$$

$$I_{\Psi}^{(j)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma} \Psi_j(\mathbf{r}') \frac{\partial G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n'} ds'. \quad (15)$$

Las Ecs. (10-13) se pueden representar en términos de sumatorias. Para eso, se hace una aproximación del punto de observación sobre los contornos que delimitan la región correspondiente. Las condiciones de frontera de los diferentes contornos  $\Gamma_j$  están dadas por

$$\Psi_n^{(j)} = \Psi_n^{(j+1)}, \quad \Phi_n^{(j+1)} = \frac{f_{j+1}}{f_j} \Phi_n^{(j)},$$

donde la cantidad  $f_j$  está dada por

$$f_j = \begin{cases} \mu_j(\omega) & \text{para la polarización TE o s} \\ \varepsilon_j(\omega) & \text{para la polarización TM o p.} \end{cases}$$

Así, el sistema de ecuaciones para el sistema propuesto se puede expresar como

$$\sum_{n=1}^{N_1} (\delta_{mn} - N_{mn(1)}^{(0)}) \Psi_{n(1)}^{(0)} + \sum_{n=1}^{N_1} L_{mn(1)}^{(0)} \Phi_{n(1)}^{(0)} = \Psi^{inc}, \quad (16)$$

$$-\sum_{n=1}^{N_1} N_{mn(1)}^{(1)} \Psi_{n(1)}^{(0)} + \frac{f_1}{f_0} \sum_{n=1}^{N_1} L_{mn(1)}^{(1)} \Phi_{n(1)}^{(0)} + \sum_{n=1}^{N_2} (N_{mn(2)}^{(1)} - \delta_{mn}) \Psi_{n(2)}^{(0)} - \frac{f_1}{f_0} \sum_{n=1}^{N_2} L_{mn(2)}^{(1)} \Phi_{n(2)}^{(0)} = 0, \quad (17)$$

$$-\sum_{n=1}^{N_2} N_{mn(2)}^{(2)} \Psi_{n(2)}^{(0)} + \frac{f_2}{f_0} \sum_{n=1}^{N_2} L_{mn(2)}^{(2)} \Phi_{n(2)}^{(0)} + \sum_{n=1}^{N_3} (N_{mn(3)}^{(2)} - \delta_{mn}) \Psi_{n(3)}^{(0)} - \frac{f_2}{f_0} \sum_{n=1}^{N_3} L_{mn(3)}^{(2)} \Phi_{n(3)}^{(0)} = 0, \quad (18)$$

$$-\sum_{n=1}^{N_3} N_{mn(3)}^{(3)} \Psi_n^{(0)} + \frac{f_3}{f_0} \sum_{n=1}^{N_3} L_{mn(3)}^{(3)} \Phi_n^{(0)} = 0. \quad (19)$$

Este sistema lineal e inhomogénea de ecuaciones determina una matriz cuadrada  $M$  de rango  $2(N_1 + N_2 + N_3) \times 2(N_1 + N_2 + N_3)$ . Para este caso se ha considerado que el medio de incidencia tiene las propiedades ópticas dadas por la permeabilidad magnética  $\mu_0$  y la permitividad eléctrica  $\varepsilon_0$  y el medio de transmisión tiene las propiedades dadas por  $\mu_3$  y  $\varepsilon_3$ . Cada sistema de ecuaciones lineales e inhomogéneas pueden resolverse numéricamente para determinar el campo  $\Psi_n^{(j)}$  y su derivada normal  $\Phi_n^{(j)}$ , con las que calculamos la reflectancia y transmitancia del sistema.

### Ecuaciones de Fresnel

El análisis de las ecuaciones de Fresnel aplicado a sistemas multicapas es extenso, debido a que las condiciones de frontera involucradas en todas las interfaces conducen a un número elevado de ecuaciones. Es por ello, en esta parte sólo daremos una breve descripción de las ecuaciones utilizadas para el estudio de los sistemas propuestos. Para el sistema de una interfaz simple los coeficientes de Fresnel, se definen como los cocientes entre las amplitudes de los campos eléctricos de las ondas reflejadas y transmitidas, y las amplitudes del campo de la onda incidente, en cada dirección, es decir

$$r = \left( \frac{E_{0r}}{E_{0i}} \right)$$

y

$$t = \left( \frac{E_{0t}}{E_{0i}} \right). \quad (21)$$

Para el caso donde  $\mathbf{E}$  es perpendicular  $\perp$  al plano de incidencia (polarización TE ) los coeficientes están dados como

$$r_{\perp} = \frac{n_0 \cos \theta_i - n_1 \cos \theta_t}{n_0 \cos \theta_i + n_1 \cos \theta_t}, \quad (22)$$

$$t_{\perp} = \frac{2n_0 \cos \theta_i}{n_0 \cos \theta_i + n_1 \cos \theta_t}, \quad (23)$$

donde  $n_0$  y  $n_1$ , corresponde al índice de refracción del primer medio y del segundo medio, respectivamente.

Para el caso donde  $\mathbf{E}$  es paralelo  $\parallel$  al plano de incidencia (polarización TM), tenemos

$$r_{\parallel} = \frac{n_1 \cos \theta_i - n_0 \cos \theta_t}{n_0 \cos \theta_t + n_1 \cos \theta_i}, \quad (24)$$

$$t_{\parallel} = \frac{2n_0 \cos \theta_i}{n_0 \cos \theta_t + n_1 \cos \theta_i}. \quad (25)$$

Teniendo en cuenta las Ecs. (22-25) podemos obtener los coeficientes de reflexión y transmisión para sistemas de dos o más interfaces [10]. En este trabajo, sólo daremos los coeficientes del sistema formado por tres interfaces (Fig. 1). Así, para ambas polarizaciones se obtienen expresiones formalmente idénticas, dadas por las siguientes ecuaciones

$$r = \frac{r_{01} + r_{123} e^{i2\phi_1}}{1 + r_{01} r_{123} e^{i2\phi_1}} \quad (26)$$

y

$$t = \frac{t_{01} t_{123} e^{-i\phi_1}}{1 + r_{01} r_{123} e^{i2\phi_1}}, \quad (27)$$

donde

$$r_{123} = \frac{r_{12} + r_{23}e^{i2\phi_2}}{1 + r_{12}r_{23}e^{i2\phi_2}} \quad \text{y} \quad t_{123} = \frac{t_{12}t_{23}e^{i\phi_2}}{1 + r_{12}r_{23}e^{i2\phi_2}}$$

son los factores de reflexión y transmisión, respectivamente del sistema formado por los medios 2 y 3. En la cual,  $r_{ij}$  y  $t_{ij}$  son los coeficientes de reflexión y transmisión en las interfaces y  $\phi_i$  es la fase del haz. Finalmente, cabe mencionar que las Ecs. (22-27) son las que hemos utilizado para reproducir los resultados analíticos de este trabajo.

## RESULTADOS

En esta parte se mostrarán los resultados obtenidos de los cálculos numéricos y analíticos de la respuesta óptica mediante el cálculo de la reflectancia y transmitancia como función del ángulo de incidencia de los sistemas multicapas, que están compuestos por medios dieléctricos y metálicos.

### Sistemas de multicapas con medios dieléctricos

Primero analizaremos el sistema de una interfaz simple, posteriormente analizaremos los sistemas más complejos de tres y cuatro interfaces. Estos sistemas son iluminados con un haz incidente (Onda Gaussiana), con longitud de onda de  $1 \mu\text{m}$ . En la Fig. 2(a) se muestra la reflectancia y transmitancia del sistema bajo la polarización TE que está formado por una interfaz entre dos medios con índices de refracción  $n_0 = 1$  y  $n_1 = 1.50$  (correspondientes al aire (medio de incidencia) y vidrio (medio de transmisión), respectivamente) y con longitud  $l = 37 \mu\text{m}$ . En la Fig. 2(c) se muestra la reflectancia y transmitancia con polarización TM correspondiente al mismo sistema. En las Figs. 2(b) y (d) se muestran el balance de energía asociado a cada polarización.

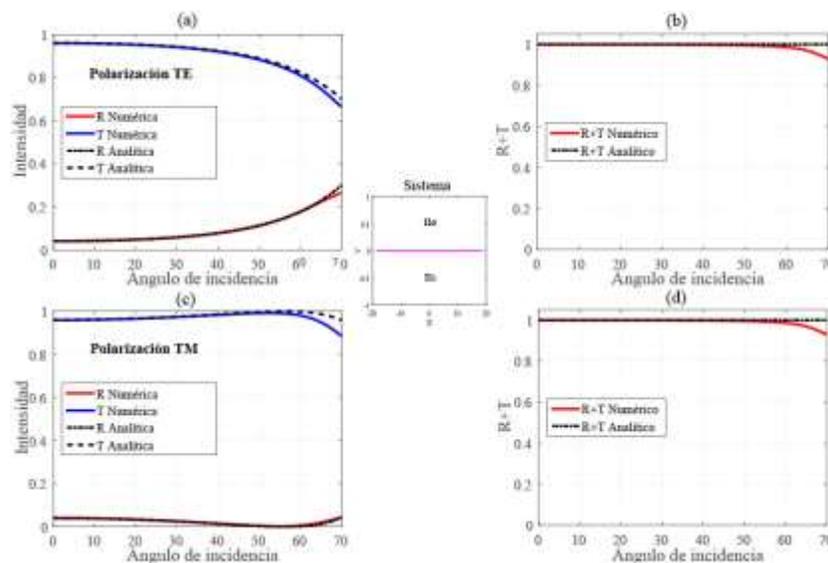


Figura 2. (a) Reflectancia ( $R$ ) y Transmitancia ( $T$ ) para una interfaz entre aire y vidrio ( $n_0 = 1$  y  $n_1 = 1.50$ , respectivamente) con (a) polarización TE y con (c) polarización TM. En (b) y (d), se muestran el balance de energía correspondiente a cada polarización.

Ahora mostraremos la respuesta óptica de un sistema que está formado por tres interfaces entre cuatro medios dieléctricos con índices de refracción  $n_0 = 1$ ,  $n_1 = 1.50$ ,  $n_2 = 3.681$  y  $n_3 = 1$ . La

longitud de las interfaces es de  $l = 80 \mu\text{m}$  y una distancia de separación entre las interfaces de  $d = 4 \mu\text{m}$ . En la Fig. 3(a) se muestra la reflectancia y transmitancia del sistema bajo la polarización TE.

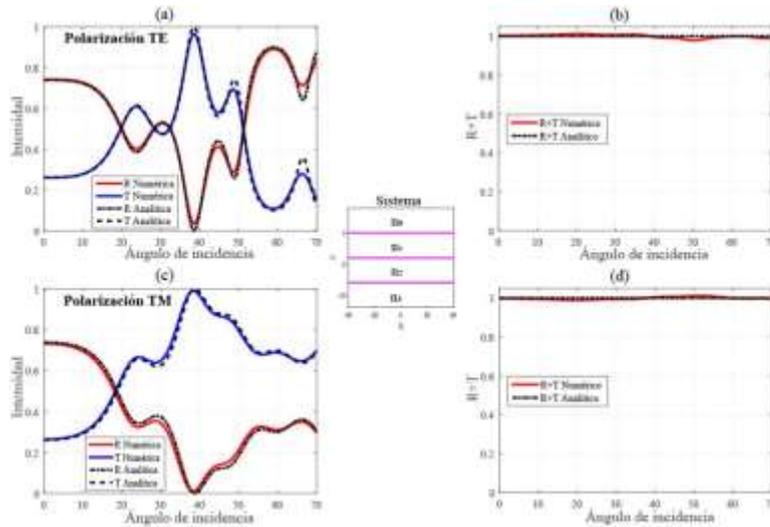


Figura 3. (a) Reflectancia ( $R$ ) y Transmitancia ( $T$ ) para un sistema formado por tres interfaces compuesto por aire, vidrio, silicio y aire ( $n_0 = 1$  y  $n_1 = 1.50$ ,  $n_2 = 3.681$  y  $n_3 = 1$ , respectivamente) con (a) polarización TE y con (c) polarización TM. En (b) y (d), se muestran el balance de energía correspondiente a cada polarización.

En la Fig. 3(c) se muestra la reflectancia y la transmitancia del sistema bajo la polarización TM. En las Figs. 3(b) y (d) se muestran el balance de energía correspondiente a cada polarización.

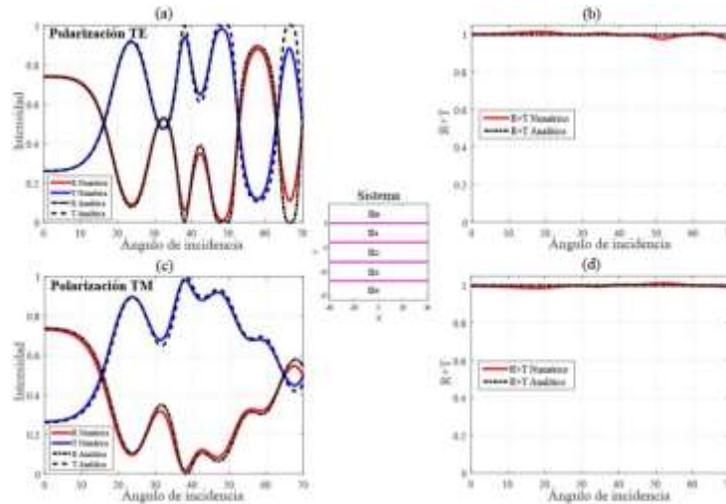


Figura 4. (a) Reflectancia ( $R$ ) y Transmitancia ( $T$ ) para un sistema formado por cuatro interfaces compuesto por aire, vidrio, silicio, vidrio y aire ( $n_0 = 1$  y  $n_1 = 1.50$ ,  $n_2 = 3.681$ ,  $n_3 = 1.50$  y  $n_4 = 1$ , respectivamente) con (a) polarización TE y con (c) polarización TM. En (b) y (d), se muestran el balance de energía correspondiente a cada polarización

Por último, analizaremos un sistema más complejo que está formado por cuatro interfaces entre cinco medios dieléctricos con índices de refracción  $n_0 = 1$ ,  $n_1 = 1.50$ ,  $n_2 = 3.681$ ,  $n_3 = 1.50$  y  $n_4 = 1$ . De manera similar al caso anterior, se consideró los mismos parámetros de longitud de las interfaces y de distancia de separación entre las interfaces. El resultado de la Fig. 4(a) corresponde a la polarización TE. En la fig. 4(c) se muestra el resultado con la polarización TM. En las Figs. 4(b) y (d) se muestran el balance de energía asociado a cada polarización.

### Sistemas de multicapas metálicas de 1 y 2 interfaces

Ahora se analizará la respuesta óptica de los sistemas multicapas compuesto por medios metálicos. A continuación se muestran los resultados obtenidos del cálculo de la reflectancia como función del ángulo de incidencia, considerando una longitud de onda  $\lambda = 0.633 \mu\text{m}$  tanto para la polarización s como para la p. En la Fig. 5(a) se muestra el perfil de un sistema de multicapas que está formado por dos medios con índices de refracción  $n_1 = 1.0$  (aire) y  $n_2 = 0.14374 + i3.8097$  (Ag) separados por una interfaz de longitud  $L = 12\pi$ . En la Fig. 5(b) se muestran los resultados numéricos y analíticos del sistema multicapa.

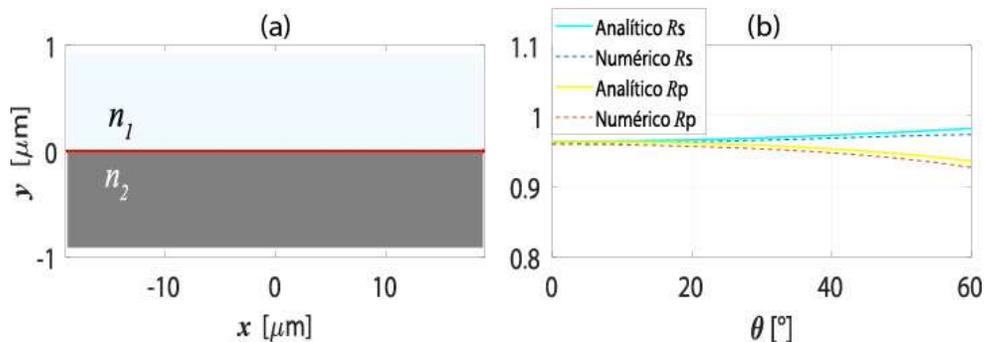


Figura 5. (a) Perfil del sistema multicapa formado por dos medios con índices de refracción  $n_1 = 1.0$  (aire) y  $n_2 = 0.14374 + i3.8097$  (Ag). (b) Reflectancia ( $R$ ) obtenido por los métodos numéricos y analíticos para las polarizaciones s y p.

En la Fig. 6(a) se muestra el perfil de un sistema multicapa que está formado por tres medios con índices de refracción  $n_1 = 1.0$  (aire) y  $n_2 = 0.14374 + i3.8097$  (Ag) y  $n_3 = 1.0$  con espesor  $d_l = 0.01 \mu\text{m}$  con longitud de las interfaces  $L = 12\pi$ . En la Fig. 6(b) se muestran los resultados numéricos y analíticos del sistema multicapa.

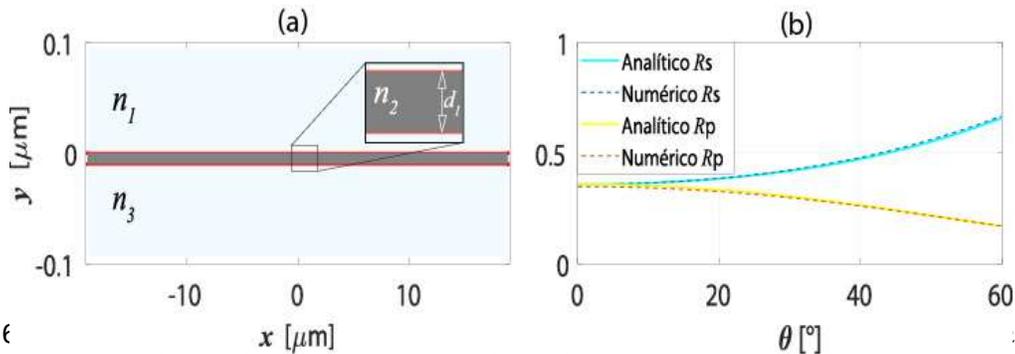


Figura 6 (a) Diagrama de un sistema de tres capas con índices de refracción  $n_1$  (aire),  $n_2 = 0.14374 + i3.8097$  (Ag) y  $n_3 = 1.0$ . (b) Reflectancia ( $R$ ) obtenido por los métodos numéricos y analíticos para las polarizaciones s y p.

Para modelar numéricamente el metal hemos usado el modelo de Drude Lorentz con los que se obtiene el valor del índice de refracción de la plata (Ag).

Finalmente, podemos observar que todos los resultados numéricos presentados anteriormente fueron comparados con los cálculos analíticos, mostrando una buena correspondencia entre ellos. Esto nos asegura la validez del método integral utilizado.

## CONCLUSIONES

En este trabajo hemos mostrado un estudio numérico de la respuesta óptica de sistemas multicapas. De acuerdo con los resultados obtenidos se logró observar que el sistema de tres interfaces con medios dieléctricos, en ángulos alrededor de  $40^\circ$  se tiene una transmisión casi completa en ambas polarizaciones, lo que implica que para estos ángulos habrá poca reflectancia. El error relativo en el cálculo de la reflectancia y transmitancia para la polarización TE es aproximadamente de 3%, mientras que el error en el cálculo para la polarización TM, es alrededor de 1%. Por otro lado, para el sistema de cuatro interfaces se obtuvo mayor transmisión del haz en casi todos los ángulos de incidencia. El error obtenido es alrededor de 3% para la polarización TE y 2% para la polarización TM. Para el sistema de una y dos interfaces con medios metálicos, lo hemos tratado como un medio absorbente y se ha modelado con el modelo de Drude Lorentz obteniendo el resultado esperado en la teoría. Los cálculos numéricos que hemos realizado se ajustan correctamente a los resultados analíticos para ambas polarizaciones, lo cual se muestra en el balance de energía con errores relativos pequeños. Finalmente, cabe resaltar que el análisis numérico que hemos realizado nos permite conocer las propiedades ópticas de los materiales en los dieléctricos y metales, así como encontrar rangos de frecuencias o ángulos de incidencia en donde se tiene una reflexión máxima o transmisión completa para el estudio de nuevas aplicaciones.

## BIBLIOGRAFÍA

1. Brongersma, M. L., and Kik, P. (2007). *Surface plasmon nanophotonics*. Springer Series in Optical Sciences, Dordrecht.
2. Dahlin, A. B. (2012). *Plasmonic Biosensors*. Los Press, Montfort University, Leicester, United Kingdom.
3. Masson, J. F. (2017). Surface Plasmon Resonance Clinical Biosensors for Medical Diagnostics. *ACS Sensors*, 2(1): 16-30.

4. Knoll, W. (1998) Interfaces and thin films as seen by bound electromagnetic waves. *Annual, Review of Physical Chemistry*, 49.
5. Leong, H. S., Guo, J., Lindquist, R. G., and Liu, Q. H. (2009). Surface plasmon resonance in nanostructured metal films under the Kretschmann configuration. *Journal of applied physics*, 106: 124314.
6. Pérez, H. I., Valencia, C. I., Méndez, E. R. y Sánchez-Gil, J. A. (2009). On the transmisión of diffuse light through thick slits. *JOSA A*, 26(4): 909-918.
7. Jackson, J. D. (1999). *Classical Electrodynamics*. John Wiley and Sons, New York, 1th edition.
8. Rakic, A. D., Djuricic, A. B., Elazar, J. M., and Majewski, M. L. (1998). Optical properties of metallic films for vertical-cavity optoelectronic devices. *Applied Optics*, 37:22.
9. Mendoza-Suaréz, A., Villa-Villa, F., and Gaspar-Armenta, J. A. (2006). Numerical method based on the solution of integral equations for the calculation of the band structure and reflectance of one and two dimensional photonic crystals. *JOSA B*, 23:2249-2256.
10. Born, M., Wolf, E. (1999). *Principles of Optics*. Cambridge University Press, New York, 7th edition.

## ESTUDIO DE LA TRANSMISIÓN ÓPTICA DE LAS PREFORMAS OFTÁLMICAS A LA EMISIÓN DE LUZ DE LAS PANTALLAS DE LOS TELÉFONOS

Armando Gómez Vieyra, Mauro Sergio Hernández Aguilar, Sonia Hernández Mota

División de Ciencias Básicas e Ingeniería, Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Azcapotzalco  
agyte@azc.uam.mx

### RESUMEN

En años recientes, el desarrollo de los materiales oftálmicos se ha incrementado, introduciendo a las lentes oftálmicas nuevas características que se adapten a las necesidades actuales, permitiendo a los consumidores adquirir productos distintos a los tradicionales CR-39 y policarbonato. La propaganda comercial exalta las cualidades especiales de los productos y sus ventajas respecto a la oftálmica tradicional, como son bloqueo de la luz azul, bloqueo del infrarrojo, disminución de reflexiones, etc. En este sentido, se evalúan algunos de los productos de preformas oftálmicas de la empresa Lens Best S.A. de C.V., tales como Alta Force, Bluefree, Blue-Red Triple Protection, CR-39, High Index, Photogrey, Policarbonato AR y Policarbonato Puro, en un arreglo de espectroscopía de uso común en nuestra institución, a fin de valorar sus beneficios al ser usadas frente a las pantallas de los teléfonos inteligentes. Primero, se evaluaron las oftálmicas con respecto a una lámpara MSR700 que emite desde los 350 nm hasta los 880 nm. Con lo cual se obtuvo una caracterización general de la transmisión en luz IR-Vis-UV de las preformas oftálmicas. Basados en el trabajo "Estudio de la Emisión Óptica de los Teléfonos Inteligentes", presentado en este mismo evento, donde se caracterizaron las emisiones de color puro de celulares preseleccionados, en la investigación presente se selecciona el modelo Xiaomi Redmi Note 7®, que presenta una región de emisión de los 410 nm (violeta) a los 725 nm (rojo), con tres áreas de mayor intensidad. Se emplea la aplicación Pure Solid Color Wallpaper ® (ver 1.2) desarrollado por VALVRAVE1234 para generar una emisión completa de la pantalla en blanco, la cual fue nuestra referencia. El teléfono se configuró con el máximo brillo posible, deshabilitando la opción de brillo automático, y el mayor tiempo de espera para evitar el bloqueo de pantalla, evitando así variaciones en la intensidad de emisión de las pantallas y permitiendo que el espectrómetro realizara la medición completa. Como resultado de los análisis, las preformas Alta Force, Bluefree y Blue Red Triple Protection, logran bloquear una pequeña parte de la emisión en la región del violeta del celular y la Blue Red Triple Protection logra una reducida mitigación de las componentes en el infrarrojo. Las preformas CR-39, High Index, Policarbonato puro y Policarbonato AR no logran ninguna mitigación importante de la luz emitida por la pantalla del celular. Photogrey puede mitigar drásticamente la emisión al oscurecerse, pero únicamente a una intensidad alta. Es importante señalar que la disminución de la luz UV reduce el riesgo de generar cataratas y alterar el ciclo circadiano; mientras que la disminución de radiación infrarroja reduce los malestares propios del síndrome de ojo seco. Es importante resaltar que en la vida diaria se colocan micas de protección a las pantallas de los celulares, que pueden contribuir a mitigar las emisiones de los teléfonos. Por lo que las diversas tecnologías en las preformas oftálmicas sí pueden llegar a beneficiar a los usuarios que usan regularmente teléfonos inteligentes y más cuando ya presentan alguna patología como síndrome de ojo seco.

### INTRODUCCIÓN

La evolución de la tecnología en los teléfonos celulares ha promovido un gran cambio tecnológico, al grado de tener una computadora, centro de entretenimiento, agenda y teléfono en la palma de nuestra mano. En este mismo intervalo de tiempo, las costumbres y los apegos a los teléfonos inteligentes se ha vuelto indispensables para un gran sector de la población mundial en su vida cotidiana, influyendo en un cambio social y psicológico de la población. A la par, las tecnologías de las lentes oftálmicas han venido evolucionando, en principio con el fin de abaratar costos y terminar con la dependencia a los procesos artesanales de fabricación de lentes oftálmicas; logrando introducir polímeros y plásticos especializados que han sustituido el vidrio oftálmico, aumentado la

producción, abaratando costos, eliminando sobre pesos y proporcionando mayor robustez al producto final. Además, la evolución de los nuevos materiales y películas delgadas han proporcionado cualidades ópticas a las gafas oftálmicas, como películas antirreflejantes, eliminación de cantidades de luz polarizada o absorción de ciertos colores (anchos de banda). Por lo que el mercado de las lentes oftálmicas ha evolucionado al grado de tener gran variedad de ofertas desde diseño, funcionalidad, precio, etc. El objetivo de este trabajo es estudiar cómo se comporta esta oferta de lentes oftálmicas ante la luz que emana de los celulares inteligentes.

## TEORÍA

Las lentes oftálmicas se han utilizado para corregir defectos refractivos en los ojos desde hace muchos siglos. Inicialmente fueron fabricados con vidrio; sin embargo, debido a su alto costo, la complejidad de fabricación y su fragilidad, se ha optado por el uso de materiales más viables para su producción. En la actualidad los materiales más utilizados son el Alilo Diglicol Carbonato (CR-39) y el policarbonato. Según las características ópticas que describen a los materiales de manera general, el CR-39 tiene un índice de refracción de 1.50 y un número de Abbe de 59, mientras que los lentes estándar de policarbonato tienen un índice de refracción igual a 1.59 y un número de Abbe de 30, lo cual produce una alta aberración cromática. Otras propiedades cualitativas notables del CR-39 son: su ligereza, la mayor transparencia, resistencia al impacto y al empañamiento en comparación al vidrio, además, es adaptable para casi todas las ametropías. Por otro lado, el policarbonato brinda protección a la radiación ultravioleta y es más liviano, delgado y resistente al impacto que el CR-39, sin embargo, sin un tratamiento de endurecimiento, estas lentes tienden a rayarse y frecuentemente sufren fracturas internas.

La gran mayoría de los dispositivos de iluminación artificial emiten en las longitudes de onda más cercanas al color azul, lo cual implica un mercado creciente para las lentes con protección contra esta luz, esto se ha logrado modificando su estructura original para obtener lentes antirreflectantes, dopando al material o agregando películas delgadas especializadas.

## METODOLOGÍA

Para realizar estas mediciones se empleó un monocromador automatizado controlado por GPIB, que en el puerto de salida tiene un tubo fotomultiplicador alimentado a 601 V para todas las mediciones. La medición y digitalización se realiza con electrómetro Keythley, también controlado por un puerto GPIB, que se encuentra controlado por el programa tracq32 (Ver 3.2) de la empresa Oriel Instrument, del cual obtenemos los datos en formato ".txt" para su análisis. El diagrama general se muestra en la Figura 1.

El procesamiento de datos se hizo con el programa SciDAVis (Ver 1.26®) de Free Software Foundation®. El software del monocromador se fija a una configuración que va de los 300 nm a los 800 nm, con un muestreo de 1 nm.

Primero se caracteriza una lámpara MSR700 (que será nuestra referencia) y después la transmisión de la luz producida por las preformas usando esta fuente de iluminación, con el objetivo de verificar las características que menciona el fabricante de cada una de ellas.

Las preformas evaluadas son de la marca LensBest (<http://www.lens-best.com.mx/>), que la misma empresa nos facilitó para ser evaluadas, en sus modelos: Alta Force, Bluefree, Blue Red Triple Protection, CR-39, High Index, Photogrey, Policarbonato AR y Policarbonato puro.

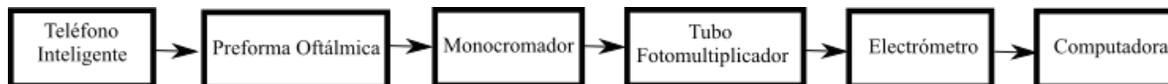




Figura 1. (Superior) Diagrama a bloques del arreglo experimental. (Inferior) Foto del montaje experimental.

A continuación, se procedió a evaluar cada una de las emisiones de las pantallas de celular, para lo cual se proyecta un fondo blanco obtenido a partir de la aplicación Pure Solid Color Wallpaper® (ver 1.2), desarrollado por VALVRAVE1234. Además, se configura con el máximo brillo posible, se deshabilita la opción de brillo automático y se habilita el mayor tiempo de espera para el bloqueo de pantalla, con lo cual se procura evitar variaciones en la intensidad de emisión de las pantallas.

Después de observar los resultados de la siguiente sección, se elige solo un teléfono para el análisis de las preformas: el Xiaomi Redmi Note 7®, proyectando una pantalla en color blanco, debido a la cercanía de los espectros de emisión de todos los modelos y a que su espectro de emisión es el que está más corrido hacia el ultravioleta.

En cada evaluación, se mide la pantalla del teléfono Xiaomi. A continuación, se coloca cada preforma oftálmica entre la pantalla del teléfono y la rendija de entrada del monocromador. Las configuraciones del teléfono, del monocromador y del software se mantienen para tener datos comparativos y válidos.

## RESULTADOS

La Figura 2 presenta la emisión de la lámpara MSR700, con los espectros de transmisión de las distintas preformas oftálmicas, donde claramente se observan tres ópticas que mitigan las componentes de ultravioleta y violeta (350nm-420nm), estas son las BlueFree, Blue Red Triple Protection y la Alta Force. Además, se observa una atenuación en la región del rojo al infrarrojo cercano (700 nm-880 nm) por parte de la preforma blue Red triple Protection.

La Figura 3 muestra los espectros de emisión de los celulares Huawei Y9 2019, iPhone 5s, Motorola G6-Plus, Samsung Grand Prime y Xiaomi Redmi Note 7. Estos fueron equipos en uso cotidiano por algunos de los estudiantes encuestados del trabajo “Estudio de los hábitos en el uso de tecnologías de comunicación inteligentes en la población de nuevo ingreso a estudiar ingeniería en la Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Azcapotzalco”.

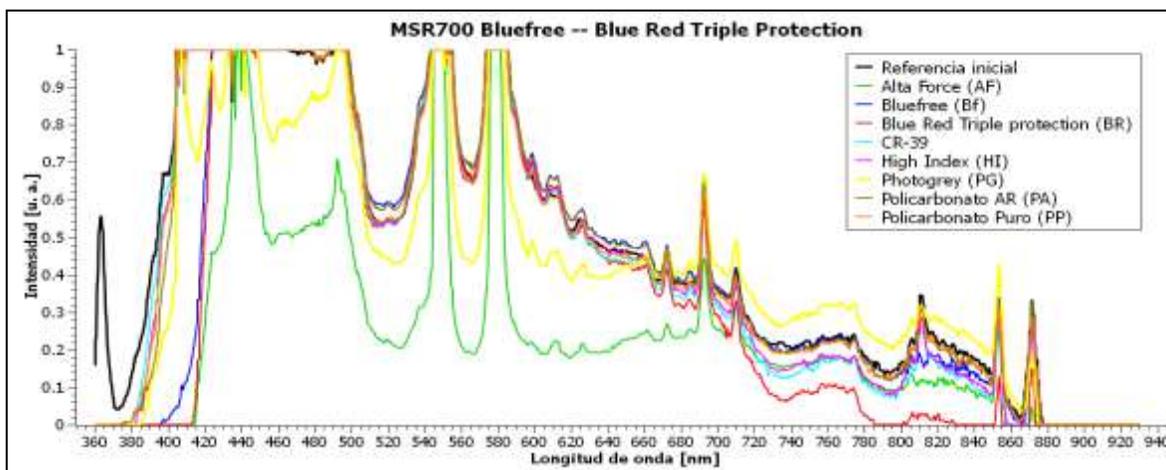


Figura 2. Emisión de la lámpara MSR700 y la transmisión de las preformas evaluadas.

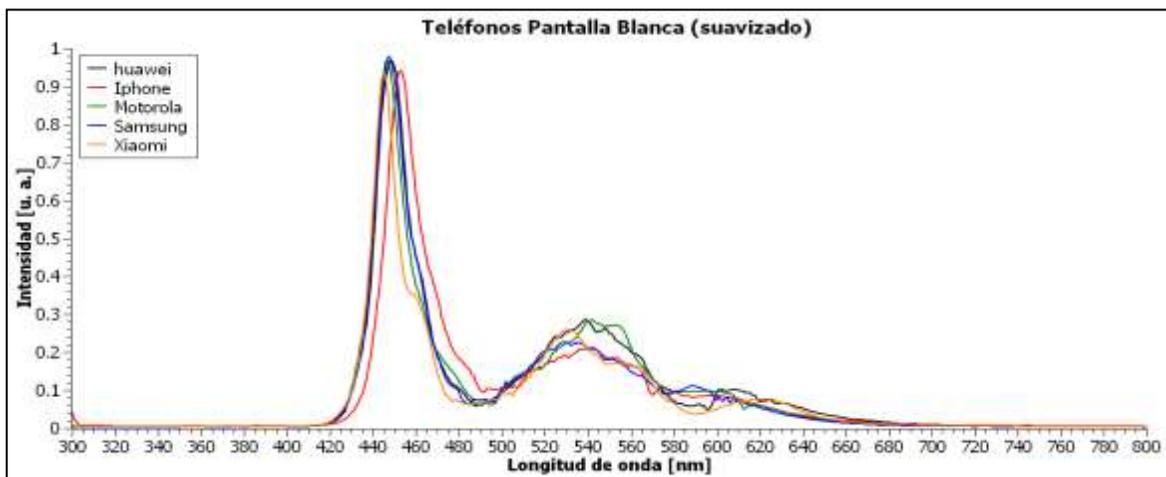


Figura 3. Emisión suavizada de los teléfonos con proyección de pantalla blanca

A partir de la repuesta de cada una de las emisiones, se eligió el equipo Xiaomi como fuente para la evaluación de las preformas, debido a que contiene la mayor cantidad de longitudes de luz.

La Figura 4 muestra la emisión transmitida a través de la preforma Alta Force. En la primera región se logra atenuar el espectro violeta. La diferencia entre la emisión del teléfono con la emisión transmitida por la preforma es prácticamente imperceptible en el resto del espectro, salvo algunas regiones específicas.

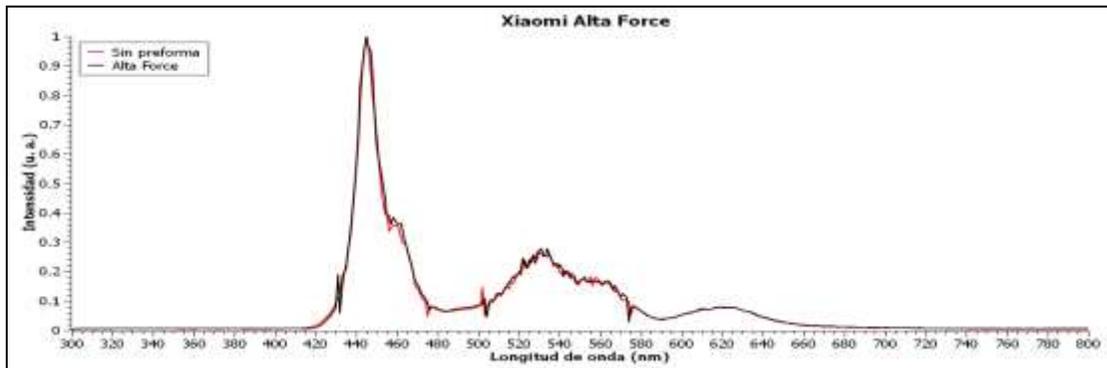


Figura 4 Emisión Xiaomi con preforma Alta Force

La emisión transmitida por la preforma Blue Free, Figura 5, muestra que la preforma no altera significativamente las componentes iniciales de la emisión del dispositivo evaluado. Es notorio que a partir de los 500 nm hasta los 575 nm hay una diferencia en cantidad de radiación transmitida y en todo el resto del espectro evaluado no se presenta una atenuación de intensidad transmitida significativa.

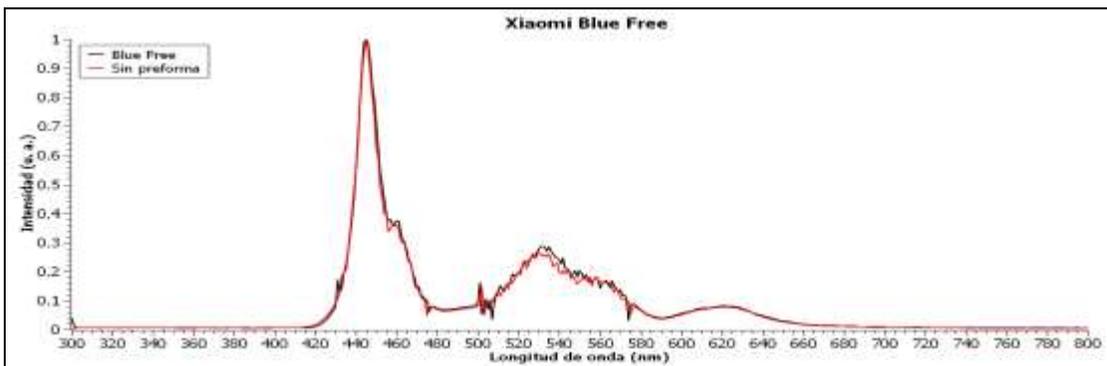


Figura 5. Emisión Xiaomi con preforma Blue Free.

La evaluación de la preforma Blue-Red, Figura 6, muestra el comportamiento de la emisión al atravesar la preforma. La preforma absorbe cierta cantidad de luz en todo el espectro, no obstante, en la región de los 500 nm a los 570 nm es más notorio. En todo el espectro se conserva el mismo comportamiento del espectro de referencia.

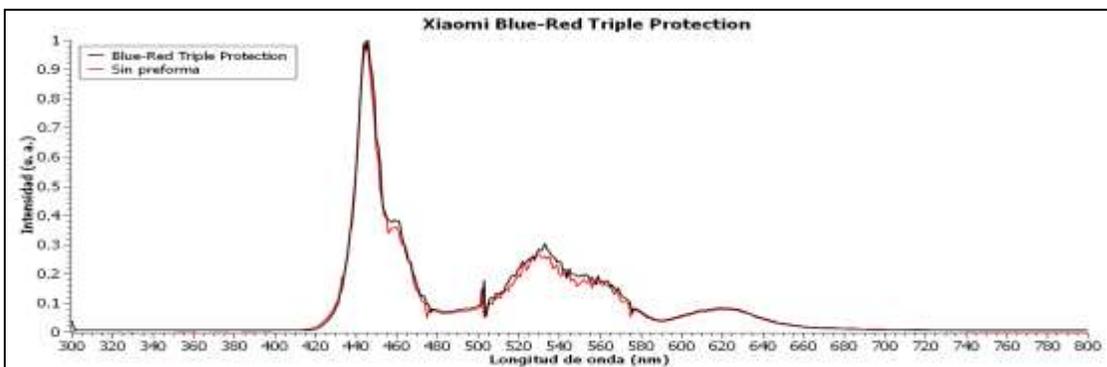


Figura 6. Emisión Xiaomi con preforma Blue-Red Triple Protection.

De manera similar, la Figura 7 muestra la gráfica de transmisión de la preforma de policarbonato puro y la fuente de luz de referencia. La preforma absorbe cierta cantidad de luz en todo el espectro, en la región de los 500 nm a los 570 nm es más notorio, aunque en todo el espectro se conserva el mismo comportamiento espectro referencia.

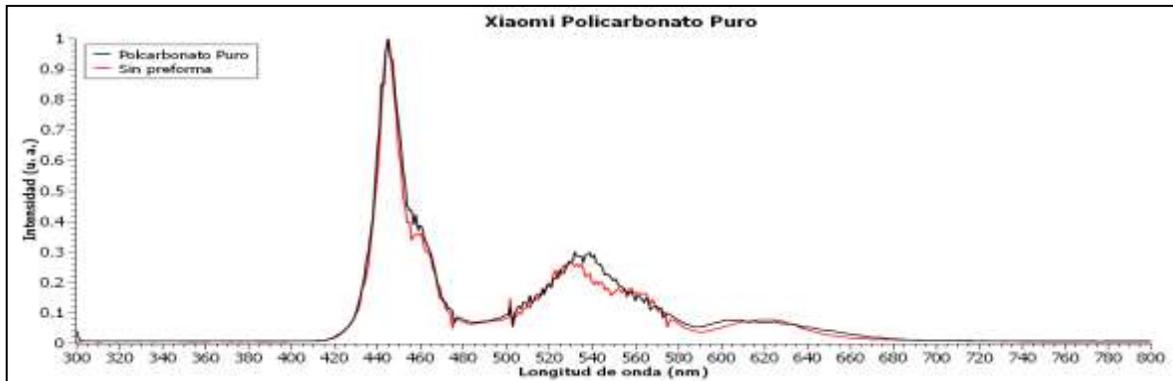
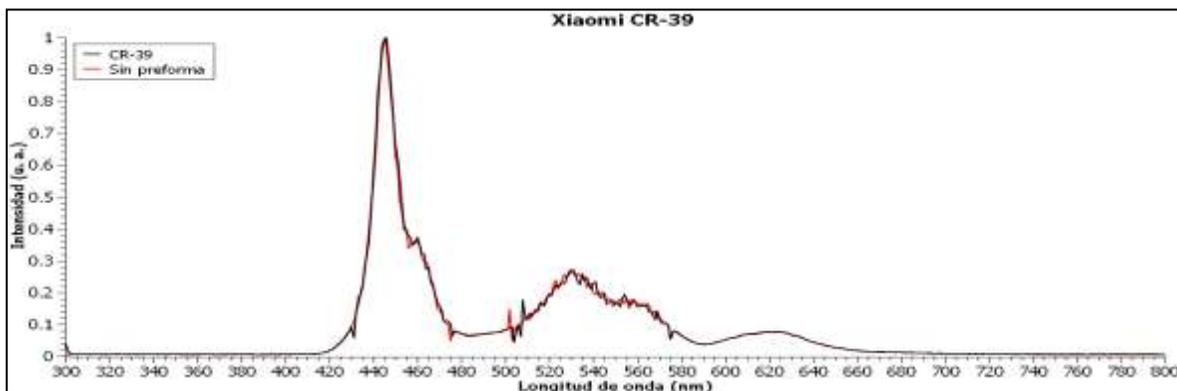
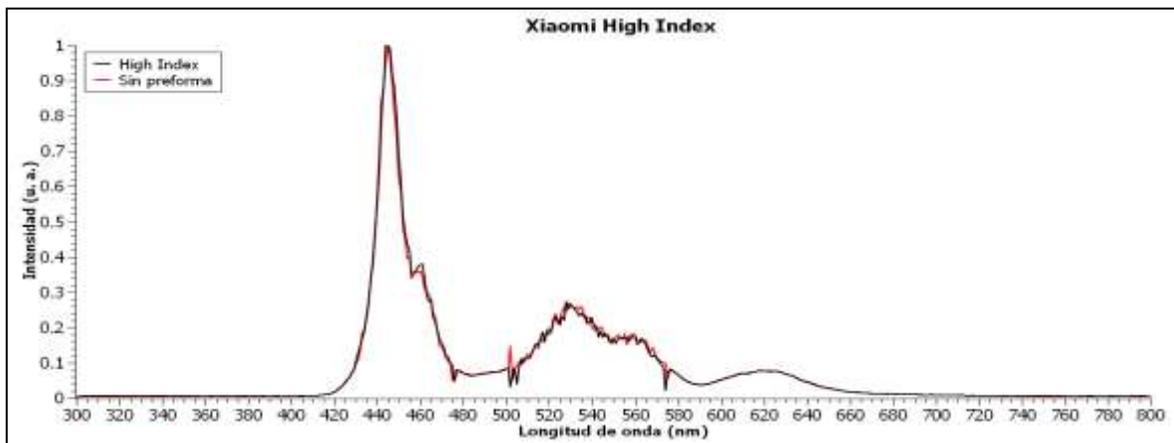


Figura 7. Emisión Xiaomi con preforma Policarbonato Puro.

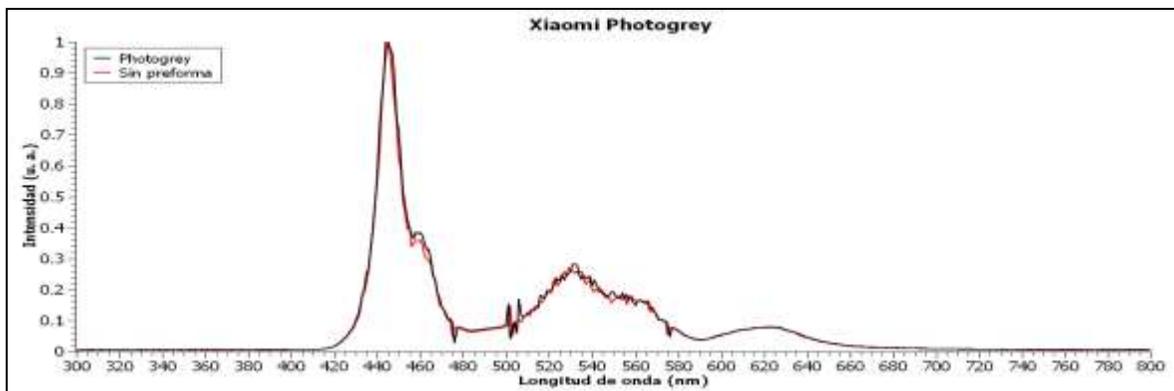
En la Figura 8, se presentan los resultados de la evaluación de la preforma CR-39, High Index, Photogrey y Policarbonato AR, donde se observa que ninguna de ellas logra bloquear o atenuar significativamente la emisión de la pantalla del teléfono celular. Por lo cual solo logran atenuar levemente la luz que emana de estos dispositivos.



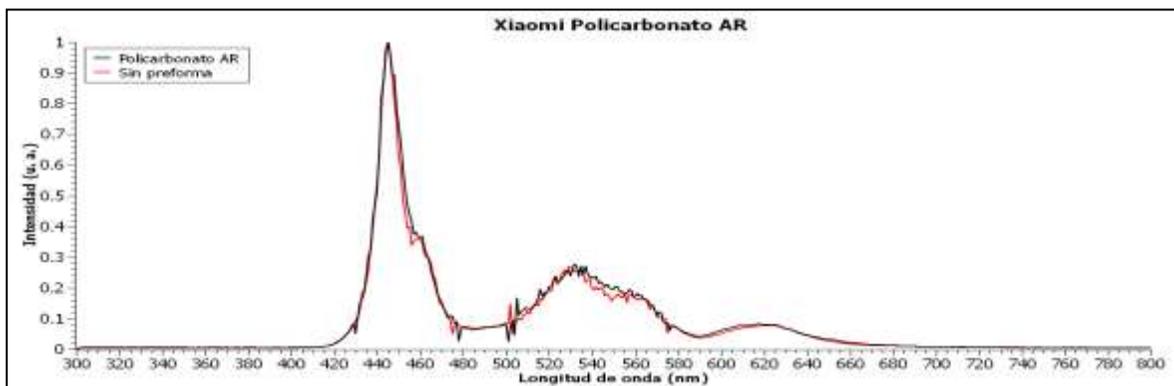
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 8. Gráficos de la luz emitida por el celular Xiaomi y la transmisión de luz en (a) la preforma CR-39, (b) la preforma High Index, (c) la preforma Photogrey y (d) la preforma Policarbonato AR.

Al considerar la respuesta del ojo humano, debemos considerar la respuesta fotópica y mesópica, que son los ambientes donde los usuarios de las lentes oftálmicas desarrollan sus actividades. Cuando se trabaja con luz natural del sol, las componentes en el Ultravioleta son absorbidas por la atmósfera, componentes de UV cercano presentan intensidades mínimas. Sin embargo, al trabajar

con luz artificial, muchas de estas nuevas tecnologías presentan una gran cantidad de componentes en violeta y azul, que afectan a la larga el ritmo circadiano. Esto da pauta a firmar que los resultados presentados con la tecnología, Alta Force, Blue Free y Blue Red Free protegen un poco estos efectos y hacen que las actividades realizadas con luz artificial, que no sea a base de tecnología LEDs, sean más cómodas y seguras.

### CONCLUSIONES

Los hábitos personales en una población han cambiado con las nuevas tecnologías, modificando de gran manera los hábitos y formas de recreación en personas jóvenes. Todo esto debido al uso de teléfonos inteligentes, del mismo modo, las personas cada vez tienden a adquirir lentes oftálmicas, que presentan diferentes características eliminando componentes de luz azul y/o infrarroja. Sin embargo, para la tecnología actual de las pantallas de celular, la marca o modelo de lente oftálmica parece presentar las mismas ventajas debido al ancho de banda de emisión de estos dispositivos. Sin embargo, estos resultados no son la regla general para todas las fuentes de luz naturales o artificiales. Las características propias de algunas preformas mitigan o disminuyen el riesgo de alteraciones físicas (ojo seco y cataratas) y de la conducta (alteración del ciclo circadiano) en la población mexicana, por lo que los resultados presentados en este trabajo son de suma importancia al considerar qué ópticas oftálmicas son las más adecuadas para nuestra vida diaria.

### BIBLIOGRAFÍA

1. Y. Kuse, K. Ogawa, K. Tsuruma, M. Shimazawa, Hara H, "Damage of photoreceptor-derived cells in culture induced by light emitting diode-derived blue light", Sci. Rep., Vol. 4, 5223, 2014. <https://doi.org/10.1038/srep05223>
2. A. Wenzel, C. Grimm, M. Samardzija, C.E. Reme, "Molecular mechanisms of light-induced photoreceptor apoptosis and neuroprotection for retinal degeneration", Prog Retin Eye Res., Vol. 24, 2, 2005, pp. 275-306.
3. D.T. Organisciak, D.K. Vaughan, "Retinal light damage: mechanisms and protection", Prog Retin Eye Res., Vol 29, 2, 2010, pp. 113-34.
4. D. Malacara, "Handbook of visual optics: Instrumentation and Vision Correction", Pablo Artal, 2017, Capítulo 10.

## DISEÑO DE UN MODELO PREDICTIVO SOBRE LA DESERCIÓN ESCOLAR UTILIZANDO LA TEORÍA BAYESIANA

José Roberto Contreras Bárbara<sup>1</sup>, Alejandro Oviedo Valdivieso<sup>1</sup> y Keops Xeki García Galván<sup>1, 2</sup>

<sup>1</sup>Tecnológico Nacional de México campus Atitalaquia, <sup>2</sup>Centro de Bachillerato Tecnológico Industrial y de Servicios No. 218 "Julián Villagrán".

[jose.cb@atitalaquia.tecnm.mx](mailto:jose.cb@atitalaquia.tecnm.mx)

### RESUMEN

Actualmente una de las principales problemáticas en las instituciones educativas en nuestro país son los elevados índices de reprobación y de deserción escolar (Vera, et al., 2012), la Organización para la Cooperación y el Desarrollo Económico (OCDE) apunta que México ocupa uno de los primeros lugares en términos de deserción entre los países miembros de la organización. Por su parte, según datos del Instituto Nacional para la Evaluación de la Educación (INEE), reporta que en el primer año de educación en el Nivel Medio Superior (NMS) se presenta un alto índice de deserción escolar. Partiendo de que este problema es multifactorial, consideramos que posiblemente existe una relación entre el tipo de control administrativo y presupuestal de los planteles de nivel medio superior (presupuesto estatal, federal, autónomo o privado) y la deserción escolar. En este sentido, el objetivo de este trabajo es relacionar el tipo de control administrativo y presupuestal con la deserción escolar través de la aplicación de la metodología Bayesiana. La metodología consiste en tomar datos históricos sobre la deserción escolar en primer semestre de nivel medio superior del INEE, aplicar estadística Bayesiana para relacionarlo con el tipo de control administrativo y presupuestal. Con este estudio se determinó que existe relación entre ambas variables (control y deserción). Además, se argumenta que para este estudio la estadística Bayesiana presentó ventajas en contraste con la estadística clásica, ya que permiten la generación de hipótesis sobre el comportamiento de la población, sin necesidad de disponer de grandes muestras poblacionales. Se concluyó que existe una relación entre el tipo de plantel referido al control administrativo y presupuestal con la deserción. No obstante, se aclara que las causas de cada plantel seguirán siendo multifactoriales, pero con este referente es posible tener un antecedente estadístico basado en una metodología ampliamente aceptada, para tomar decisiones de valor y contribuir en buscar alternativas que contribuyan en reducir la deserción escolar.

### INTRODUCCIÓN

Actualmente una de las principales problemáticas en las instituciones educativas en nuestro país son los elevados índices de reprobación y de deserción escolar (Vera, et al., 2012). La misma Organización para la Cooperación y el Desarrollo Económicos (OCDE) apunta que en México existe un problema de deserción que se debería poner atención, ya que ocupa uno de los primeros lugares, entre los países miembros de la organización en cuanto a deserción escolar se refiere. El Instituto Nacional para la Evaluación de la Educación (INEE) reporta que uno de los principales factores de la deserción escolar es el bajo rendimiento académico obtenido por los estudiantes en alguna o varias asignaturas, mismo que los lleva a desertar. No obstante, de acuerdo con el INEE, se sabe que el bajo rendimiento académico es solo una de las causas y que el abandono escolar es multifactorial, y que cambia de acuerdo al nivel educativo, siendo el primer año del Nivel Medio Superior (NMS) cuando se reporta un alto índice de deserción, por ejemplo, para el ciclo 2015-2016, se reportó en ese nivel se alcanzó un 25.9 % (casi 700 mil del total de alumnos inscritos). Ante esta situación, con base a estadísticas sobre la deserción y pensado en la posible toma de decisiones por parte de las autoridades educativas, padres de familia y sociedad, se va a diseñar un modelo estadístico que nos permita identificar cuál será la deserción escolar en relación al tipo de control administrativo y presupuestal de algunas instituciones de nivel medio superior (INEE, 2018).

Para realizar modelos del comportamiento de un evento existen diferentes herramientas matemáticas, entre ellas destaca la estadística clásica y bayesiana, cada una con sus propias características y pueden ser aplicadas a diferentes situaciones, dependiendo del tipo de variables a estudiar. Diversos estudios, marcan que la estadística bayesiana se aplica en diversos sectores, por ejemplo, en la ingeniería, educación, toma de decisiones, entre otros (Congdon, 2003; Geman y Geman, 1984). Es útil cuando la información que existe sobre algún tipo de variable es limitada o en situaciones en donde los datos provienen de diferentes fuentes. Fue desarrollada por Tomas Bayes a mediados del siglo XVIII, quien introdujo el Teorema de Bayes que representa el uso de probabilidades condicionadas, donde un caso subsecuente a otro da información de un caso previo, siendo este principio la base de un enfoque estadístico. Aunque el teorema fue poco utilizado en los siglos posteriores a su postulación, en la actualidad su implementación ha tomado impulso y se aplica en distintos campos de la ciencia (Gutiérrez, 2013), lo que ha generado discusión sobre su uso desde un enfoque estadístico clásico o Bayesiano.

## TEORÍA

### a) Deserción escolar

Como se ha venido mencionando, la deserción escolar es un problema social, que no solo afecta al alumno desertor, sino que genera problemas sociales a largo plazo y delimita el crecimiento del país (INEE, 2010). Entiéndase deserción como el abandono del estudio en los niños y jóvenes en cualquier nivel educativo, primaria, secundaria, media superior o superior (Tinto, 1989). El INEE, (2010), argumenta que la deserción es un problema multifactorial y que las principales causas identificadas son la falta de recursos económicos y migración, falta de motivación y desintegración familiar, salud, adicciones, bajo rendimiento escolar, acoso escolar, *bullying*, planes y programas de estudio, estrategias de enseñanza, entre otros. En este sentido, buscando otras posibles causas que intervengan en la deserción escolar, es que tratamos de determinar una relación entre la deserción y el tipo de control administrativo y presupuestal del plantel.

### b) Diseños institucionales de la educación media superior en México

En México existen tres modelos educativos en la educación media superior, el bachillerato general, el bachillerato tecnológico y el profesional técnico, lo que genera que la diversidad institucional sea extensa, porque dentro de estos modelos existe amplia diversidad de escuelas basadas en estas modalidades educativas. A partir de los tres modelos educativos generales, se distinguen siete diferentes diseños institucionales según el tipo de control administrativo y presupuestal al que responden (INEE, 2010). El control administrativo y presupuestal en las instituciones de NMS que aplica en nuestro país se basa principalmente en instituciones con subsidio, federal, estatal, autónomo o privado o alguna combinación de éstos, lo cual genera que se puedan clasificar como centralizadas del gobierno federal, descentralizadas del gobierno federal, descentralizadas de las entidades federativas, centralizadas de las entidades federativas, autónomas, subsidiados, privadas o no especificadas, mismas que se visualizan en el acuerdo 442 (DOF, 2008).

### c) La teoría bayesiana

Fue desarrollada por Tomas Bayes a mediados del siglo XVIII, quien introdujo el Teorema de Bayes que representa el uso de probabilidades condicionadas, donde un caso subsecuente a otro da información de un caso previo, siendo este principio la base de un enfoque estadístico. Aunque el teorema fue poco utilizado en los siglos posteriores a su postulación, en la actualidad su implementación ha tomado impulso y se aplica en distintos campos de la ciencia (Gutiérrez, 2013), lo que ha generado discusión sobre su uso desde un enfoque estadístico clásico o Bayesiano.

La metodología bayesiana se basa en la interpretación subjetiva de la probabilidad, su punto fundamental es el Teorema de Bayes. Dentro de las aplicaciones de la teoría de la probabilidad se puede decir que el Teorema de Bayes es una expresión de probabilidad condicional que favorece cuando los datos son observables son aleatorios y tiene ciertas ventajas en aplicaciones específicas. Es útil cuando la información que existe sobre algún tipo de variable es limitada o en situaciones en donde los datos provienen de diferentes fuentes. La el teorema bayesiano se

específica para un modelo de probabilidad que contenga algún tipo conocimiento previo acerca de un parámetro a estudiar y para nuestro caso se ajusta con el conocimiento de los porcentajes de deserción en los diferentes planteles de educación media superior según su tipo de control administrativo y presupuestal. Se justifica su uso porque de este modo se acondiciona al modelo de probabilidad para realizar el ajuste de los supuestos. De este modo se asume que el fin de la estadística Bayesiana, es proporcionar una metodología para estudiar adecuadamente la información mediante análisis de datos y decidir de manera acertada sobre la mejor forma de actuar (Masa et al., 2011.). Los modelos bayesianos primordialmente incorporan conocimiento previo (comportamiento de la deserción para nuestro caso) para poder estimar modelos útiles dentro de un espacio muestral y de este modo poder estimar parámetros que provengan de la experiencia o de una teoría probabilística.

En este sentido se sabe que la estadística Bayesiana puede emplear información a priori, con base a conocimiento previo de algún evento o características y parámetros de la población como aleatorias, mismas que se utilizan para obtener las denominadas variables grados de "creencia". Estas variables son importantes, ya que permiten la generación de hipótesis sobre el comportamiento de la población, sin necesidad de disponer de grandes muestras poblacionales, lo que permite su implementación en diversas áreas (Gutiérrez, 2013).

En este sentido se menciona que la teoría Bayesiana se basa principalmente en los siguiente: cuando se tienen dos sucesos A y B donde  $P(B) > 0$ , se define la probabilidad condicionada de A dado B como:

$P(A|B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)}$ , interpretando dicha probabilidad como la probabilidad de A suponiendo que B haya ocurrido.

A priori, la probabilidad de A equivale al área de  $A \cap B$  más el área de  $A \cap \bar{B}$  dividido por el área del espacio muestral que es 1. Pero si observamos que B ha sucedido, entonces, el tamaño muestral se ha reducido a los sucesos elementales para los cuales B ha ocurrido y luego, la probabilidad de A es el área de  $A \cap B$  partido por el área de B.

Sea  $\{A_1, A_2, \dots, A_i, \dots, A_n\}$  un conjunto de sucesos mutuamente excluyentes y cuya unión es 1, y tales que la probabilidad de cada uno de ellos es distinta de cero. Sea B un suceso cualquiera del que se conocen las probabilidades condicionales  $P(B|A_i)$ . Entonces la probabilidad  $P(A_i|B)$  viene dada por el Teorema de Bayes:

$$P(A_i \vee B) = \frac{P(B \vee A_i)P(A_i)}{P(B)} = \frac{P(B \vee A_i)P(A_i)}{\sum_{j=1}^n P(B \vee A_j)P(A_j)}$$

Donde:

$P(A_i)$  son las probabilidades a priori.

$P(B|A_i)$  es la probabilidad de B en la hipótesis  $A_i$ .

$P(A_i|B)$  son las probabilidades a posteriori.

Esto se cumple siempre que (Ver anexo 2.2)

Por otra parte, y a manera de complemento, un diagrama de árbol es una representación gráfica de un suceso que consta de r pasos, donde cada uno de los pasos tiene un número finito de maneras de llevarse a cabo, es por esto que son especialmente útiles para resolver problemas con probabilidades condicionadas, gracias a esto ayuda a plantear con mayor facilidad el teorema de Bayes, ya que facilita la obtención de la probabilidad condicionada de un caso en específico.

Con este enfoque Bayesiano se realiza el diseño para realizar un modelo que presente la tendencia a desertar de los estudiantes de NMS con relación al tipo de control administrativo y presupuestal del plantel.

## PARTE EXPERIMENTAL

A partir de los tres modelos educativos generales descritos previamente y de los siete diferentes diseños institucionales según el tipo de control administrativo y presupuestal al que responden, se

reacomodan los datos en la siguiente tabla donde se muestra la clasificación y el porcentaje de la matrícula, información que nos será útil para determinar la deserción (INEE, 2010).

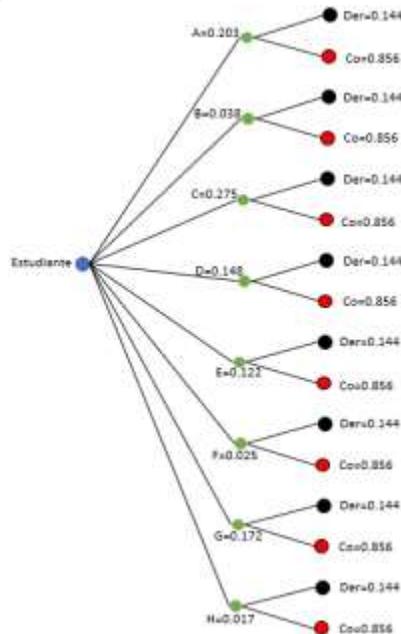
Tabla 1.1 Distribución matricular de escuelas de educación media superior según el tipo de control administrativo y presupuestal en el periodo 2009-2010.

Control administrativo y presupuestal	Matrícula %
Centralizadas del gobierno federal (A)	20.3
Descentralizadas del gobierno federal (B)	3.8
Descentralizadas de las entidades federativas (C)	27.5
Centralizadas de las entidades federativas (D)	14.8
Autónomas (E)	12.2
Subsidiados (F)	2.5
Privadas (G)	17.2
No especificado (H)	1.7

Fuente: INEE, 2010.

Como datos conocidos también se sabe que la eficiencia terminal para la Educación Media Superior (EMS) en el año 2010 fue de 62.0% (JUPEPE-SEP, 2009-2010), de manera que de cada 100 estudiantes que ingresan a la EMS, aproximadamente sólo 62 de ellos culminan en el tiempo establecido por los planes y programas de estudio, aspecto que influye en que la tasa de deserción sea del 14.4%.

Con base en los datos mencionados y haciendo uso de la metodología bayesiana se va a diseñar un modelo para calcular la probabilidad de que un alumno deserte en relación al tipo de control administrativo y presupuestal de su escuela de procedencia. Primero se realiza un árbol de probabilidad que busca definir las variables de que un alumno deserte, por ejemplo, se tienen como datos 8 tipos de planteles, marcados con las letras de la A a la H, cada uno con su porcentaje de matrícula, de ahí se considera que es posible que deserte si es que se utiliza el valor de la tasa de deserción (14.4%).



De esta manera teniendo como referente el diagrama de árbol, se calcula la probabilidad de que un

De esta manera teniendo como referente el diagrama de árbol, se calcula la probabilidad de que un estudiante elegido al azar deserte desarrollando el teorema de Bayes:

- 1 Alumno desertor del modelo tipo A:

$$p(A \cap Der) = p(A) * p(A/Der) = (0.203) * (0.164) = 0.033292$$

- 1 Alumno desertor del modelo tipo B:

$$p(B \cap Der) = p(B) * p(B/Der) = (0.038) * (0.144) = 0.005472$$

- 2 Alumno desertor del modelo tipo C:

$$p(C \cap Der) = p(C) * p(C/Der) = (0.275) * (0.144) = 0.0396$$

- 3 Alumno desertor del modelo tipo D:

$$p(D \cap Der) = p(D) * p(D/Der) = (0.148) * (0.139) = 0.020572$$

- 4 Alumno desertor del modelo tipo E:

$$p(E \cap Der) = p(E) * p(E/Der) = (0.122) * (0.144) = 0.017568$$

- 5 Alumno desertor del modelo tipo F:

$$p(F \cap Der) = p(F) * p(F/Der) = (0.025) * (0.144) = 0.0036$$

- 6 Alumno desertor del modelo tipo G:

$$p(G \cap Der) = p(G) * p(G/Der) = (0.172) * (0.157) = 0.027004$$

- 7 Alumno desertor del modelo tipo H:

$$p(H \cap Der) = p(H) * p(H/Der) = (0.017) * (0.144) = 0.002448$$

La probabilidad de que un alumno deserte  $p(Der)$  es del 14.95% ya que dicha probabilidad se mantiene constante para los tipos de modelo, también porque pertenece a la suma de probabilidades de deserción de cada tipo de modelo.

Conociendo que el alumno deserte, se relaciona la rama perteneciente con respecto a la probabilidad total:

- 8 Probabilidad de que el alumno desertor provenga del modelo tipo A:

$$p(A/Der) = p(A \cap Der) / p(Der) = (0.033292) / (0.149556) = 0.22260558$$

Correspondiente al 22% aproximadamente

## RESULTADOS

Como se puede apreciar en el apartado anterior, es posible determinar la probabilidad de que un alumno de nivel medio superior deserte, dependiendo del tipo de plantel en el que se encuentre inscrito. Estos tipos de modelos, son útiles desde un enfoque probabilístico, porque pueden tener ventajas en el tipo de aplicación, ya que se pueden exportar a un tipo de plantel en un lugar específico y que podría significar la toma de decisiones acertada. Por ejemplo, si se tuviera necesidad de investigar la probabilidad a que un estudiante de algún Centro de Estudios Tecnológicos Industrial y de servicios, desertara se podría aplicar el modelo anterior y a partir de eso se podrían buscar las causas raíz y posiblemente dar una solución.

## CONCLUSIONES

Se logró visualizar una relación entre el tipo de plantel referido al control administrativo y presupuestal con la deserción, lo que nos permite argumentar que si existe relación y que el

modelo sugerido es funcional. No obstante, se aclara que las causas de cada plantel seguirán siendo multifactoriales, pero con este referente es posible que las autoridades educativas, personal de cada plantel, padres de familia y alumnos tengan un antecedente estadístico basado en una metodología ampliamente aceptada, para tomar decisiones de valor y contribuir en buscar alternativas que contribuyan en reducir la deserción escolar.

## BIBLIOGRAFÍA

1. P. Congdon, "*Bayesian statistical modelling*". Wiley, West Sussex, 2003.
2. DOF, "Acuerdo número 442 por el que se establece el Sistema Nacional de Bachillerato en un marco diversidad"., Diario Oficial de la Federación (2008, 26 de septiembre). México: SEP, 2008.
3. S.Geman y D. Geman, "Stochastic Relaxation, Gibbs distributions and the Bayesian restoration of images". *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 6, 1984, pp. 721-741.
4. E. Gutiérrez, "El desarrollo de la estadística bayesiana". *Tema del mes*, 2013.
5. INEE, "*La educación media superior en México*". Informe 2010-2011. México: INEE, 2010.
6. INEE, "*Panorama Educativo de México 2017*". Indicadores del Sistema Educativo Nacional. Educación básica y media superior. México: autor. 2017.
7. L. Mesa, M. Rivera y J. Romero "Descripción general de la Inferencia Bayesiana y sus aplicaciones en los procesos de gestión". *La simulación al servicio de la academia*, edición: 2, 2011.
8. V. Tinto, "Definir la deserción: una cuestión de perspectiva". *Revista de la Educación Superior*, vol. 18, núm. 71, 1989. pp. 1-9.
9. J. A. Vera, D. Ramos, M. A. Sotelo, S. Echeverría, y D. M. Serrano. "*Factores asociados al rezago en estudiantes de una institución de educación superior en México*". *Revista Iberoamericana de Educación Superior*, 3(7), 2012, 41-56. doi: 10.22201/iisue.20072872e.2012.7.81.
10. UPEPE – SEP, "*Sistema Educativo de los Estados Unidos Mexicanos, principales cifras, ciclo escolar 2009 - 2010*". México: Unidad de Planeación y Evaluación de Políticas Educativas, 2009 – 2010.

## UNA SEGUNDA OPORTUNIDAD DE ATENCIÓN DE RIESGOS ANTE EVENTOS DICOTÓMICOS EN CONDICIONES ESTÁTICAS

Gabino Estevez Delgado<sup>1</sup>, Joaquín Estevez Delgado<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Facultad de Químico Farmacobiología, UMSNH, <sup>2</sup> Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, UMSNH.  
gabino.estevez@umich.mx

### RESUMEN

Una de las preocupaciones que enfrentamos ante escenarios complicados como puede ser una recesión, insolvencia para llevar a cabo acciones o las condiciones de los escenarios de una pandemia, son el hecho de no poder llevar a cabo acciones que puedan solventar riesgos. Siendo la gestión de riesgos una de las acciones que se recomienda tomar para toda empresa, de acuerdo con la norma ISO 31000, particularmente aquellas que mantienen una acreditación, el escenario de no tomar acciones para atender los riesgos identificados nos lleva a considerar eventos adversos e inclusive la pérdida de una certificación. Como es natural, no tomar acciones para contener un riesgo o inclusive transformarlo en un nivel más bajo es dejar al azar y con ello materializar la falta de atención en no conformidades y en consecuencia a acciones correctivas. En el presente trabajo se analiza el caso dicotómico, definiendo un escenario como el más desfavorable y el resto de los escenarios agrupados como un segundo escenario, en el que se estudia el caso en el que dadas las complicaciones no se puede atender el riesgo de llevar a cabo un objetivo, pero se observa que si se toman las acciones mínimas para mantener el nivel de riesgo hasta tener mejores condiciones para solventarlo una segunda oportunidad nos permite construir escenarios de atención, es decir, si la probabilidad de materializarse un evento adverso es  $p$ , bajo la evaluación de riesgos de acuerdo a la norma ISO 31000, y este valor se mantiene para un segundo periodo este conduce a una segunda oportunidad, aun cuando el resto de los escenarios se modifiquen.

### INTRODUCCIÓN

Una de las herramientas que actualmente nutren diversas normatividades de contención, como modelos de prevención de eventos adversos, son aquellas que involucran los modelos de gestión de riesgos, que si bien no son modelos nuevos, a raíz de las preocupantes tendencias ambientales han tomado un auge particular creado una serie de técnicas, primeramente para identificar el nivel de riesgos que posteriormente dará lugar a estrategias de atención, mismas que se transformarán en un tercer momento, en mediciones que nos lleven a la eficacia de las acciones.

Por su propia naturaleza, los modelos de gestión de riesgos han trastocado ámbitos sociales más que otros, como lo es el campo de la salud humana, la parte ambiental y con un auge importante en las actividades laborales, dadas las condiciones que hemos tenido que enfrentar a raíz de la pandemia declarada por la organización mundial de la salud en 2020, con la aparición del virus SARS-CoV-2 a finales del año 2019 (Wilbanks, D, 2021). El confinamiento ha puesto de manifiesto que hay actividades humanas que ponen en riesgo no solo la existencia de las especies, o los riesgos de calamidades como las ocurridas en Chernóbil, sino que la falta de acciones tomadas a destiempo pueden incrementar la generación de eventos irreversibles (Andrade, G., 2021). Una mala decisión o la negligencia puede conducir a pérdidas lamentables (Mejía, R., 2021), por lo que la urgencia de tomar acciones a tiempo ha llevado a apresurar regulaciones e impulsar con ello la prevención como nunca se había realizado.

Durante el año 2020 y parte del 2021, las empresas han trastocado sus actividades, debido a los riesgos sanitarios derivado de los contagios de SARS-CoV-2 y que potencialmente se convirtió en una pandemia en la que nadie anticipa ni cuándo habría de llegar una ansiada cura, ni mucho menos cuándo se visone la incorporación a una actividad real (Vahidy, F., 2021). Derivado de ello, algunas empresas tuvieron que disminuir su producción y la forma en que realizaban las actividades. Un caso particular, destaca el hecho de las empresas que contaban con procesos de certificación y que debían de responder a acciones de gestión de riesgos, sin tener contemplado

una norma de seguridad laboral, tuvieron que tomar estrategias para sobrevivir en este escenario. Sin embargo, la falta de recursos tanto humanos como materiales les llevó a tener que construir estrategias paliativas y medir la eficacia de las acciones.

La norma ISO 31000 (ISO 31000, 2020), ofrece lineamientos sobre las directrices para la evaluación y atención de los riesgos, mismo que han servido de base en diversas normatividades tales como la normas ISO 9001, ISO 14001, ISO 17025, ISO 15189 e ISO 45001, entre otras, cubriendo una gama amplia de actividades (Agus, P., 2020). Es claro que hay que dar cumplimiento a la identificación de los riesgos en cada uno de los sistemas de gestión de la calidad a partir de sus objetivos planteados, de acuerdo con numeral respectivo en el cumplimiento de la norma (Estevez, D., 2020). Identificar los riesgos representa un trabajo coordinado al interior de las empresas, pero una tarea titánica bajo las condiciones de limitaciones técnicas, de la falta de recurso económicos y de personal que atienda las actividades tendientes a la erradicación del riesgo, el cambio de riesgo a bajo o mínimo la contención, y justamente es en este último punto en el que se presenta la investigación. Una búsqueda de atención en un segundo momento cuando se ha trabajado en la contención de los riesgos.

### TEORÍA

Un evento dicotómico es aquel que se genera con dos posibilidades de ocurrencia, para el caso de las probabilidades, uno de los eventos podemos llamarle evento A, con probabilidad  $P(A) = p$ , y su complemento con B, con probabilidad  $P(B)$  lo que obedeciendo a los axiomas de probabilidad planteados por Kolmogorov, deben de cumplir:

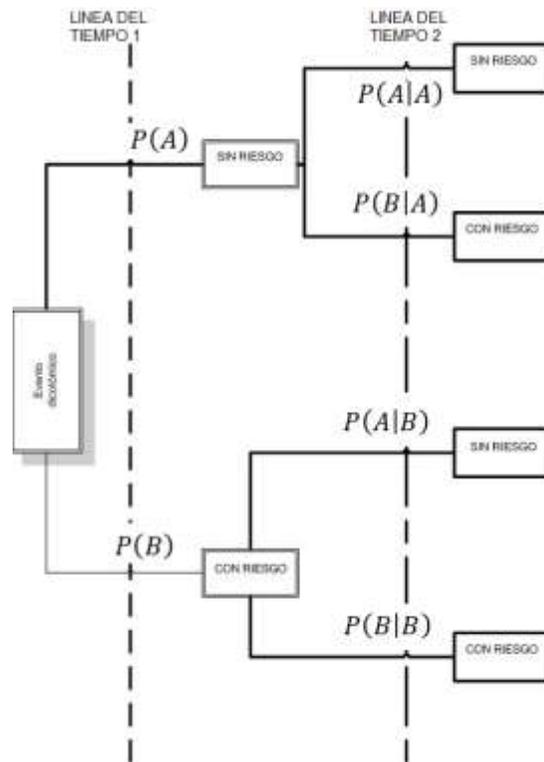
$$P(A) + P(B) = 1 \quad (1)$$

es decir,  $p + q = 1$ .

Así mismo, considerar eventos dicotómicos, también permite aprovechar la formalidad de los axiomas de Kolmogorov, dado que la suma de la generación de los riesgos y la ausencia de ellos nos generan un universo. Particularmente, la generación de los riesgos dentro de su propia concepción, expuestas en las normatividades ISO, definen el riesgo como la incertidumbre que se produce ante el incumplimiento de un objetivo, lo que deja en claro que un evento que genera incertidumbre no puede al mismo tiempo generar certeza sobre la ocurrencia de eventos, la posibilidad de uno genera exclusión del otro evento, aunque ambos pueden generar variabilidad nunca existe correlación entre tener riesgos y no tenerlos. Sin embargo, dentro de las propias normatividades las acciones que son valoradas con un resultados altos, que no son riesgos, pueden categorizarse para poder dar cumplimiento a otras oportunidades de mejora, que si bien no son abordadas en este trabajo también pueden retomarse de la ecuación (1) y dar lugar a lo que se conoce como oportunidades de mejora, que en las últimas versiones de las Normas ISO se han explotado como parte de esta.

Iniciemos por relacionar los eventos que cuentan con reproducibilidad, suponiendo que el segundo evento a considerar, estadísticamente se mantiene con las mismas probabilidades, representado por el siguiente esquema de la figura 1. En dicha figura se observan dos líneas de tiempo, en la que inicialmente, para el primer evento identificado como línea de tiempo 1 se tienen dos posibilidades; la dicotomía, en la uno de los eventos que presenta riesgos,  $P(B) = p$ , y el otro que no los presenta,  $P(A) = q$ . Considerando que en una segunda línea de tiempo se reproduce el fenómeno estudiado en la primera línea de tiempo, independiente del resultado de los resultados obtenidos, se observa que las probabilidades para riesgos se vuelven a presentar, lo que puede ocurrir derivado de las acciones tomadas para contener los riesgos y no como un evento azaroso. Muy poco probable es que una empresa pueda trasladar el riesgo momentáneamente, para poder retomarlo en un segundo momento y mantener el mismo nivel como el presentado en la línea de tiempo, particularmente esta última acción de trasladar el riesgo es tomada con la contratación de aseguradoras que generan acciones para disminuir el grado de riesgo, resultando poco rentable comprar un seguro en esas condiciones.

Figura 1. Esquema de un evento dicotómico reproducible, considerando dos líneas del tiempo.



Consideremos que queremos analizar la probabilidad de mantener riesgo a lo largo del tiempo y analizamos la probabilidad de que en ambos eventos se mantenga el mismo nivel de riesgo, de tal forma que tendríamos las siguientes consideraciones  $P(A) = P(A|B) = P(A|A) = p$  y  $P(B) = P(B|A) = P(B|B) = q$ . Por otro lado, considerando el teorema de Bayes:

$$P(A_i|B) = \frac{P(B|A_i)P(A_i)}{P(B)} = \frac{P(B|A_i)P(A_i)}{\sum_{k=1}^n P(B|A_k)P(A_k)} \tag{2}$$

Donde  $P(A_i)$  son las probabilidades a priori,  $P(B|A_i)$  es la probabilidad de  $B$  dada la ocurrencia de  $A$ ,  $P(A_i|B)$  son los eventos a posteriori. Al tomar las consideraciones en la ecuación (2) tendríamos:

$$P(B_{\text{primer evento}}|B_{\text{segundo evento}}) = \frac{P(B|B)P(B)}{P(B|B)P(B) + P(A|B)P(B)} \tag{3}$$

Al sustituir los valores de probabilidad tanto para los eventos de riesgo como los que son ausentes de éste en la ecuación (3), tendríamos el siguiente resultado:

$$P(B_{\text{primer evento}}|B_{\text{segundo evento}}) = \frac{(q)(q)}{(q)(q) + (q)(p)} = q \tag{4}$$

Es decir, se mantiene el mismo nivel de riesgo, en ambas líneas temporales para los eventos hipotéticos analizados. Por otro lado, usando el modelo VME-VMG (Valor Máximo de Escala contra el Valor Máximo Gaussiano) (Estevez, G.,2020), el cual parte de considerar valores, o bien sea a partir de frecuencias construidas por estudios de caso o considerar los valores de análisis previos

en el que tengamos oportunidades de tener frecuencias relativas, el caso dicotómico se reduciría a lo expuesto en la Tabla 1.

Tabla 1. Consideraciones de la tabla de frecuencia a considerar para la asignación del valor máximo de escala en el modelo MVE-VMG.

ESCALA FRECUENCIA	DE	SIN RIESGO	CON RIESGO	TOTAL
Frecuencia absoluta		A1	A2	$\sum A_i = n$
Frecuencia Relativa		$h_1 = \frac{A_1}{A_1 + A_2}$	$h_2 = \frac{A_2}{A_1 + A_2}$	$\sum h_i = 1$
Frecuencia de forma porcentual		$h_1 \times 100$	$h_2 \times 100$	$\sum h_i \times 100 = 100$
Valoración de las probabilidades		$p$	$q$	$p + q = 1$

El algoritmo de método VME-VMG, es tomar el valor máximo que tenemos de la fila de frecuencias relativas con porcentajes, al cual le llamaremos Valor Máximo de Escala, asignándole el nombre de máximo y equivaldrá al valor de índice del valor máximo; de manera similar, el valor máximo de esta distribución de probabilidad corresponde al valor máximo de los valores tomados para ser utilizados en la matriz de riesgos, Figura 2.

Figura 2. Matriz de riesgos de acuerdo con la norma ISO 31000.

PROBABILIDAD DE	Muy alta	5	5	10	15	20	25
	Alta	4	4	8	12	16	20
	Probable	3	3	6	9	12	15
	Baja	2	2	4	6	8	10
	Muy baja	1	1	2	3	4	5
		1	2	3	4	5	
		Muy bajo	Bajo	Grave	Alto	Muy alto	
		IMPACTO, SEVERIDAD, CONSECUENCIA, DAÑO, INTENSIDAD					
		CONSIDERACIONES DE LOS COLORES					
COLOR		NIVEL DE RIESGO					
		RIESGO BAJO					
		RIESGO MODERADO					
		RIESGO ALTO					

Para la asignación de nivel de riesgo, ésta se realiza una vez que se obtiene el siguiente cociente:

$$VE = \frac{25 \times VC}{VME} \quad (5)$$

Donde  $VME = \text{Máx}(h_i \times 100)$  es definido como el valor máximo de escala;  $VC$  corresponde, para el caso dicotómico, a la probabilidad de riesgo o de la frecuencia obtenida de la frecuencia relativa para el riesgo, en tanto que  $VE$  es el valor que nos llevara a categorizar el nivel de riesgo.

### PARTE EXPERIMENTAL

Al realizar la sustitución de los valores de la probabilidad de riesgo, en la ecuación (5), se encuentran los valores de nivel de riesgo que a continuación se exponen en la Tabla 2:

Tabla 2. Tabla de determinación de acciones para el caso de consideraciones dicotómicas.

Límite mínimo u objetivo de atención, para $q$ .	Límite máximo u objetivo de atención, para $q$ .	Nivel de riesgo	Sugerencia
0.37	1	Alto	Requiere de atención inmediata o ponderar que se mantenga en condiciones estáticas.
0.10	0.36	Moderado	Debe de supervisarse el límite máximo a fin de no incrementar el riesgo.
0	0.9	Bajo	No requiere de atención

La importancia de esta determinación radica en la evaluación de un primer evento, en la línea de tiempo 1, para la Figura 1, nos conduce a tomar consideraciones a fin de tomar acciones mínimas que permitan mantener el mismo nivel de riesgo, que como se ha podido observar en el resultado en la Tabla 2, este debe mantenerse, a fin de poder tener en un segundo momento una posibilidad de atención. La atención de los riesgos debe tender a la generación de acciones que permitan la contención, éstas deben de estribar en el análisis de los valores de la probabilidad de riesgo, de acuerdo con la valoración de la tabla 2. Los límites máximos para los riesgos moderados, deben en la medida de lo posible, mantenerse controlados o tomar acciones que permitan trasladar el riesgo para una segunda oportunidad, cuando sea factible, como es el caso de la contratación de seguros o contenciones por parte de las propias empresas. Asimismo, cuando el riesgo moderado lo permita se puede buscar tomar acciones que mantengan gastos mínimos, inclusive la erradicación de los mismos. Para el caso de riesgos altos, las acciones deben de ocuparse en bajar los valores a fin de evitar la materialización de los riesgos y que desencadenen desviaciones en la calidad o merma en la producción.

### CONCLUSIONES

El estudio presentado permite observar que, si bien una segunda oportunidad de atención se puede dar, esta no puede dejarse de manera azarosa, debe estar acompañado de acciones tendientes a atender los riesgos, aunque las acciones sean mínimas y anticiparse que estas sean tendientes a generar eficacia en la contención, la erradicación u observar que se transformen en riesgos marginales. Este caso particular, es de gran importancia dado que siempre que la categoría de las variables que intervienen en el cumplimiento de un objetivo sean eventos

mutuamente excluyentes y el caso de mayor riesgo se pueda identificar de manera aislada, lo que puede transformar el análisis a el caso dicotómico expuesto en esta investigación.

## BIBLIOGRAFÍA

1. Andrade-Ramírez, G. V., & Arteaga-Linzán, M. M. (2021). Riesgos laborales: Causas y consecuencias en tiempos de Covid-19. *Dominio de las Ciencias*, 7(3), 247-265.
2. Agus, P., Ratna Setyowati, P., Arman, H., Masduki, A., Innocentius, B., Priyono Budi, S., & Otta Breman, S. (2020). The effect of implementation integrated management system ISO 9001, ISO 14001, ISO 22000 and ISO 45001 on Indonesian food industries performance. *Test Engineering and Management*, 82(20), 14054-14069.
3. Andrade-Ramírez, G. V., & Arteaga-Linzán, M. M. (2021). Riesgos laborales: Causas y consecuencias en tiempos de Covid-19. *Dominio de las Ciencias*, 7(3), 247-265.
4. Estevez Delgado, G., Franco Rios, L., & Estevez Delgado, J. (2020). Una óptica de los riesgos ante el SARS-CoV-2 mediante el modelo VME-VMG. En I. Y. EDUCACIÓN, Una óptica de los riesgos ante el SARS-CoV-2 mediante el modelo VME-VMG ISSN (págs. 518-530). DURANGO: ANDI. doi:En trámite
5. Estevez, G., Franco, L., Cochran, G. Estevez, J. (2020). Un modelo de gestión de riesgos administrativos en una institución educativa. Presentado en el Congreso XVII Encuentro de [la Participación de La mujer en la Ciencia. ISSN 2448-5063. http://congresos.cio.mx/17\\_enc\\_mujer/archivos/memorias\\_encuentro\\_2020\\_sep.pdf](http://congresos.cio.mx/17_enc_mujer/archivos/memorias_encuentro_2020_sep.pdf)
6. International Organization for Standardization. (2020). *ISO 31000:2009. Risk management — Principles and guidelines*
7. Mejia, R. R., González, J. D. V., & Durán, A. M. (2021). Health-associated infections and COVID-19 in Mexico: safety and health rules at work or job biosecurity?. *International Journal of Occupational Safety and Health*, 11(1), 54-64.
8. Vahidy, F., Jones, S. L., Tano, M. E., Nicolas, J. C., Khan, O. A., Meeks, J. R., ... & Kash, B. A. (2021). Rapid Response to Drive COVID-19 Research in a Learning Health Care System: Rationale and Design of the Houston Methodist COVID-19 Surveillance and Outcomes Registry (CURATOR). *JMIR Medical Informatics*, 9(2), e26773.
9. Wilbanks, D. W., Abulhassan, Y. A., & Kilpatrick, R. S. (2021). COVID-19 Early Planning, Response & Lessons in OSH. *Professional Safety*, 66(01), 32-37.

## IMPLEMENTACIÓN DE UN REACTOR PARA LA OBTENCIÓN DE SILICIO POROSO LUMINISCENTE MEDIANTE IMPRESIÓN 3D POR ESTEREOLITOGRAFÍA

Emmanuel Bautista Bustamante<sup>1</sup>, A. Benítez<sup>2</sup>, F. Morales-Morales<sup>1</sup>, N. Hernández-Sebastián<sup>1</sup> y F. Ambriz-Vargas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Centro de Investigaciones en Óptica, A.C., Loma del Bosque 115, Col. Lomas del Campestre León, Gto, México. C.P. 37150. <sup>2</sup>CONACYT-Centro de Investigaciones en Óptica, A.C., Loma del Bosque 115, Col. Lomas del Campestre León, Gto, México. C.P. 37150.  
emmanuelbb@cio.mx

### RESUMEN

En la actualidad la impresión 3D mediante estereolitografía ha ganado gran popularidad para desarrollo de prototipos de manera más eficiente en cuanto a tiempo y economía. En este proyecto se plantea la implementación de un reactor para la obtención de silicio poroso usando impresión 3D por estereolitografía. El diseño se llevó a cabo utilizando un software de diseño asistido por computadora de la marca siemens llamado SolidEdge 2021 versión académica. El prototipo está compuesto por una zona de reacción, un contenedor para el electrolito, una base con un contacto de cobre y una tapa con un electrodo de tungsteno como ánodo. Por otro lado, el silicio poroso es un material que ha ganado interés científico por las propiedades luminiscentes debidas al confinamiento cuántico y los defectos intrínsecos del material que se producen a la hora de realizar el ataque electroquímico. El proceso de obtención del silicio poroso consiste en un proceso electroquímico basado en un electrolito compuesto de HF y etanol en una concentración de 1:1 utilizando a una oblea de silicio como electrodo. Al aplicar una densidad de corriente inducirá una reacción electroquímica en la superficie de la oblea y así obtener una estructura porosa hacia el interior del sustrato. Las corrientes que se aplicaron para la obtención del silicio poroso son 20, 40, 60 y 80 mA mediante una fuente de corriente de la marca Keithley modelo 2450 para la caracterización de la densidad de porosidad y razón de ataque mediante la técnica de gravimetría. Aunado a lo anterior, se realizó una caracterización por fotoluminiscencia con una fuente de excitación de 250 nm, con un espectro de emisión que va desde los 550 nm hasta los 750 nm, con el fin de identificar los defectos luminiscentes y las condiciones para obtener la mayor intensidad en luminiscencia.

### INTRODUCCIÓN

En los últimos años la impresión 3D ha tenido grandes avances científicos y tecnológicos. Las industrias utilizaban la fabricación sustractiva para construir productos, en los que los diseños se tallaban, cortaban o perforaba de un bloque sólido de material. Por otro lado, la fabricación aditiva utiliza una técnica de capas que permite realizar diseños más complejos, además, de sus grandes ventajas como la velocidad y precisión. Esto permite la capacidad de desarrollar modelos únicos altamente personalizables mediante el diseño y modelado 3D por medio de software de diseño asistido por computadora (CAD) [1].

Existen diferentes tecnologías dentro de la impresión 3D, mediante modelado por deposición fundida la cual va colocando capa por capa algún tipo de material (ABS, PLA, ASA, PET, PETG). Otra técnica es el procesamiento de luz digital (DLP) donde se utiliza un dispositivo digital de microespejos (DMD) que refleja y enfoca luz ultravioleta (UV) en las superficies de los materiales fotorreactivos que se polimerizan por capas. [7]. Mediante SLA que emplea una resina fotosensible la cual al ser expuesta a la luz pasa de estado líquido a sólido, mediante un láser de luz ultravioleta que es dirigido a las coordenadas del modelo 3D endureciendo la resina en capas hasta finalizarlo. Con este método se puede obtener una de las mejores resoluciones de impresión [2].

Se implemento el reactor para la obtención de SiP con propiedades luminiscentes a cuatro muestras a las que se les aplicaron diferentes corrientes mediante una fuente de corriente de la

marca Keithley modelo 2450 para la caracterización de la densidad de porosidad y razón de ataque mediante la técnica de gravimetría.

Por medio de fotoluminiscencia (FL) se observa la intensidad luminiscente de las muestras obtenidas. La FL es la luminiscencia obtenida entre la interacción de fotones y la materia. La técnica de FL es muy usada para determinar las propiedades intrínsecas y extrínsecas de semiconductores ya que se basa en la teoría de bandas y sirve para estudiar la calidad cristalina, la deformación por el nivel de dopaje, la energía de activación de impurezas, brechas de energía, entre otras [11].

## TEORÍA

La impresión 3D ha ido aumentando gradualmente desde la creación de prototipos hasta la fabricación de las piezas ya que pueden ser altamente personalizables. Es posible imprimir en 3D en una amplia gama de materiales como termoplásticos (PLA, PETG, ABS, entre otros). La impresión 3D engloba una amplia gama de tecnologías de fabricación aditiva. Cada una de ellas construye objetos en capas sucesivas que suelen tener un grosor de unas cuantas micras hasta unos cuantos milímetros [3]. Su capacidad para producir formas y geometrías complejas sigue siendo una de sus principales ventajas [4].

El proceso de impresión 3D básicamente es crear un objeto añadiendo material capa a capa hasta obtener el diseño completo [5]. A medida que los procesos y las tecnologías implicadas se han ido desarrollando, se han encontrado cada vez más aplicaciones para la impresión 3D por su descenso en costos de fabricación y variedad de materiales [6].

En este trabajo la impresión del reactor electroquímico se llevó a cabo mediante la técnica de SLA para su posterior aplicación en la obtención de SiP. El SiP es un material nanoestructurado que se puede obtener mediante el proceso de ataques electroquímicos, mediante dos electrodos de contacto se le aplican diferentes corrientes en una solución acuosa la cual puede estar formada de diferentes compuestos químicos como etanol, metanol, HF entre otros [8].

Un resultado fundamental que se ha encontrado es el cambio de la banda de energía ( $E_g$ ) debido a las npSi que se encuentran embebidas en el SiP. Por lo tanto, la brecha de la  $E_g$  aumenta al disminuir el tamaño de la npSi. La luminiscencia que se observa en el SiP en el rango visible está relacionada con la  $E_g$  de la npSi y a su vez depende en gran medida del tamaño de las partículas y posibles defectos del material (SiP) [10].

Mediante la técnica de gravimetría se calcula el porcentaje de porosidad y el espesor de las npSi. El porcentaje de porosidad se calcula con los datos obtenidos con la diferencia de los pesos (ecuación 1). El porcentaje de porosidad es la ausencia de material o el material removido por los ataques electroquímicos.

$$P(\%) = \frac{m_1 - m_2}{m_1 - m_3} \times (100) \quad (1)$$

Donde

$m_1$  es el peso después de la limpieza.

$m_2$  es el peso después del proceso de ataque electroquímico.

$m_3$  es el peso al remover el SiP de la muestra.

$P(\%)$  es el porcentaje de porosidad.

Con la ecuación 2 se obtiene el espesor del SiP, utilizando los datos medidos para el proceso de gravimetría. Este espesor es determinado por el tiempo total del proceso del ataque electroquímico tomando en cuenta el área de ataque y la densidad del Si.

$$d = \frac{m_1 - m_3}{S \times \rho_{Si}} \quad (2)$$

Donde

$S$  es el área de ataque de la oblea de Si.

$\rho_{Si}$  Densidad del Si.

### PARTE EXPERIMENTAL

El programa de SolidEdge es un software de diseño asistido por computadora por sus siglas en inglés (CAD) que nos permite realizar diseños de piezas tridimensionales 3D, permite el modelado de las piezas de distintos materiales, ensamble de conjuntos, dibujos de planos, entre otras muchas funciones más que ofrece por ser un software de ingeniería. Mediante este software se diseñó un reactor electroquímico con las características propias requeridas para su posterior implementación en la obtención de SiP.

El proceso de obtención de SiP consiste en colocar una oblea de Silicio (Si) dentro de un reactor electroquímico al cual se le colocó un electrolito 1:1 de etanol y HF como se observa en la figura 1a. Posterior a ello se le aplican diferentes corrientes mediante dos electrodos de contacto el ánodo de silicio y el cátodo de Tungsteno durante 60 minutos. Las corrientes aplicadas son de 20, 40, 60 y 80 mA respectivamente ver la figura 1b. Antes del ataque electroquímico se realizó limpieza tipo CMOS a las obleas de Si tipo p, dopante Boro, resistividad 1-10 ohms\*cm y orientación (100).

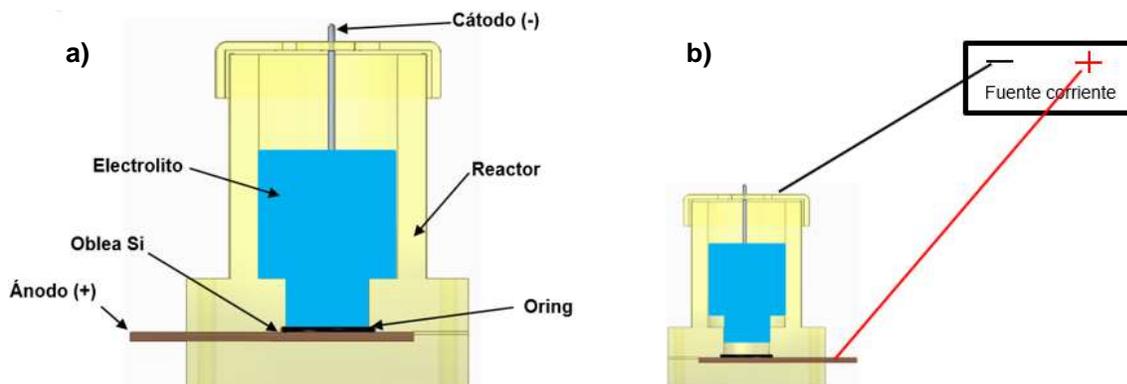


Figura 1. a) Implementación de reactor. b) Aplicación de corriente para la obtención de SiP.

Para la caracterización de fotoluminiscencia se utilizó un espectrofotómetro de la marca Acton Research modelo 2300i con un tubo fotomultiplicador R955 de Hamamatsu. Con una excitación de 250 nm y en un rango de 500 a 850 nm.

### RESULTADOS

El diseño del reactor electroquímico mediante software CAD lo podemos observar en la figura 2a, con las partes simuladas que lo integran el cual consta de base (1), cuerpo (2), tapa (3), electrodos (4), Oring (5), oblea de Si (6). Se le colocó una tapa al reactor para poder sostener el filamento de Tungsteno (cátodo), en la base se diseñó un contacto de cobre para utilizar al Si como ánodo. Este material resiste al HF ya que es una resina a base de un polímero (plástico).

El uso de software CAD nos permitió la simulación de los componentes, esto es muy importante ya que podemos tener una visualización antes de imprimir nuestros modelos 3D. En la figura 2b podemos ver nuestro reactor electroquímico impreso por SLA para su posterior aplicación en la obtención de SiP como se describió anteriormente.

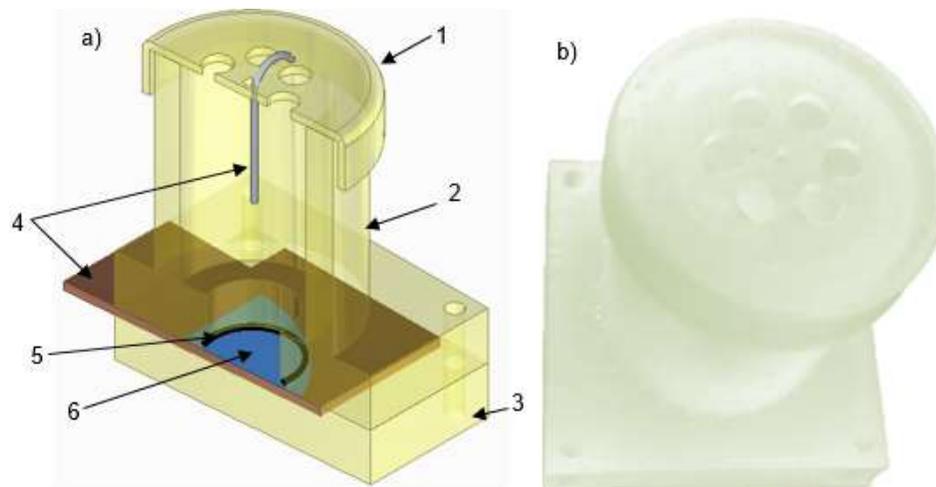


Figura 2. a) Partes del reactor diseñado en 3D mediante el software SolidEdge versión académica. b) Impresión 3D del reactor por SLA.

La técnica de gravimetría consiste en realizar tres pesajes de la oblea de Si, el primero después de realizar la limpieza de la oblea a utilizar, el segundo después de realizar el ataque electroquímico de la oblea de Si y el tercero al extraer el SiP con una solución de Hidróxido de Potasio (KOH). Este procedimiento se realizó para determinar la tendencia del espesor y el porcentaje de porosidad del SiP los cuales se basan en la ecuación 1 y 2 descritas anteriormente, ver tabla 1. Podemos observar que los 80 mA muestran una mayor porosidad, es decir que a mayor corriente aplicada será mayor el porcentaje de porosidad del SiP.

Corriente aplicada (mA)	m1	m2	m3	Espesor (um)	% Porosidad
20	0.3290	0.3190	0.3163	0.0031	78.9474
40	0.3237	0.3023	0.3013	0.0054	95.5224
60	0.3207	0.3037	0.3017	0.0046	89.4737
80	0.3110	0.2817	0.2797	0.0076	93.6170

Tabla 1: Datos del pesaje de las muestras, espesor y porcentaje de porosidad.

Se graficaron los datos del espesor y porcentaje de porosidad para obtener la tendencia del espesor y porcentaje de porosidad del SiP. Los resultados que se muestran en la figura 3a corresponden al espesor del SiP obtenido, a mayor corriente aplicada mayor es el espesor de la oblea de Si. Por otro lado, en la imagen 3b observamos el porcentaje de porosidad obtenido a mayor corriente aplicada existe una mayor porosidad del material.

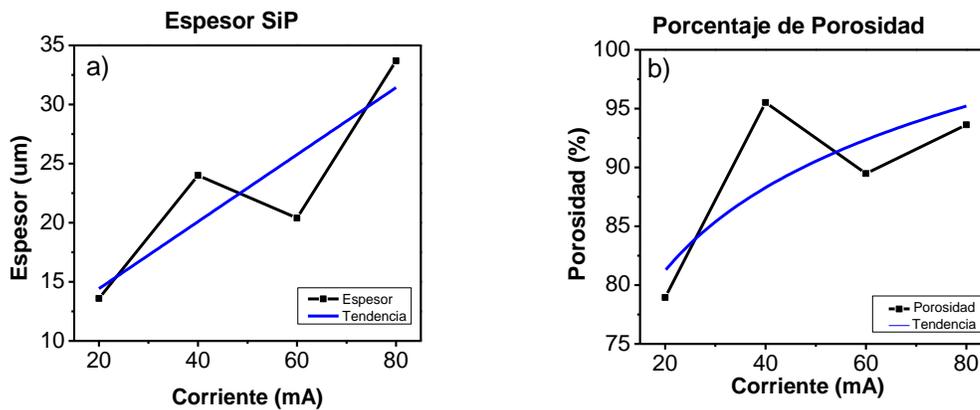


Figura 3. a) Espesor del SiP b) Porcentaje de porosidad del SiP.

Se obtuvieron los espectros de FL donde se puede observar diferentes intensidades para las corrientes aplicadas de nuestras muestras de 20, 40, 60 y 80 mA, se observaron dos picos de mayor intensidad situados en 630 y 670 nm los cuales se deben a defectos estructurales del SiP y al efecto de confinamiento cuántico el cual está dado por el tamaño de las npSi. La muestra de 80 mA es la que tiene la mayor intensidad de luminiscencia en el visible en comparación con las otras ver figura 4, a mayor corriente aplicada existe una mayor luminiscencia obtenida en el SiP.

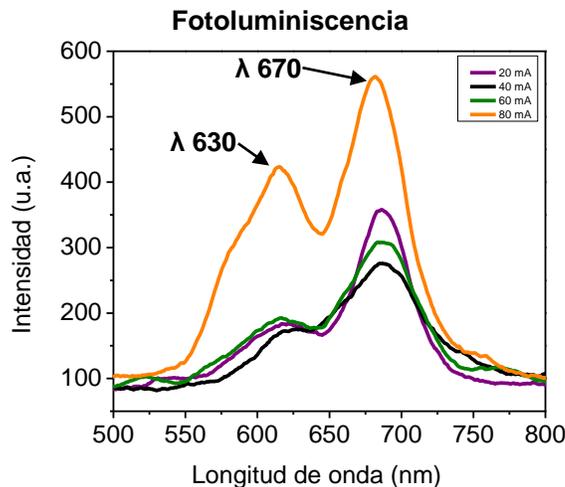


Figura 4. Fotoluminiscencia del SiP.

## CONCLUSIONES

La impresión 3D hoy en día juega un papel muy importante en la fabricación de prototipos de una manera más rápida y sencilla, mediante la tecnología de impresión por SLA se imprimió y posteriormente se implementó un reactor electroquímico para obtener SiP. Se obtuvieron cuatro muestras de SiP con propiedades luminiscentes mediante la técnica de ataques electroquímicos aplicando corrientes de 20, 40, 60 y 80 mA después se realizó la caracterización óptica del SiP mediante la técnica de FL en donde se observan dos picos de mayor intensidad luminiscente de 630 y 670 nm además se determinó que la muestra con mayor intensidad luminiscente fue a la que se indujo 80 mA.

**BIBLIOGRAFÍA**

1. A. Su, J. Subhi, "Chapter 1-History of 3D Printing", 3D Printing Applications in Cardiovascular Medicine, 2018, pp. 1-10. DOI: doi.org/10.1016/B978-0-12-803917-5.00001-8
2. CENTRO DE INVESTIGACIONES EN ÓPTICA, A.C., "NOTICIO", Vol. XXVII, 2021, pp. 1-82.
3. A. Ramya, "3D PRINTING TECHNOLOGIES IN VARIOUS APPLICATIONS", International Journal of Mechanical Engineering and Technology (IJMET), Volume 7, Issue 3, May-June 2016, pp.396-409, Article ID: IJMET\_07\_03\_036
4. Alhnan, M.A., Okwuosa, T.C., Sadia, M. "mergence of 3D Printed Dosage Forms: Opportunities and Challenges", Pharm Res 33, 1817-1832 (2016). DOI: doi.org/10.1007/s11095-016-1933-1
5. J. Horvath, "A Brief History of 3D Printing" Mastering 3D Printing. pp. 3-10, Berkeley, CA. (2014). DOI: doi.org/10.1007/978-1-4842-0025-4\_1
6. M. Whitaker, "The history of 3D printing in healthcare", Vol. 96 (2014) pp. 228-229. DOI: doi.org/10.1308/147363514X13990346756481
7. K. Hossam, W. Soham, X. Changxue, A. Fakhrul, "Digital light processing (DLP) 3D-printing technology and photoreactive polymers in fabrication of modified-release tablets", European Journal of Pharmaceutical Sciences, Vol. 135, (2019), pp. 60-67. DOI: doi.org/10.1016/j.ejps.2019.05.008.
8. R.R. Koropecski, C.Spies, R.D. Arce, J.A. Schmidt, "Cristales fotónicos de silicio poroso nanoestructurado", 17º CBECIMat-Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais, Brasil (2006). Disponible en: [www.researchgate.net/publication/242089824](http://www.researchgate.net/publication/242089824)
9. A. G. Román, J. A. Luna, A. D. Hernández, "Colloidal Solutions with Silicon Nanocrystals: Structural and Optical Properties", Intechopen, Chapter 4, pp. 65-84, (2018). DOI: dx.doi.org/10.5772/intechopen.74429
10. E. Ojeda, K. Monfil, J. Carrillo, "Down-Conversion Effect Created by SiO<sub>x</sub> Films Obtained by HFCVD and Applied over Pn-Junctions", SpringerLink, Vol. 11, pp. 2087-2093 (2019). DOI: doi.org/10.1007/s12633-018-0029-4
11. A. Medina Herrera, "CARACTERIZACIÓN ÓPTICA MEDIANTE LA TÉCNICA DE FOTOLUMINISCENCIA DE SILICIO POROSO", Universidad del Quindío, (2017).

## LA INVESTIGACIÓN ACCIÓN EN LA CAPACITACIÓN DEL PERSONAL, CONJUNTANDO LOS ESCENARIOS MEDIBLES A FIN DE TRANSFORMAR EN CADA CICLO UNA ACCIÓN PLANIFICADA PARTICIPATIVA.

Gabino Estevez Delgado<sup>1</sup>, Arturo Chávez Esquivel<sup>1</sup>, Itzia Alejandra Bonilla Paz<sup>2</sup>, Alonzo Garibay Tapia<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Facultad de Químico Farmacobiología UMSNH, <sup>2</sup>Centro de Innovación y Desarrollo Agroalimentario de Michoacán A.C., <sup>3</sup>ISSSTE  
gabino.estevez@umich.mx

### RESUMEN

La investigación acción ha sido un modelo que se equipara con los modelos de gestión de la calidad, de manera particular con el ciclo Deming, lo que resulta atractivo para poder insertarlo en los escenarios que requiere mantener un sistema de calidad con personal competente y actualizado. Es evidente que aún para las empresas más sólidas y en la que aparentemente sus procesos no sufrirían modificaciones en la producción si lo han tenido los procesos para atender la propia producción, la forma de vender o hacer llegar los bienes o servicios, lo que ha involucrado crear formas de impactar en el mercado para mantener el éxito y en el peor de los escenarios la supervivencia. Áreas del conocimiento como lo es el sector salud y de educación, que de manera cotidiana atiende capacitaciones de actualización en el personal, sin embargo, estas capacitaciones sean visto rebasadas ante escenarios que no se tenían previstos, particularmente nos referimos a la trasmisión del virus SARS-CoV-2, que nos llevó a la declaración de la pandemia y un aprendizaje que por momentos ha parecido acelerado y por otros momentos paulatino. Para ello, se han tendido que buscar elementos de capacitación adecuados, siendo este desconocimiento y velocidad variable de conocimientos lo que nos ha tenido que adecuar escenarios e indagar en metodologías de cuál puede ser las más adecuada para recibir las capacitaciones que den respuesta a escenarios de cambios, encontrando planear ante este escenario requiere involucrarse para lograr el objetivo de acuerdo a las condiciones, mismo que involucra medir en cada proceso la estrategia medida. El presente estudio se realizó con dos grupos de estudiantes de la salud, grupo A de 35 y grupo B de 40 alumnos del último año de licenciatura, con conocimiento de las estrategias de la metodología de la Investigación-Acción, para poder generar interpretación de mediciones estadísticas en el curso llevado en línea. Con uno de los grupos, grupo A, se le informó en cada etapa los resultados de la estrategia y con consenso y participación de todos se modificó la estrategia a lo largo de tres ciclos repartidos en un semestre. Para el otro grupo, el B, se le explicó que se adecuaría la estrategia por parte del instructor, a lo largo del proceso de la metodología, pero en este caso no se involucró ante el cambio. En los dos grupos se apoyó en el desarrollo de la gestión de las habilidades, sin embargo, se observó los siguientes aspectos de cambio, considerando la prueba t-student de medias iguales, con  $p=0.05$ , que el tiempo de poder generar la habilidad de análisis fue de 23% menor en el grupo A. En tanto que la redacción de los reportes no presentó valores significativos, si se pudo observar que los reportes con mayor actualización y nivel de factor de impacto se presentó en el grupo A, en el que se fueron adecuando las condiciones de trabajo en tres ocasiones, previo consentimiento de los participantes

### INTRODUCCIÓN

La actualización en áreas del conocimiento se ha convertido en una necesidad primordial en el cumplimiento de objetivos que se plantea las empresas, en las que la filosofía intrínseca sobre la que descansa el actualizarnos mediante un paradigma de estudiar para toda la vida.

De manera particular, en los últimos meses, con el cambio de modalidad de actividades y la seguridad social en materia de medidas sanitarias han generado una serie de necesidades que no se habían presentado. Si bien es cierto que se han estado desarrollado formas de comunicación social, en las últimas dos décadas (Saidon, 2001), estas no se habían potencializado con fines

educativos como lo han hecho a raíz del confinamiento derivado de la pandemia declarada en marzo de 2020 (Yenmez, 2021).

Para las universidades, consideradas como la super estructura del conocimiento, les han dado un uso particular a las herramientas tecnológicas de comunicación social enfocándose no solo en el uso de estas, además han tenido que adecuar sobre modelos educativos que permitan ser aprovechados por los estudiantes (Dubey, 2020). El último año de estudios de una carrera universitaria deja ver algunas deficiencias en la formación, pero además permite involucrar al estudiante en su proceso de formación. Los estudiantes del último año, en el caso de algunas carreras del sector salud, se ven inmiscuidos en la solución de problemas lo que conlleva reflexiones e inclusive que el estudiante se vea involucrado en soluciones ante escenarios reales (Tan, 2020).

De darse la comunicación con los profesores, la retroalimentación se ve altamente favorecida para todos los actores involucrados, tales como estudiantes, personal médico y de manera central los pacientes (Asio, 2021). Involucrarse en las necesidades y poder mejorar en el proceso de aprendizaje es una tarea, que pese a ser favorable, requiere revisar los objetivos de la planeación de los programas, lo que no siempre es fácil (JMR, 2021).

La planeación educativa generalmente obedece al cumplimiento de objetivos y revisión del cumplimiento de los mismos (Estevez, 2020), no es una actividad asíncrona que pueda darse en cualquier momento, sin embargo, es claro que socialmente se tienen necesidades que el sector productivo requiere y demanda que las universidades se vean involucradas (Bautista, 2020), (Aristovnik, 2020).

Una vez que un estudiante egresa y se inserta en el sector productivo, se observa que las empresas demandan tareas específicas, siendo aquí donde las habilidades de gestión del conocimiento adquiridas en la etapa universitaria cobran la mayor importancia (Estevez, 2020). Por otro lado, no todas las habilidades se desarrollan de manera fácil, tal es el caso de aquellas que involucran destrezas manuales (Kourgiantakis, 2020).

De forma presencial, la capacitación se daba de un experto a un equipo que demandaba adquirir habilidades (Buheji, 2020), pero las condiciones en línea involucran tener que acotar sobre aspectos que sean considerados los más preponderantes por encima de la generalidad (Smith, 2021).

El preámbulo a la educación continua es dado por aquellos estudiantes del último año o recién egresado a quienes se les demanda que apoyen a los profesionistas con las competencias del profesionista responsables de las actividades tales como servicio social o prácticas profesionales, en el último caso.

## TEORÍA

La mejora continua declarada por los gurús de la calidad han trastocado muchas áreas del conocimiento, desde las que de manera natural pueden medir la calidad a través de la variabilidad con la que se genera un bien o servicio, como lo es la producción industrial, hasta aquellas que han tenido que idear formas de evaluación para medir la variabilidad en su producción o los productos terminados. Finalmente, todos los servicios en los que se mide la variabilidad nos lleva a garantizar que la calidad es buena o que se está mejorando a medida que pasa el tiempo, es justo la variabilidad un elemento central en el concepto de la calidad, recordemos que el concepto de calidad esta descrito como:

$$Calidad \propto \frac{1}{Variabilidad} \quad (1)$$

Así que entre mayor sea la variabilidad, al ser un concepto expresado como una función inversa para la calidad, tendremos menos calidad y viceversa, cuando tenemos poca variabilidad la calidad aumenta. Parte de las metodologías sobre la calidad recaen en esta simple ecuación, iniciar con una planeación nos lleva a pensar en el cómo vamos a lidiar con la variabilidad, qué necesitamos para que eso mejore, qué acciones vamos a tomar, qué cosas podemos controlar y con qué de lo que interviene en el proceso nos va a permitir mejorar. En la mayoría de los casos tenemos que trabajar con constantes que afectan el propio proceso o que pueden lograr pocos cambios y que en

consecuencia tendremos que realizar esfuerzos para tener una variabilidad menor. Por otro lado, transitando desde la planeación y los controles para mejorar, tenemos otro elemento que debe ser considerado, como es el tener una visión sobre fraccionar el problema en otros escenarios más pequeños e inclusive alianzas para apoyarnos en solventar lo que nos cuesta trabajo, esto no es nuevo, la propia naturaleza de los seres vivos ha generado alianzas simbióticas que beneficia a las especies (Andersen, 1994). Y finalmente, después de las acciones de planear, de controlar, de asociar para mejorar, hay que estudiar el cómo voy a medir para saber si realmente nos acercamos al objetivo, si con las acciones hemos mejorado, cuánto y cómo vamos a direccionar las acciones en el propio ciclo de calidad.

Al hablar de calidad, involucramos una serie de conceptos tal como el llamado ciclo de Deming, quien lo presentó en la década de los 50's del siglo pasado, pero que previamente lo había estructurado W. A. Shewhart, publicado en 1939. Esta metodología involucra procesos identificados como el ciclo de la mejora o ciclo PHVA, la cual parten de la planeación, seguido de elementos para tomar acciones en el logro de los objetivos, una verificación sobre el grado de atención de las acciones emprendidas y finalmente actuar en consecuencia a los resultados. Esta metodología, requiere la realización de más de un ciclo que permite ver la evolución de las acciones y en cada ciclo nuevo una mejora del proceso.

Paralelamente al desarrollo de los conceptos del ciclo de la calidad, Kurt Lewin en 1944 acuñaba el término Investigación-Acción que describía una investigación experimental, particularmente en el campo social, cuyo objetivo era dar respuestas a acciones sociales de esa época (Adelman, 1993). Aunque esta teoría tuviera un origen entre lo psicológico y lo social de manera intrínseca se definía la mejora continua como lo hace el ciclo PHVA. La planeación dada en esta metodología tiende a dar respuestas a interrogantes que las etiquetamos en problemas y soluciones (Kemmis, 2006), posterior a ello accionamos hacia el proceso de la observación determinado en este tipo de investigación acción y que de manera particular guarda analogía con el ciclo de Deming, entre el hacer, verificar y finalmente la reflexión es una medida del accionar Figura 1 (Lewin, 1973).

Figura 1 Proceso de la Investigación acción en analogía con el Ciclo de Deming.



Por momentos el ciclo del proceso de la investigación acción se asemeja a la trilogía de la calidad planteada por Juran (Dasrimin, 2021), como se puede comparar en la siguiente tabla:

Tabla 1. Comparación global entre la trilogía de Juran y la investigación acción de Kurt Lewis (Moen, 2006), (Levin, 2008), (Wooltorton, 2015).

Trilogía de la calidad de Juran	Metodología de la investigación acción para un ciclo
Planear	Planear
Controlar de la calidad	Acción y la observación
Mejora de la calidad	Reflexionar

Planear desde de la investigación acción de Lewis, al igual que los modelos de calidad de Juran o de Deming obedece a patrones similares, dado que todos ellos van a responder un objetivo sobre el que se acciona a lo largo cada ciclo o bien de la calidad o bien sobre la investigación. La observación requerida en el modelo de investigación se centra en la medida de la variabilidad de los procesos o el control sobre lo que puede generar.

A continuación, abordaremos el problema que comúnmente presentan los estudiantes al abordar problemas de investigación, en los que además deben de converger saberes que les permitan la solución de problemas en campos de aplicación profesional específicas. Un escenario de esta naturaleza es considerar que existen problemas que pueden ser abordados por más de una técnica estadística, no solo es ver el campo del dato numérico sino aunado a ello es documentar la

variabilidad de la información que, sin ser llamada variabilidad natural, obedece a características o limitaciones propias del problema.

### **PARTE EXPERIMENTAL**

Se les presentó a dos grupos de 35 y 45 alumnos del último semestre, al que llamaremos grupo A y grupo B, un conjunto de problemas que involucraban soluciones estadísticas, con información de los datos recolectados en los que había que dar soluciones e interpretaciones. A ambos grupos se les comentó que la intención era lograr la conjunción de una serie de investigaciones, entre realizar una búsqueda adecuada de la información que permitiría entender el problema, analizar y discriminar la información sobre la temática; por otro lado, identificar las características de la información y aplicar alguna técnica o metodología estadística que permitieran dar un resultado con su respectivo análisis e interpretación. A los dos grupos se les hizo saber que se tomaría registro de la evolución de sus habilidades para la solución de los problemas y que se podría modificar la metodología a fin de acompañar sus progresos. Sin embargo, al grupo A, se le hizo participe de la evolución de sus progresos, en tanto que al grupo B se le fue midiendo su evolución y no se le fue indicando el cambio de la metodología, principalmente ante obstáculos. Así mismo, en cada ciclo se analizó la variabilidad de los avances, particularmente en cuanto al tipo de investigación abordada, la cantidad de información; con un poco de complicaciones debido a las características cualitativas, se observó el proceso de conjunción de la información y reporte final de las investigaciones.

La investigación acción considerada en el tratamiento abordado consistió en 3 ciclos, inicialmente se les permitió que realizaran su investigación realizando búsquedas sin acompañarles de herramientas particulares, permitiendo que agruparan la investigación a libre albedrío; en función de la información encontrada sobre el tema elegido, se les permitió realizar la elección de los métodos estadísticos, el análisis de la información y concluir la investigación conjuntando tanto la parte estadística y la investigación sobre la temática. Con la información colectada, se generó un segundo ciclo, mismo que permitió, en base a la información generada en el primer ciclo, acompañar en las búsquedas o tomas de decisiones, privilegiando su ruta crítica y participativa de la solución del problema y en la redacción de los reportes de investigación. En un tercer ciclo, se hizo particular énfasis en la discriminación de la información y en la característica de los datos, lo que les permitió a los estudiantes de ambos grupos poner énfasis en la forma en que se abordó la información y la redacción final de sus reportes de investigación.

### **RESULTADOS**

De manera natural, los datos que obtenemos dentro de la WEB 2.0, depende en mucho del contacto que tenemos con la información y las redes semánticas que hemos construido, la variabilidad poblacional sobre las temáticas puede ser enormes, particularmente, porque si bien es cierto que la reproducibilidad de los fenómenos es algo intrínseco a la aceptación de investigaciones en la ciencia, la forma en que abordamos una investigación puede tener características multifactoriales. La manera en que abordamos un problema, lo que en ocasiones no es único, puede llevarnos a diferentes caminos, lo que nos complica evaluar o calificar cuál es la mejor forma de interpretar un resultado. Así mismo, las técnicas estadísticas pueden ser varias, llevándonos a interpretación de resultados comunes o por lo menos con variabilidades pequeñas entre sí para al momento de llevar a cabo la interpretación.

A continuación, se presentan las tablas de los resultados encontrados en cada ciclo de la investigación acción, tanto para el grupo A, como para el grupo B:

Tabla 2. Resultados grupo A

HABILIDAD DE GESTIÓN	PRIMERA ETAPA (DIAGNÓSTICO)		SEGUNDA ETAPA (REVISIÓN DE OBJETIVOS)	TERCERA ETAPA (REVISIÓN DE NIVEL DE CUMPLIMIENTO FINAL)
	OBSERVACIÓN DEL PROCESO INICIAL	META PLANTEADA	OBSERVAR UNA SEGUNDA INVESTIGACION	TERCERA ETAPA (REVISIÓN DE NIVEL DE CUMPLIMIENTO FINAL)
BUSQUEDA.	46%	90%	72%	97%
CLASIFICACIÓN	23%	90%	57%	94%
USO O APLICACIÓN LOS MÉTODOS ENCONTRADOS.	6%	90%	66%	97%
ANÁLISIS DE LA INFORMACIÓN ENCONTRADA.	6%	90%	63%	89%
CONCLUSIÓN EN SU ANÁLISIS.	3%	90%	49%	97%
REPORTE GLOBAL.	0%	90%	52%	97%

Para el caso del grupo A, la primera etapa, la reflexión se centró en dos elementos distintivos, por un lado, el tipo de fuentes de consulta, observándose que la gran mayoría de ellas eran exclusivamente en información de divulgación, sin casi consideración sobre la vigencia de la información o distinción sobre fuentes primarias. Para el segundo ciclo, derivado del acompañamiento en técnicas de gestión documental, uso de categorías para los artículos de investigación, entre lo más destacado, se observó que hubo mejoras en la gestión de la información y mejoras en las estrategias de análisis estadísticas e interpretación de resultados. En el tercer ciclo evaluado mediante esta metodología, se observó que se cumplió con los objetivos planeados en la planeación del primer ciclo, e inclusive superada de manera global, que fue de un valor del 90%.

Tabla 3 Resultados Grupo B

HABILIDAD DE GESTIÓN	PRIMERA ETAPA (DIAGNÓSTICO)		SEGUNDA ETAPA (REVISIÓN DE OBJETIVOS)	TERCERA ETAPA (REVISIÓN DE NIVEL DE CUMPLIMIENTO FINAL)
	OBSERVACIÓN DEL PROCESO INICIAL	META PLANTEADA	OBSERVAR UNA SEGUNDA INVESTIGACION	REFLEXIONAR SOBRE LAS MEDIDAS Y NIVEL DE CUMPLIMIENTO
BUSQUEDA	48%	90%	60%	73%
CLASIFICACIÓN	28%	90%	45%	80%
USO O APLICACIÓN LOS MÉTODOS ENCONTRADOS	5%	90%	66%	80%
ANÁLISIS DE LA INFORMACIÓN ENCONTRADA	7%	90%	0%	85%
CONCLUSIÓN EN SU ANÁLISIS	2%	90%	49%	73%
REPORTE GLOBAL	0%	90%	52%	73%

Para el caso del grupo B, la primera etapa, al igual que al grupo A, se observaron las mismas características, pero a diferencia del grupo A, se diferenciaron ligeramente habilidades iniciales en aspectos como búsqueda y clasificación de la información, que realizando una prueba t-student, con  $p=0.05$ , no hubo diferencias estadísticas significativas entre los grupos. El segundo ciclo, después de informar de la estrategia a seguir y de las herramientas de gestión de investigación, mismas que se utilizaron en el grupo B, se realizaron avances, que aparentemente se ven diferentes entre los dos grupos, sin embargo, al realizar un análisis estadístico con la prueba t-student, con una significancia de  $p=0.05$  no se observaron cambios significativos. Al observar ambas tablas en los resultados finales, para el tercer ciclo las diferencias con la misma prueba t-student con una  $p=0.05$ , se observa que el proceso de búsqueda es favorecido cuando se informó a los estudiantes, particularmente el proceso de gestión documental y de reporte final, encontrándose diferencias de hasta 23% porcentual.

## CONCLUSIONES

Resulta complicado poder evaluar el proceso de gestión documental debido a la diversidad de redes de información (Brewster, 2004) sobre una temática, evaluarlo de manera subjetiva conllevaría a juicios críticos que no serían objetivos. Dentro de las investigaciones sobre la bibliometría existen corrientes que apuntan a tendencias que no siempre pueden ser del todo objetivas (Perc, 2014), sin embargo, se requiere tener un acercamiento al proceso de gestión de la información, al propio proceso y como parte de este a la forma de organización, desde luego a las técnicas de análisis para interpretar un resultado. La conjunción del gestión de información y el análisis de datos conduce a la habilidades particulares como lo es la interpretación de resultados, sin embargo el proceso de aprendizaje es determinante, como observamos en el estudio realizado, en el que en un 23% hubo mejores resultados cuando se informó del proceso de cambio de estrategia en el proceso educativo y no solo del proceso de intervención hasta el final del proceso, probablemente debido a un interés genuino en el compromiso del proceso de aprendizaje cuando se da una actividad de compromiso y de intervención participativa.

## BIBLIOGRAFÍA

1. Adelman, C. (1993). Kurt Lewin and the origins of action research. *Educational action research*, 1(1), 7-24.
2. Andersen, R. M., Davidson, P. L., & Ganz, P. A. (1994). Symbiotic relationships of quality of life, health services research and other health research. *Quality of life Research*, 3(5), 365-371.
3. Aristovnik, A., Keržič, D., Ravšelj, D., Tomaževič, N., & Umek, L. (2020). Impacts of the COVID-19 pandemic on life of higher education students: A global perspective. *Sustainability*, 12(20), 8438.
4. Asio, J. M. R., & Bayucca, S. (2021). Spearheading education during the COVID-19 rife: Administrators' level of digital competence and schools' readiness on distance learning.
5. AYDOĞAN YENMEZ, A., & GÖKÇE, S. (2021). Teachers' Opinions on Web 2.0 Tools used for Measurement and Evaluation Purposes in Distance Education. *Journal of Hasan Ali Yücel Faculty of Education/Hasan Ali Yücel Eğitim Fakültesi Dergisi (HAYEF)*, 18(2).
6. Bautista, C. A., Huang, I., Stebbins, M., Floren, L. C., Wamsley, M., Youmans, S. L., & Hsia, S. L. (2020). Development of an interprofessional rotation for pharmacy and medical students to perform telehealth outreach to vulnerable patients in the COVID-19 pandemic. *Journal of Interprofessional Care*, 34(5), 694-697.
7. Brewster, C., & O'Hara, K. (2004). Knowledge representation with ontologies: the present and future. *IEEE Intelligent Systems*, 19(1), 72-81.
8. Buheji, M., & Buheji, A. (2020). Planning competency in the new Normal—employability competency in post-COVID-19 pandemic. *International Journal of Human Resource Studies*, 10(2), 237-251.

9. Dasrimin, H. (2021). Analysis of Education Policies in the Pandemic Covid-19 for Maintenance and Improving the Quality of High Schools in Indonesia.,
10. Dubey, P., & Pandey, D. (2020). Distance learning in higher education during pandemic: challenges and opportunities. *Int. J. Ind. Psychol*, 8(2), 43-46.
11. Estevez Delgado, G., & Bonilla Paz, I. A. (2020). Investigación acción, la educación continua ante la nueva normalidad. En G. Estevez Delgado, & I. A. Bonilla Paz, *Investigación acción, la educación continua ante la nueva normalidad* (Primera ed., Vol. 1, págs. 509-517). Santa Maria del Oro, Durango, México: ANDI. doi:En trámite
12. Estevez Delgado, G., Estevez Delgado, J., & Chávez Esquivel, A. (2020). Aprendizaje del cálculo diferencial durante la pandemia COVID-19 mediante la Investigación Acción ISSN. En trámite
13. JMR, & Bayucca, SA (2021). Spearheading education during the COVID-19 rife: Administrators' level of digital competence and schools' readiness on distance learning. *Journal of Pedagogical Sociology and Psychology*, 3(1), 19-26.
14. Kourgiantakis, T., & Lee, E. (2020). <? covid19?> Social work practice education and training during the pandemic: Disruptions and discoveries. *International Social Work*, 63(6), 761-765.
15. Laurillard, D. (2008). The teacher as action researcher: Using technology to capture pedagogic form. *Studies in Higher education*, 33(2), 139-154.
16. Levin, M., & Greenwood, D. J. (2008). The future of universities: Action research and the transformation of higher education. *The SAGE handbook of action research: Participative inquiry and practice*, 211-226.
17. Moen, R., & Norman, C. (2006). Evolution of the PDCA cycle.
18. Perc, M. (2014). The Matthew effect in empirical data. *Journal of The Royal Society Interface*, 11(98), 20140378.
19. Saidon, R. (2021). The Impact of Web 2.0 Tools on Economics Education. *Turkish Journal of Computer and Mathematics Education (TURCOMAT)*, 12(3), 2386-2399.
20. Smith, T. S., Holland, A. C., White, T., Combs, B., Watts, P., & Moss, J. (2021). A Distance Accessible Education Model: Teaching Skills to Nurse Practitioners. *The Journal for Nurse Practitioners*.
21. Tan, K. I., Foo, J., Ang, B. W., Chua, J. W., & Teo, D. B. (2020). Perspectives of medical students on local medical education during COVID-19. *Singapore Med J*, 1(6).
22. Woollorton, S., Wilkinson, A., Horwitz, P., Bahn, S., Redmond, J., & Dooley, J. (2015). Sustainability and action research in universities: Towards knowledge for organizational transformation. *International Journal of Sustainability in Higher Education*.

**MODELO DE DISEÑO E IMPLEMENTACION DEL DIAGNOSTICO DE CIENCIAS BASICAS**

María Magdalena Josefina Tirado Hernández<sup>1</sup>, Martín Piña Hernández<sup>1</sup>, María Magdalena Josefina Tirado Hernández<sup>2</sup>, Rosalba Ávila Acosta<sup>1</sup>, Diana Lorena Rubio Navarro<sup>2</sup>, Víctor Hugo Lara Pelayo<sup>1</sup>, Omar Sánchez Tec<sup>1</sup>, Marina Sánchez Olalde<sup>1</sup>, Deyli Anid Galíndez Espinoza<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad Tecnológica del Estado de Querétaro (UTEQ), <sup>2</sup>Centro de Bachillerato Tecnológico industrial y de Servicios No. 118 (CBTis No. 118)  
jtiradoh092017@gmail.com

**RESUMEN**

La Educación de calidad del Plan Nacional de Desarrollo (PND), la Nueva Escuela Mexicana (NEM) y la Agenda 2030 en una sociedad del conocimiento que requiere el desarrollo de habilidades duras y blandas. El objetivo de la presente investigación es diseñar e implementar un Modelo que apoye a mejorar el desempeño en el aprendizaje de las matemáticas del estudiante Técnico superior universitarios de la División Industrial en la UTEQ en un marco de desarrollo Organizacional generando una nueva cultura personal. Métodos utilizados: cuestionario, entrevista, observación, análisis documental y escala de Likert, el tipo de investigación es descriptiva, el diseño de investigación es experimental. Tabla comparativa de habilidades matemáticas, elementos en la calidad personal, Tabla elementos de Desarrollo organizacional: Inteligencia organizacional Aprendizaje organizacional, Tabla comparativa habilidades duras y blandas, Tabla descriptiva del estado actual del Diagnóstico considerando los actores de la comunidad educativa: estudiantes líderes, Padres de Familia, docentes, academias, personal directivo, administrativo y de apoyo, así como aliados. Creación del Modelo de diseño e implementación del diagnóstico de Ciencias Básicas en la UTEQ (MDIDCB), se implementa con una Metodología de Organización Humanista en un marco de Desarrollo Organizacional generando una nueva cultura personal y organizacional. Efectividad del MDIDCB y su implementación, utilizando escala de Likert, aplicación; no solo para la división Industrial, aplicación del Modelo para todas las divisiones. Podemos concluir que las organizaciones se están enfocando en Habilidades Blandas, Habilidades duras. Mejora la cultura personal del estudiante, del docente, de directivos y personal de apoyo, dando ejemplo de desarrollo de habilidades blandas como base al desarrollo de habilidades científicas duras de los estudiantes (centradas en habilidades matemáticas) formando ciudadanos con enfoque en el manejo para la vida logrando vínculos. Fue posible replicar de una división a todas las divisiones de la universidad con el apoyo del nivel directivo y la Academia de matemáticas. Los resultados entre pares estudiantes que tienen las habilidades lo realizan como servicio social, programa de asesorías para estudiantes en riesgo, bajando índice reprobación y por lo tanto, deserción, asesoría para preparación de los estudiantes para concursos con la disposición de los profesores de las diferentes academias. La participación de los docentes realizando en el camino los cambios necesarios en la estrategia (investigación-acción) haciendo que como personas no solo se involucran, sino que se comprometen. Mejora de reactivos del diagnóstico con la participación de cada División. El Proceso de seguimiento del diagnóstico hace una gran diferencia y el siempre agradecer la participación, que es el "sueldo moral". Debemos considerar que hay mucho por hacer en el marco de la Agenda 2030 y el Desarrollo Organizacional en la formación de los ciudadanos acorde a las exigencias de una sociedad del conocimiento.

**INTRODUCCIÓN**

La calidad personal es la base de todas las calidades, de acuerdo a Socconini L. se requiere que primero haya calidad en las personas, permite calidad en los departamentos y con ello calidad en los procesos y la calidad en los productos o servicios será el resultado en el ciclo, vincular a las personas con habilidades para la vida es primordial en las organizaciones que por el hecho de existir generan un impacto en los ecosistemas, razón por lo cual están obligadas a ejecutar acciones responsables y sustentables. Al reconocer que somos seres humanos socialmente responsables, la Agenda 2030 (el Plan Nacional de Desarrollo (PND) en México en su objetivo 4:

Educación de calidad y considerando el enfoque de la Nueva Escuela Mexicana (NEM), establecen la necesidad de atender la socioformación de los jóvenes siendo fundamental incidir en el perfil del ciudadano que impactara en una sociedad del conocimiento con una nueva cultura personal. Como dice Ariel de Geus, Jefe de planificación Royal Dutch/Shell “La capacidad de aprender con mayor rapidez que los competidores quizá sea la única ventaja competitiva sostenible”, ¿qué habilidades debemos desarrollar duras o blandas?, si se crea una organización o formas parte de una organización, el Desarrollo organizacional es primordial por ello las cinco disciplinas del Arte de Aprendizaje Organizacional de Peter Senge (Dominio personal, Modelos Mentales, Visión Compartida, Aprendizaje en Equipo y Pensamiento Sistémico), su quinta disciplina integra, considerar en forma sistémica el contexto en donde se desarrolla, el aprendizaje organizacional e Inteligencia Organizacional así como el Liderazgo organizacional estratégico en un marco de Investigación-Acción; los cambios se presentan en el momento debemos estar abiertos a realizar el cambio necesario en la persona y en la organización. La Universidad Tecnológica del Estado de Querétaro (UTEQ) es la segunda más grande universidad del estado de Querétaro incluye 25 programas en su oferta educativa con los siguientes atributos del Modelo Educativo: Calidad, Pertinencia, Intensidad, Continuidad, Polivalencia, Flexibilidad, Función de vinculación, Planes y programas de estudio por competencias profesionales, Estadías de alumnos en el Sector Productivo, Personal académico, Innovación y desarrollo tecnológico, Programa integral de tutorías y servicios estudiantiles, Formación integral e Infraestructura educativa. Atiende las Ciencias básicas (matemáticas, física y química), que son habilidades duras básicas en sus contenidos: Conceptual, procedimental y actitudinal/convivencia, siendo las habilidades blandas una gran fortaleza para su desarrollo. “Creativity and Innovation Center 4.0 (CIC 4.0) se constituye como la plataforma que impulsará la participación de la UTEQ en la Industria 4.0, esto como una respuesta a los grandes cambios del contexto mundial y por lo tanto, atenderá la necesidad de mantener la vigencia y pertinencia de la oferta educativa, satisfaciendo las expectativas del alumnado y sus familias, así como del sector productivo de bienes y servicios y otros grupos de interés. El objetivo del CIC 4.0 busca potenciar las capacidades del ecosistema de Innovación de la Universidad Tecnológica de Querétaro, con la integración del capital humano y alumnos, mediante un espacio de convergencia multidisciplinaria, transdisciplinaria y organizacional que reúna programas con otras organizaciones, tecnologías avanzadas y vinculación con el sector productivo, privado y social”. Atendiendo realidades con estudiantes de nuevo ingreso en su diagnóstico inicial se da el seguimiento al problema ¿Cómo apoyar a mejorar el desempeño en el aprendizaje de las matemáticas del estudiante Técnico superior universitarios de la División Industrial en la UTEQ? se lleva a cabo con el objetivo de la investigación “Diseñar e implementar un Modelo que apoye a mejorar el desempeño en el aprendizaje de las matemáticas del estudiante Técnico superior universitarios (TSU) de la División Industrial en la UTEQ en un marco de desarrollo Organizacional generando una nueva cultura personal”. La investigación se llevó a cabo respondiendo a las preguntas de investigación: 1. ¿Cómo determinar los fundamentos teóricos y metodológicos de las habilidades duras y blandas?, 2. ¿Cómo determinar el estado actual del Diagnóstico de la habilidad dura (matemáticas) del TSU en la UTEQ?, 3. ¿Cómo crear un modelo que apoye a mejorar el desempeño en el aprendizaje de las matemáticas del estudiante Técnico superior universitarios de la División Industrial en la UTEQ en un marco de desarrollo Organizacional generando una nueva cultura personal? ” y 4. ¿Cómo validar la efectividad del modelo que apoye a mejorar el desempeño en el aprendizaje de las matemáticas del estudiante Técnico superior universitarios de la División Industrial en la UTEQ en un marco de desarrollo Organizacional generando una nueva cultura persona?

## TEORÍA

El desarrollo organizacional es una estrategia para mejorar la organización y las Personas sanas y fuertes que irradian vitalidad en los demás son requeridas como líderes organizacionales estratégicos, dice Socconini L. “La experiencia es un componente necesario, pero lo son más el sentido común y la capacidad para tomar buenas decisiones con base en la información disponible. La edad no es lo importante, sino la creatividad y el entusiasmo por aprender y dar lo mejor de sí

en esa gran empresa que es el trabajo, donde pasamos la tercera parte de nuestra vida”, Habilidades duras (enfoque a competencias) y blandas (asociada al comportamiento de las personas, a inteligencia emocional), la Cultura personal se encuentra en todas las personas se basa en creencias de cada persona, tiene un ámbito humana, cuidando la huella ecológica atendiendo la agenda 2030 en sus cinco dimensiones: persona, prosperidad, planeta, participación colectiva y paz. Etimológicamente diagnóstico significa: “a través de” (dia) y “conocer en profundidad” (gignosko), realizar diagnóstico educativo o pedagógico y diagnóstico y diagnóstico organizacional permiten establecer las estrategias involucrando a todos los actores educativos y mejorar clima organizacional considerando la investigación-acción con mente abierta en Contenidos (conceptuales, procedimentales, actitudinales/convivencia) en un ámbito de Seguridad, Bienestar y Salud considerando una Mejora continua (Herramienta Hoshin Kanri). El diagnóstico nos arroja el problema en la habilidad dura (matemáticas) específicamente el tema Algebra en Signos negativos, en jerarquía de operadores y ley de exponentes es una realidad con la que llegan los estudiantes a la universidad causando problemas en física y química. Si consideramos “...en distintos espacios comunitarios, que tiene una orientación pedagógica, ética y política, proporciona elementos teóricos y prácticos y .....contribuye a modificar actitudes, elevar la comprensión y enriquecer el comportamiento de cada comunidad educativa en su relación con el ambiente” (SEMARNAT, 2018) preservación del ambiente relacionado con el uso y manejo eficiente del agua, manejo de residuos sólidos, eficiencia en el consumo de electricidad, así como promoción, conservación y recuperación de áreas verdes, en las que participen los miembros de la comunidad educativa. Las personas con habilidades blandas son parte del objetivo de la educación del siglo XXI.

### PARTE EXPERIMENTAL

Considerando la hipótesis con las variables de investigación de acuerdo a la tabla 1: Si se crea un modelo (Diseño e implementación del Diagnóstico de Ciencias Básicas) entonces se apoya a mejorar el desempeño en el aprendizaje de las matemáticas del estudiante TSU en la UTEQ en un marco de desarrollo organizacional generando una nueva cultura personal. El Modelo de Diseño e implementación del Diagnóstico de Ciencias Básicas (Fig. 2) en su proceso se implementa con una Metodología de organización humanista en un marco de Desarrollo organizacional (Inteligencia organizacional, aprendizaje organizacional) generando una nueva cultura personal.

### RESULTADOS

En respuesta a las cuatro preguntas de investigación se obtuvieron los siguientes resultados: 1. Tabla de habilidades matemáticas, Tabla de elementos de calidad personal, Tabla de características del líder organizacional estratégico, elementos de desarrollo organizacional, Tabla comparativa de Habilidades blandas y duras y Método de trabajo (Fig. 1), 2. Tabla descriptiva del estado actual del diagnóstico considerando antecedentes en tiempo (Tabla 1) y tabla comparativa de habilidades considerando actores de la comunidad, 3. Creación del Modelo de Diseño e implementación del Diagnóstico de Ciencias Básicas (Base habilidades blandas y duras (Matemáticas(Álgebra) (Fig. 2), en un marco de desarrollo organizacional, generado por el Líder organizacional estratégico (características blandas relevantes que apoyan a las habilidades duras) en un proceso de implementación con una metodología de organización Humanista (Desarrollo organizacional, Inteligencia Organizacional(IO) y Aprendizaje Organizacional (AO), Liderazgo organizacional tomando en cuenta las cinco Disciplinas del arte de Aprendizaje Organizacional de Peter Senge (Dominio Personal, Modelos Mentales, Visión compartida, Aprendizaje e Equipo y Pensamiento Sistémico) en un contexto (Actores educativos, comunidad de aprendizaje, calidad humana (Hoshin Kanri), Seguridad, Bienestar y Salud, vinculada a una Sociedad del conocimiento (Comunicación, Pensamiento crítico, creatividad y Trabajo colaborativo) considerando la Agenda 2030 (dimensiones: Persona, Prosperidad, Planeta, Participación colectiva y Paz), con una calidad educativa con innovación, tecnología y ciencia por lo que el método de investigación-acción es imprescindible siempre dispuestos a un cambio necesario en una escuela mexicana que busca la socioformación en los estudiantes, para la 4. Tabla de variables independiente y dependiente y

parámetros y validación (Tabla 3), habilidades blandas como base al desarrollo de habilidades científicas duras de los estudiantes (centradas en habilidades matemáticas) formando ciudadanos con enfoque en el manejo de habilidades para la vida logrando vínculos y círculos virtuosos (aptitudes, actitudes, sentido de pertenencia (grupos personalizados de asesorías) que lleva a pequeños éxitos y a su vez los grandes éxitos).

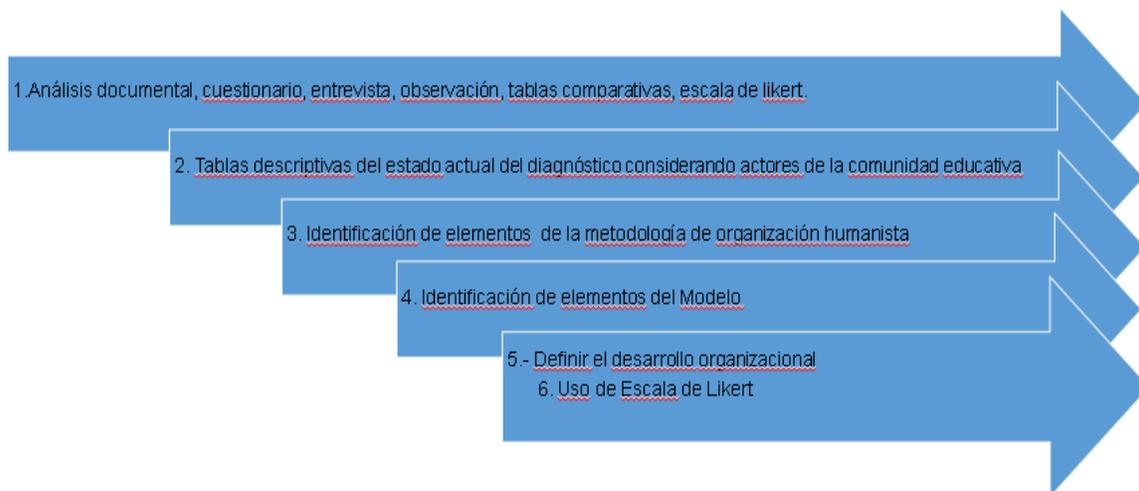


Fig. 1. Método MDIDCB (Elaboración propia)

	Antecedente	Acciones
2018	Diagnóstico División Industrial Organización desde la División Industrial Participación en 2° Concurso de Ciencias Básicas obteniendo primer lugar	Seguimiento de <u>alumnos</u> , <u>Invitación</u> a alumnos para participación en concursos de Ciencias Básicas, Formación de equipos, invitación a profesores asesores (Matemáticas, física y química), Formación de equipo de trabajo con Academia de Matemáticas, Química y Física)
2019	Aplicación Diagnóstico de Ciencias Básicas a más de 2350 aspirantes a Técnico Superior Universitario (TSU) Proyecto <u>Sep-dic 2019/Mayo-Ago 2020</u> en UTEQ Proceso de admisión Marzo-Julio 2019 Proceso Nuevo Ingreso <u>Sep 2019</u>	-Preparación Moodle. Preparación proyecto Matemáticas y asesorías. 1. <u>Análisis de resultados prope</u> (Fin de cuatrimestre), 2. <u>Análisis de Evaluación de Ciencias Básicas</u> nuevo Ingreso, 3. Revisión EGETSU GEN 38 ( <u>Sep 2020</u> ), 4. Concurso de Matemáticas Mayo 2020) Promover habilidades blandas que fomenten las duras
2020	Proceso de selección TSU septiembre 2020 Especificaciones del Servidor (uso: área Servicios Escolares y Evaluación de Ciencias Básicas. Dominio acceso externo de los aspirantes Servicios escolares: Programa Aplicación Diagnóstico Ciencias Básicas (27-30 abril-5 Mayo Confirma atención a aspirantes.	Asistencia a asesoría de casos críticos al Lista de estudiantes, fecha, horarios, formación de grupos de asesoría de 8 estudiantes, se termina 2° unidad y se inicia 3°, es necesario que los alumnos con situación crítica, se regularicen o representarán alumnos en extraordinarios, ELEVANDO EL ÍNDICE DE REPROBACION Y/O DESERCIÓN. Selección asesores entre pares (Servicio Social), asignación personalizada.

Tabla 1. Estado actual del diagnóstico con antecedentes en tiempo (Elaboración propia)



Fig. 2. Modelo de Diseño e implementación del diagnóstico de Ciencias Básicas (Elaboración propia).

Variable	Parámetro
Independiente. Modelo de Diseño e Implementación del Diagnóstico de Ciencias Básicas	Elementos del Diseño: I. Liderazgo organizacional estratégico II. Habilidades Blandas III. Habilidades Duras Implementación: I. Metodología de organización Humanista II. Contexto
Dependiente: Apoyo a mejorar el desempeño en el aprendizaje de las matemáticas del estudiante TSU en la UTEQ en un marco de desarrollo organizacional generando una nueva cultura personal.	I. <u>Cultura personal</u> (Habilidades Blandas y Duras) II. <u>Matemáticas (Álgebra)</u> III. <u>Desarrollo organizacional</u> (Aprendizaje organizacional, Inteligencia Organizacional)

Tabla 2. Parámetros de acuerdo a variable independiente y variable dependiente (Elaboración propia)

**CONCLUSIONES**

Podemos concluir de acuerdo a las preguntas de investigación primero que las organizaciones se están enfocando en Habilidades Blandas y Habilidades duras. Segundo se aplicó no solo para la División Industrial, aplicación del Modelo para todas las divisiones con el apoyo del nivel directivo y la Academia de matemáticas. Tercero se logró asesorías entre pares estudiantes que tienen las habilidades lo realizan como servicio social, programa de asesorías para estudiantes en riesgo, bajando índice reprobación y por lo tanto, deserción, asesoría para preparación de los estudiantes

para concursos con la disposición de los profesores de las diferentes academias. Cuarta mejora de reactivos del diagnóstico con la participación de cada División. La participación de los docentes realizando en el camino los cambios necesarios en la estrategia (investigación-acción) haciendo que como personas no solo se involucran, sino que se comprometen. Ejemplo de desarrollo de habilidades blandas como base al desarrollo de habilidades científicas duras de los estudiantes (centradas en habilidades matemáticas) formando ciudadanos con enfoque en el manejo para la vida logrando vínculos. Se concluye que el Proceso de seguimiento del Diagnóstico hace una gran diferencia y el siempre agradecer la participación, que es el "sueldo moral". Debemos considerar que hay mucho por hacer en el marco de la Agenda 2030 y el Desarrollo Organizacional en la formación de los ciudadanos acorde a las exigencias de una sociedad del conocimiento.

#### BIBLIOGRAFÍA

1. Blanco I. (2012). *La evolución educativa. Pautas para una educación humanista*. México, Producciones Educación aplicada.
2. .Wendell F, Bell C. Desarrollo organizacional. Aportaciones de las Ciencias de la Conducta para el Mejoramiento de la Organización. México. Editorial Prentice Hall (PHH).
3. Socconini L. (2015). *Lean Manufacturing. El sistema de gestión empresarial japonés que revolucionó la manufactura y los servicios*. México. Ed. Norma
4. Arriaga, M. (2015). El Diagnóstico Educativo una importante herramienta para elevar la calidad de la educación en manos de los docentes". *Atenas*; vol.3, num 31, pp. 63-74. Universidad de Matanzas Camilo, Cienfuegos, Matanza, Cuba.
5. SEMARNAT, *Estrategia de Educación Ambiental para la Sustentabilidad en México*. México, 2006. Disponible en: <http://www.semarnat.gob.mx/sites/default/files/documentos/educacionambiental/publicaciones/Estrategia%20de%20Educaci%C3%B3n%20Ambiental%20para%20la%20Sustentabilidad%20-%20SEMARNAT%202006.pdf>
6. Tirado, J. (2014). *Círculo virtuoso para la continuidad de proyectos*. Foro de Consulta Nacional para la revisión del Modelo Educativo. Nivel Medio Superior. Región 5. México, SEP, 2014. Disponible en: <http://registromodeloeducativo.sep.gob.mx/Archivo;jsessionid=20509f21b6af4d611eab29fa0d9a?nombre=13372-ponencia+Josefina+Tirado+Hernandez.pdf>

## ALUMINATOS MIXTOS CON ACTIVIDAD FOTOCATALÍTICA PARA REDUCCIÓN Y DEGRADACIÓN DE COMPUESTOS ORGÁNICOS

Sandra Judith Castañeda Palafox<sup>1</sup>, Luis Armando Díaz Torres<sup>1</sup>, Christian Gómez Solís<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Centro de Investigaciones en Óptica, A.C. Loma del Bosque No. 115, Col. Lomas del Campestre, León, Gto., México. C.P. 37150. <sup>2</sup>División de Ciencias e Ingenierías Campus León, Universidad de Guanajuato, Loma del Bosque No. 103 Col. Lomas del Campestre, C.P. 37150, León Gto. México sandracp@cio.mx

### RESUMEN

La búsqueda de métodos para aprovechar la energía solar ha ido en constante crecimiento, debido a las ventajas económicas y ambientales que presenta. Uno de estos métodos, es la fotocatalisis, que es una aplicación ampliamente utilizada para descontaminación, degradación y purificación<sup>1,2</sup>. En el proceso de fotocatalisis, es necesario el uso de un fotocatalizador que absorberá la luz, cuya energía debe ser superior al ancho de banda prohibida ( $E_g$ ) para promover la generación de electrones y huecos en las bandas de valencia y conducción, respectivamente, llevándose a cabo procesos de oxidación y reducción de manera simultánea. Para que exista una mayor captación de electrones y una menor tasa de recombinación de los pares fotogenerados, se han desarrollado estrategias para la modificación de la estructura y composición del fotocatalizador. De este modo, el ancho de banda prohibida puede ser disminuido para poder asegurar una mejor captación de energía en el rango del visible o bien se minimice la recombinación de los pares. En este trabajo se sintetizaron materiales con posible actividad fotocatalítica para la reducción de compuestos orgánicos como el 4-nitrofenol y a su vez, la degradación de colorantes como el azul de metileno usando energía solar como fuente de irradiación. El 4-nitrofenol es un compuesto orgánico catalogado como contaminante debido a su toxicidad, el cual ha sido empleado en la manufactura de medicamentos, colorantes, insecticidas, fungicidas, entre otros<sup>3</sup>. La reducción de este compuesto conduce al 4-aminofenol<sup>4</sup>, que es un intermediario en diversos procesos como la preparación de fármacos analgésicos o la inhibición de la corrosión en pinturas, por decir algunas. Por otro lado, el azul de metileno es un colorante usando ampliamente en la industria y la exposición a elevadas concentraciones de éste representa graves problemas de salud<sup>5</sup>. Los fotocatalizadores se sintetizaron mediante el método de sol-gel modificado, obteniéndose matrices mixtas de aluminatos cobre-zinc ( $Cu_x Zn_{1-x} Al_2O_4$ ), con distinta razón Cu/Zn. La capacidad fotocatalítica de estos materiales se evaluó con el propósito de disminuir las probabilidades de recombinación del par hueco-electrón fotogenerados durante el proceso. Las pruebas fotocatalíticas con 4-nitrofenol, se utilizaron soluciones a 20ppm mientras que las pruebas con azul de metileno a 15ppm irradiando constantemente con energía solar durante 60 min. La reducción y degradación fue monitoreada mediante la técnica espectroscópica UV-vis. Los resultados muestran que las muestras con  $x=0.1$  y  $0.9$  mol% Cu, presentan una disminución en la banda característica de absorción del 4-nitrofenol en presencia del  $Na_2SO_3$  (400nm), mientras que la muestra con  $x=0.5$  mol% Cu, presenta un mayor porcentaje de degradación. Estos resultados indican, de acuerdo con la literatura, una disminución en la recombinación del par hueco-electrón fotogenerado. obteniendo una mejora en el proceso de fotocatalisis utilizando energía solar como fuente de luz.

### INTRODUCCIÓN

La contaminación es un problema ambiental que afecta a nivel mundial. Tal como la contaminación de orgánicos presentes en sistemas acuáticos a partir de diversas fuentes como efluentes industriales, la industria agrícola, química y farmacéutica. Entre los contaminantes orgánicos se tienen los colorantes y compuestos nitrofenólicos como es el caso del 4-nitrofenol<sup>6</sup>. Es por ello por lo que la búsqueda de métodos para atacarla es de gran importancia. Una de las tecnologías utilizadas para esto, es la fotocatalisis.

Los procesos fotocatalíticos son considerados como una tecnología prometedora que permite aprovechar la energía solar para degradar contaminantes orgánicos. Para absorber la luz es

necesario usar un fotocatalizador que por lo general suele ser un semiconductor con band gap adecuado, es decir, que cuente con la misma energía suficiente para poder generar la separación de electrones y huecos, y, asimismo superar los potenciales necesarios para llevar a cabo los procesos de oxidación-reducción.

Se han estudiado diversos fotocatalizadores tales como  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{MgO}$ ,  $\text{ZnO}$ ,  $\text{CdS}$ , por mencionar algunos. Aunque el desarrollo de estos materiales presenta ciertas desventajas por lo que la búsqueda de fotocatalizadores eficientes es de gran interés.

Fotocatalizadores dopados con  $\text{Cu}$  han demostrado ser candidatos idóneos para llevar a cabo procesos fotocatalíticos debido a las propiedades ópticas que éstos presentan. Para la degradación de contaminantes orgánicos han mostrado una eficiencia en el proceso debido a los defectos en la red y la disminución de la banda prohibida.

## TEORÍA

La fotocatálisis es un proceso basado en reacciones de oxidación y reducción capaces de desintegrar la estructura química de contaminantes. Para esto, es necesario un material fotocatalizador capaz de activarse mediante energía luminosa<sup>6</sup>.

La eficiencia de los procesos de fotocatálisis depende de las propiedades de los materiales fotocatalizadores, que usualmente son semiconductores. Estos procesos toman lugar en la superficie del fotocatalizador con cierta banda ancha. El semiconductor es activado con luz de energía mayor o igual a la diferencia de energía entre la banda de valencia y la banda de conducción, la cual se conoce como banda prohibida<sup>7,8</sup>. Durante este proceso se genera una población de electrones en la banda de conducción y huecos en la banda de valencia. Si este par fotogenerado tiene una baja movilidad, se tendrá una mayor persistencia que pueden interactuar con las especies presentes en el medio para producir reacciones de oxidación por sustracción de electrones por parte de los huecos, y de reducción por medio de los electrones fotogenerados en la banda de conducción (figura 1).

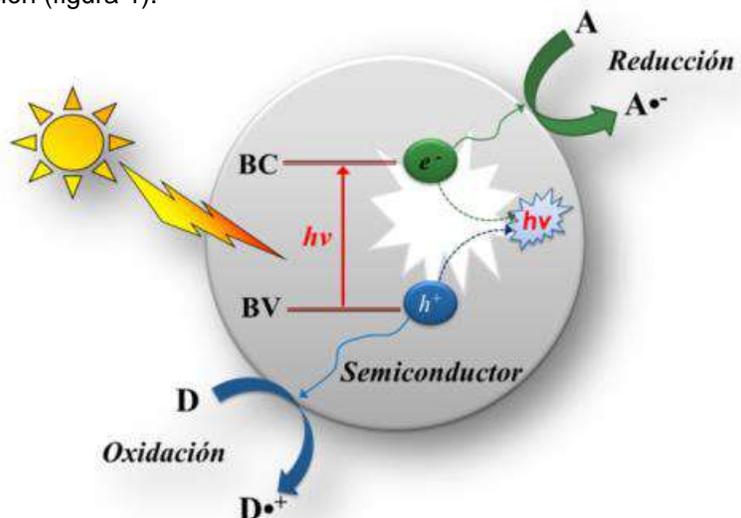


Figura 1. Mecanismo general de procesos de fotocatálisis<sup>7</sup>.

La formación de soluciones sólidas se forma cuando un gran número de impurezas entran en un cristal, sin cambiar la estructura cristalina<sup>9,10</sup>. Puede formarse una solución sólida de sustitución con dos elementos similares cuando comparten los mismos sitios en el cristal. Mientras que una solución sólida intersticial se forma cuando los átomos entran en espacios entre los átomos en un cristal. En una solución sólida de sustitución, las electronegatividades y valencia deben ser similares, además del mismo tipo de estructura. La diferencia entre los radios iónicos debe ser menor del 15%. Sin embargo, en la solución sólida intersticial, los átomos de las impurezas deben ser más pequeños que los del material original. Se utilizan típicamente muchos metales de

transición como Co, Ni, Zn y Mn. Pero el cobre (Cu) ha sido utilizado como un eficaz dopante alternativo a los metales preciosos debido a su fuerte absorción de resonancia de plasmón superficial localizada en el rango de luz visible<sup>9-11</sup>.

### PARTE EXPERIMENTAL

Mediante el método de sol-gel se sintetizaron muestras compuestas de aluminatos mixtos de Cu/Zn,  $Cu_x Zn_{1-x} Al_2O_4$  donde  $x=0.1, 0.5$  y  $0.9$ . Todas las muestras se calcinaron hasta  $900^\circ C$ . Los polvos resultantes se denominaron de acuerdo con el porcentaje de concentración de cada metal. Las pruebas fotocatalíticas se llevaron a cabo mediante la reducción del 4-nitrofenol y la degradación del colorante azul de metileno.

Para la reducción del 4-nitrofenol, se colocaron en reactores de vidrio una solución de 4-nitrofenol a 20ppm. Se determinó la banda característica mediante la técnica de espectroscopia UV-vis, en donde aparece la banda característica del 4-nitrofenol ( $\sim 317nm$ ).

A esta solución se le agregó sulfito de sodio ( $Na_2SO_3$ ). Por lo que el pico de absorción sufrió un corrimiento a  $400nm$ , el cual corresponde a los iones de sulfito.

Preparada la solución con 4-nitrofenol y  $Na_2SO_3$ , se agregó el fotocatalizador con una relación 1:1 y se irradió. Se utilizó energía solar para irradiar las muestras durante 60 minutos.

Se extrajeron alícuotas cada 10 minutos y se analizaron con el espectrómetro UV-vis para monitorear la reducción.

De manera similar, para las pruebas de degradación de azul de metileno, se preparó una solución con agua desionizada y azul de metileno a una concentración de 15ppm.

En reactores de vidrio, se colocó solución de azul de metileno y fotocatalizador en una relación 1:1. Como muestra control, se coloca solución de azul de metileno sin fotocatalizador.

Todas las muestras, incluyendo la muestra control, se irradiaron con energía solar durante 3h y se monitoreó el descenso de la banda característica del azul de metileno ( $\sim 663nm$ ) mediante espectroscopia UV-vis.

### RESULTADOS

#### REDUCCIÓN 4-NITROFENOL

Las bandas de absorción correspondientes al 4-nitrofenol y al 4-nitrofenol en presencia del sulfito de sodio se muestran en la figura 2. Donde se puede ver que al incorporar el sulfito de sodio a la solución de 4-nitrofenol, hay un desplazamiento en la banda de absorción.

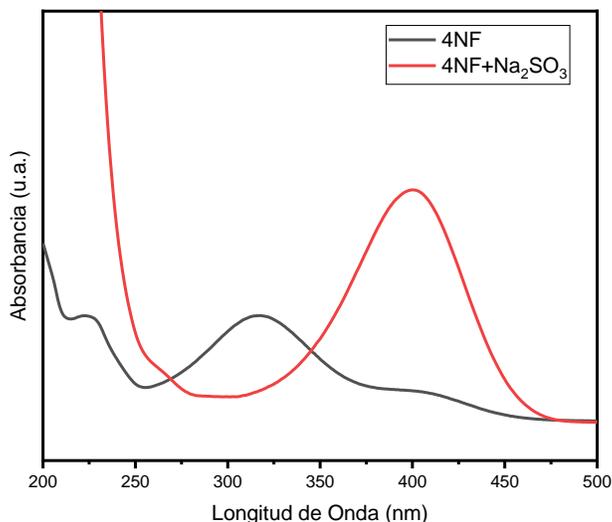


Figura 2. Espectros de absorción UV-vis de curvas características del 4-nitrofenol y 4-nitrofenol con sulfito de sodio.

Los resultados de la prueba de reducción de la molécula del 4-nitrofenol en presencia de sulfito de sodio utilizando los materiales sintetizados con distintas concentraciones de Cu/Zn, se muestran en la figura 3.

En esta prueba, se evalúa la capacidad fotocatalítica de los materiales para reducir la molécula 4-nitrofenol. Y con el propósito de disminuir las probabilidades de recombinación del par electrón/hueco fotogenerado en el proceso fotocatalítico, se empleó sulfito de sodio como agente de sacrificio. Así, se espera que el sulfito interactúe con los huecos, donando sus electrones hasta la formación de radicales sulfitos ( $\text{SO}_3^-$ ). Permitiendo de esta manera la disponibilidad de los electrones fotogenerados, que al transferirse desde la superficie del semiconductor al 4-nitrofenol, reducen el aceptor orgánico hacia la formación del 4 aminofenol.

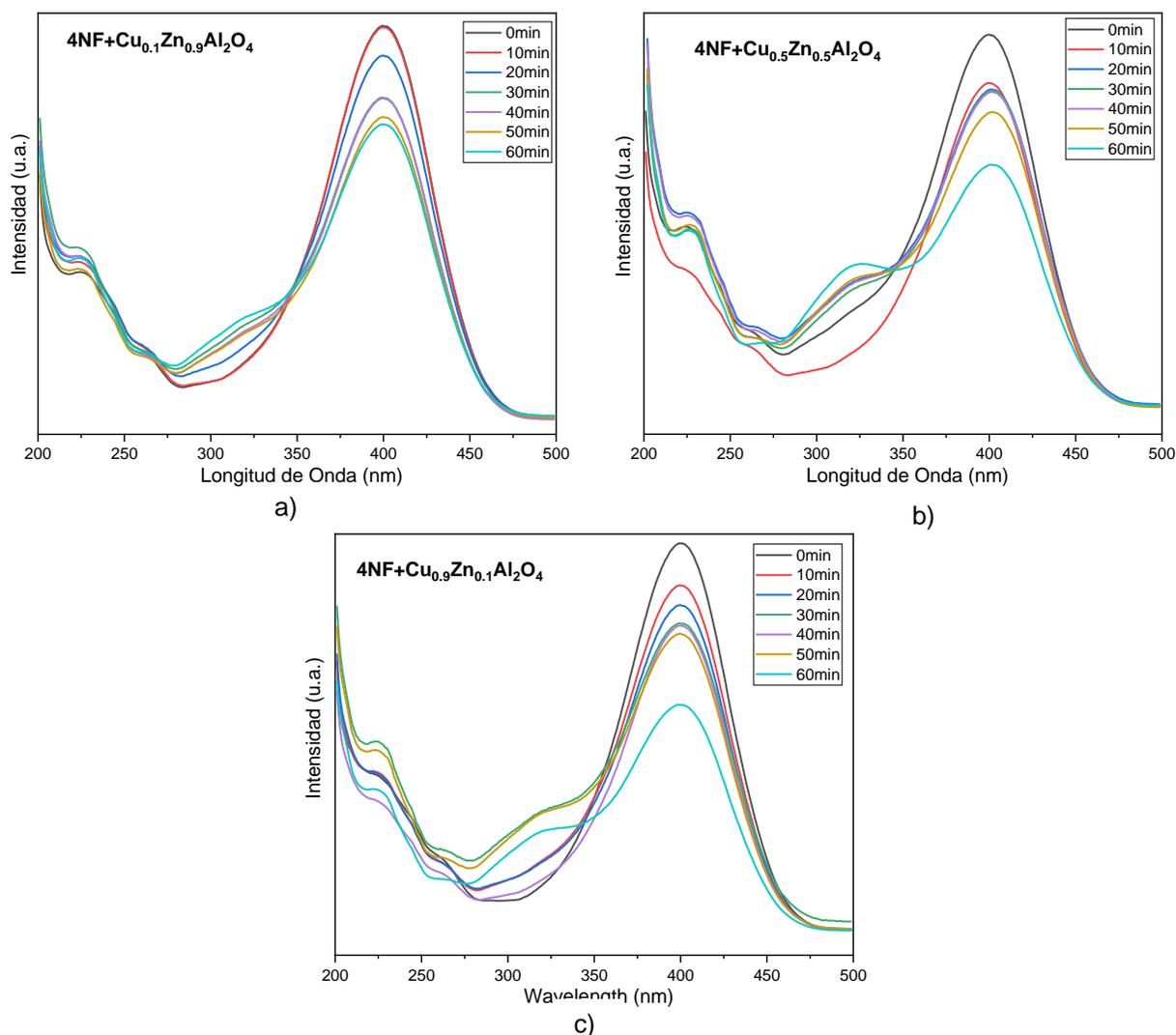


Figura 3. Graficas de reducción de molécula 4-nitrofenol usando sulfito de sodio. Los fotocatalizadores utilizados para la prueba son: a)  $\text{Cu}_{0.1}\text{Zn}_{0.9}\text{Al}_2\text{O}_4$ , b)  $\text{Cu}_{0.5}\text{Zn}_{0.5}\text{Al}_2\text{O}_4$ , y c)  $\text{Cu}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Al}_2\text{O}_4$ .

La reducción de 4-nitrofenol a 4-aminofenol ocurre a partir de la formación del ion 4-nitrofenolato como intermediario de la reacción. En ausencia de sulfito de sodio, se observa una banda de absorción a 230nm y una banda máxima 317nm característica de las especies 4-nitrofenol, al agregar el  $\text{Na}_2\text{SO}_3$ , la banda presenta un corrimiento hacia el rojo (400nm), como consecuencia de la formación del ion enolato (4-nitrofenolato) que tiene lugar en medio alcalino. Entonces, con la evolución de las reacciones se presenta una disminución en la intensidad de la banda a 400nm y a su vez un incremento en la banda a 317nm.

### DEGRADACIÓN AZUL DE METILENO

La tabla 1 muestra los resultados obtenidos para la degradación de azul de metileno. Se presentan los resultados para las muestras usando fotocatalizadores con distintas concentraciones y la muestra control.

Muestra	Porcentaje de degradación (%)
$\text{Cu}_{0.1}\text{Zn}_{0.9}\text{Al}_2\text{O}_4$	74.10
$\text{Cu}_{0.5}\text{Zn}_{0.5}\text{Al}_2\text{O}_4$	<b>87.73</b>
$\text{Cu}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Al}_2\text{O}_4$	73.33
Muestra control	82.74

Tabla1. Porcentaje de degradación de azul de metileno utilizando distintos fotocatalizadores.

Se obtuvieron porcentajes de degradación del 74.1%, 87.73%, 73.33% y 82.74%, para  $\text{Cu}_{0.1}\text{Zn}_{0.9}\text{Al}_2\text{O}_4$ ,  $\text{Cu}_{0.5}\text{Zn}_{0.5}\text{Al}_2\text{O}_4$ ,  $\text{Cu}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Al}_2\text{O}_4$  y azul de metileno, respectivamente. Se tiene que el mejor resultado corresponde  $\text{Cu}_{0.5}\text{Zn}_{0.5}\text{Al}_2\text{O}_4$ , además la solución control (azul de metileno) presentó un porcentaje mayor de degradación en comparación con los otros dos fotocatalizadores, de modo que éste degrada sin la presencia de un fotocatalizador. Pero a pesar de estos resultados, tenemos que el compuesto con mismo porcentaje de Cu/Zn, presenta una mejora en la degradación fotocatalítica del colorante.

### CONCLUSIONES

La síntesis de los materiales se llevó a cabo de manera exitosa, se obtuvieron compuestos con distintas concentraciones de Cu/Zn. La actividad fotocatalítica de los materiales se realizó para la reducción de la molécula del 4-nitrofenol a 4-aminofenol, así como la degradación del azul de metileno se llevó a cabo. En las graficas se pudo observar un descenso en la curva característica del ion enolato, por lo que se puede concluir la reducción de la molécula utilizando los distintos materiales sintetizados. Asimismo, en las pruebas de degradación pudo verse un porcentaje de degradación mayor en comparación con la muestra control para la muestra con una concentración igual de cobre y zinc.

Los materiales mostraron su capacidad como fotocatalizador para llevar a cabo distintas pruebas fotocatalíticas, tanto degradación como reducción.

### BIBLIOGRAFÍA

1. Josep Albero, Yong Peng, and Hermenegildo García. Photocatalytic CO<sub>2</sub> reduction to C<sub>2</sub>+ products. ACS Catalysis 0, 10.

2. G.N. Shrauzar and TD Guth. Photocatalytic reactions photolysis of water and photoreduction of nitrogen on titanium dioxide. *J. Am. Chem. Soc.* 99: 7189-7193, 1977.
3. E. Moctezuma, et al. Rutas de reacción para la degradación fotocatalítica de soluciones de fenol bajo diferentes condiciones experimentales. *Revista mexicana de ingeniería química* (2016), 15(1), 129-137.
4. T. Ito et al. *Water Research* 100 (2016) 458e465459
5. Y. Du, et al. *Applied Catalysis A: General* 277 (2004) 259-264
6. C. Castañeda, et al. *J Chem Technol Biotechnol* 2019; 94: 2630–2639
7. J.A. Torres Luna, J.G. Carriazo. *Rev. Fac. Cienc. Básicas* Vol. 13 (1) 2017, 42-49
8. S.J. Teichner. The origins of photocatalysis. *Journal Porous Mater* 15: 311-314, 2018.
9. F.Z. Akika et al. *Journal of Photochemistry & Photobiology A: Chemistry* 364 (2018) 542–550.
10. E. Hema et al. / *J. Supercond Nov Magn* (2015) 28:2539–2552
11. S. Kuriakose, B. Satpati and S. Mohapatra, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2015, DOI: 10.1039/C5CP01681A

## DIFERENCIA TOPOLÓGICA EN CONECTIVIDAD FUNCIONAL EN LA TAREA DE PROCESAMIENTO SEMÁNTICO

Nahomi G. Ortiz-García<sup>1</sup>, Fabiola R. Gómez-Velázquez<sup>2</sup>, Geisa Gallardo-Moreno<sup>2</sup>, Vanessa D. Ruiz-Stovel<sup>2</sup>, Andrés González-Garrido<sup>2</sup> y Aurora Espinoza-Valdez<sup>1</sup>

<sup>1</sup>CUCEI, Universidad de Guadalajara, <sup>2</sup>Instituto de Neurociencias, CUCBA, Universidad de Guadalajara.

[nahomi.ortiz@alumnos.udg.mx](mailto:nahomi.ortiz@alumnos.udg.mx)

### RESUMEN

La tarea de determinar si una oración es semánticamente congruente o incongruente, podría producir diferencias en la conectividad cerebral en presencia de errores ortográficos (homófono y heterófono). Los cambios en la conectividad cerebral producidos durante esta tarea se pueden obtener a partir de señales electroencefalográficas (EEG) a través de un análisis de coherencia. En este trabajo se presenta una metodología basada en teoría de grafos para mostrar diferencias en la conectividad cerebral durante esta tarea. Se calcularon las diferencias entre los grafos de acuerdo al tipo de oración, utilizando la distancia de Hamming y la distancia de Jaccard en la matriz de coherencia obtenida promediando cada tipo de oración en distintas bandas de frecuencia  $\delta$  (0-3 Hz),  $\theta$  (4-7 Hz),  $\alpha$  (8-13 Hz),  $\beta$  (14-30 Hz),  $\gamma$  (30-45 Hz) y  $\gamma_{alta}$  (46-60 Hz). Los resultados muestran las distancias entre cada condición por banda de frecuencia, tanto para la distancia Hamming como para Jaccard. En conclusión, se puede observar que existen diferencias topológicas en función de las distancias en el grafo de conectividad para cada condición analizada.

### INTRODUCCIÓN

El análisis de errores ortográficos en lenguajes transparentes es fundamental para comprender la base neuronal de los procesos de lectura [1, 2]. El estudio de la conectividad cerebral subyacente a las tareas de decisión semántica que involucran errores de ortografía podría ayudar a revelar patrones de procesamiento funcional reconocibles o distintivos.

La tarea de determinar si una oración es semánticamente congruente o incongruente, podría producir diferencias en la conectividad cerebral en presencia de errores ortográficos. Los cambios en la conectividad producidos durante esta tarea se pueden obtener a partir de señales de electroencefalograma (EEG) a través de un análisis de coherencia. El análisis de coherencia muestra conexiones entre los canales de EEG y está representado por matrices que pueden analizarse más a fondo mediante la teoría de grafos [3]. En este trabajo se utilizan estas técnicas como parte de una metodología que tiene como objetivo mostrar diferencias topológicas en la conectividad cerebral en la tarea de determinar si una oración es semánticamente congruente o incongruente independientemente de los errores ortográficos.

### TEORÍA

#### Protocolo Experimental

Para este trabajo, se utilizaron los datos electroencefalográficos obtenidos de una tesis de maestría donde se aplicó una tarea de decisión semántica a 135 oraciones de seis palabras, en la palabra de cierre de cada oración el participante debía decidir si ésta era congruente o no con el resto de la oración [2]. La palabra de cierre podía ser: congruente, congruente con error homófono, congruente con error heterófono, incongruente e incongruente con error homófono, véase la Figura 1. El registro de la tarea semántica se realizó en 30 sujetos (15 mujeres y 15 hombre), con 27 oraciones por cada una de las condiciones.

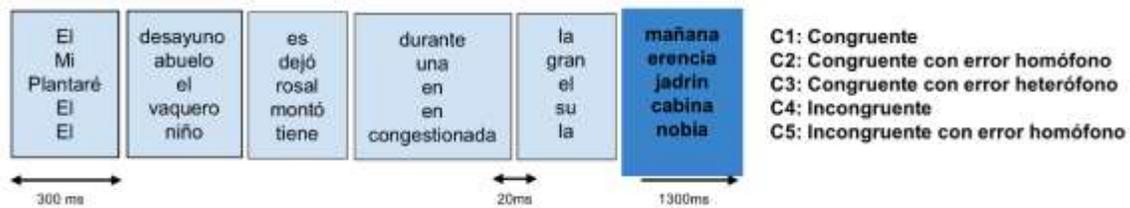


Figura 1: Protocolo experimental.

Para el análisis de conectividad cerebral se trabajó con todas las bandas de frecuencia y se usó el análisis de coherencia [3]. Dado que la matriz de coherencia se obtiene por pares de electrodos, esto es, el valor obtenido representa el peso de conexión entre cada par de electrodos. Por lo tanto, la matriz de coherencia se puede representar en un grafo.

### Grafos

Un grafo  $G$  es una tripla ordenada  $(V(G), E(G), \Psi_G)$  que consiste de un conjunto no vacío  $V(G)$  de nodos, de un conjunto  $E(G)$  de aristas y de una función de incidencia  $\Psi_G$  que asocia a cada arista un par ordenado (no necesariamente distintos) de nodos de  $G$ .  $\Psi_G: E(G) \rightarrow W(G)$  donde  $W(G)$  es el conjunto de par de nodos definido como  $W(G) = \{\{u, v\} / u, v \in V(G)\}$ ,  $\Psi_G(e) = \{u, v\}, \Rightarrow e \in E(G)$ , esto es  $e$  une a  $u$  y  $v$  [4].

La distancia de Hamming [5] está dada por el número de conexiones diferentes sobre todas las posibles entre dos grafos  $g1$  y  $g2$  con el mismo número de nodos  $N$ :

$$H_D(g1, g2) = \frac{|E_{g1 \cup g2}| - |E_{g1 \cap g2}|}{N(N-1)/2} \quad (1)$$

Mientras que por otro lado la distancia de Jaccard [6], en lugar de tomar todas las conexiones, únicamente considera las intersecciones y uniones entre ellos:

$$J(g1, g2) = 1 - \frac{|E_{g1 \cap g2}|}{|E_{g1 \cup g2}|} \quad (2)$$

### Metodología

A continuación se describen los pasos que se llevaron a cabo en el procesamiento de matrices (ver Figura 2):

1. Con la finalidad de estandarizar los datos, las matrices de coherencia de cada sujeto, fueron normalizadas.
2. Para cada tipo de condición (C1, C2, C3, C4, C5), se promediaron las matrices en función de las distintas bandas de frecuencia: Delta, Teta, Alfa, Beta, Gamma y GammaAlta.
3. Se les obtuvo la moda por intervalos, dejando las conexiones más predominantes en cada una de las bandas, con su correspondiente condición.
4. Se generaron los grafos.
5. Se cuantificaron las diferencias entre grafos promedio por condición (C1-C2, C1-C3, C1-C4, C1-C5), a través de la distancia de Hamming y de Jaccard.

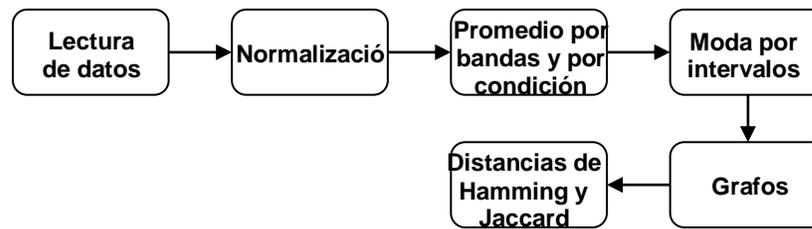


Figura 2. Diagrama de flujo de la metodología empleada.

## RESULTADOS

Con la finalidad de observar las diferencias topológicas de conectividad que se generan en cada una de las condiciones, se construyeron los grafos promedio correspondientes a cada una de las condiciones. Posteriormente, se calculó la distancia de Hamming y de Jaccard entre pares de grafos obtenidos para cuantificar las diferencias entre ambas condiciones: C1-C2, C1-C3, C1-C4 y C1-C5.

La Figura 3 muestra los valores obtenidos de la distancia de Hamming comparando los grafos promedio de cada condición en función de la banda de frecuencia. Se puede observar que en C1-C2 y C1-C5 la banda GammaAlta es la que tiene mayor diferencia entre los grafos promedio, mientras que para C1-C3 es la banda Gamma y para C1-C3 es en la banda Delta y la banda GammaAlta. Por otro lado, podemos observar los valores de la distancia de Jaccard de los grafos promedio por banda de frecuencia. La mayor diferencia entre los grafos promedio por condición se encuentra en la banda GammaAlta para C1-C2, C1-C4 y C1-C5, mientras que para C1-C3 es en la banda Delta.

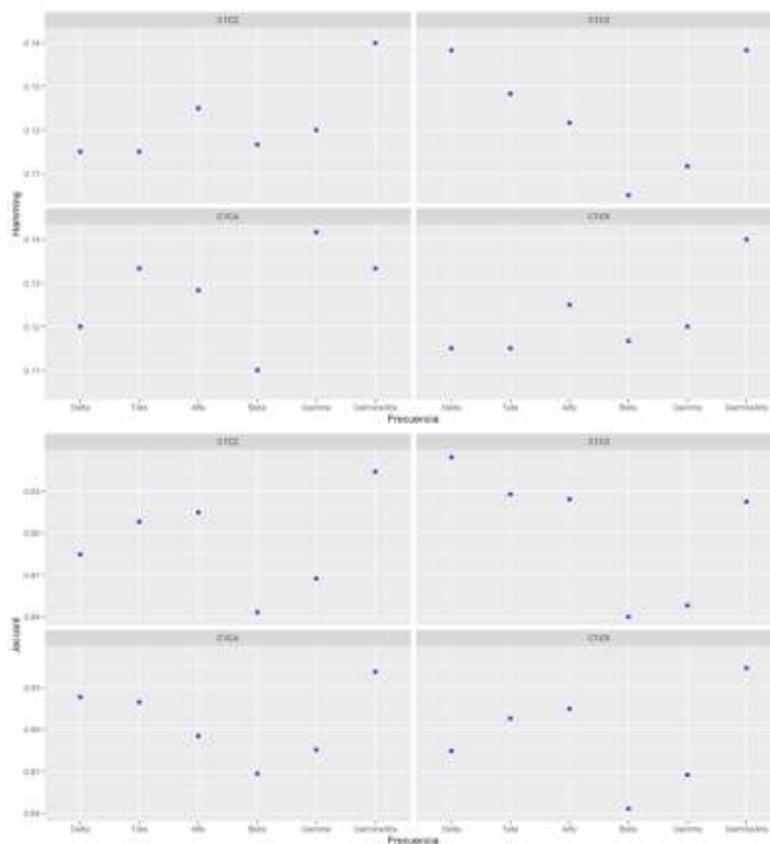


Figura 3: Distancia de Hamming y de Jaccard entre condiciones por banda de frecuencia. El grado de conectividad por condición para cada banda de frecuencia se muestra en la Figura 4, donde se puede observar que dependiendo de la condición es la variabilidad del grado de conectividad.

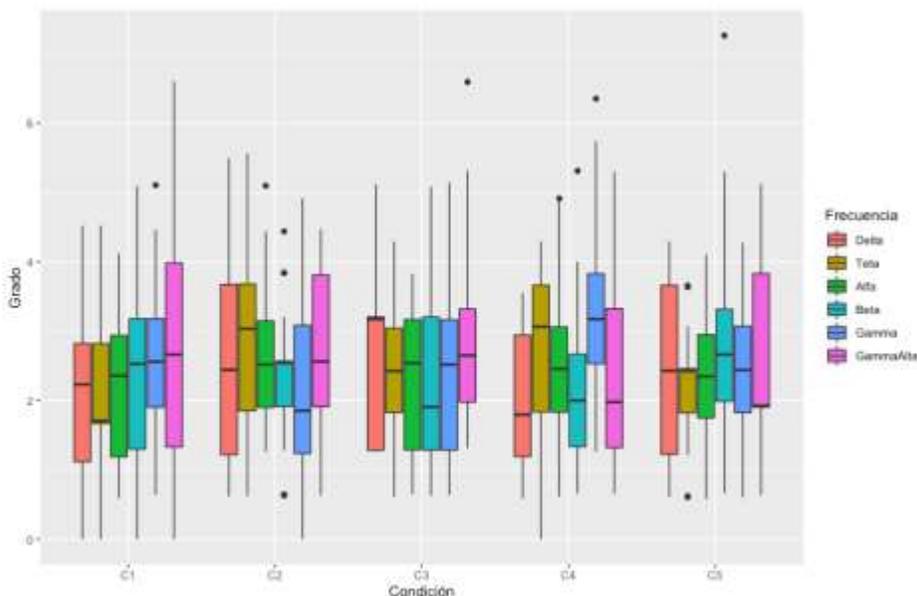


Figura 4: Grado de conectividad por condición por banda de frecuencia.

Por otro lado, en la Figura 5 y 6 se muestran los grafos promedio de cada una de las condiciones para las bandas de frecuencia GammaAlta y Delta, donde se puede observar la diferencia topológica que existe entre las condiciones, así como el valor máximo de su conexión (véase Figura 3).

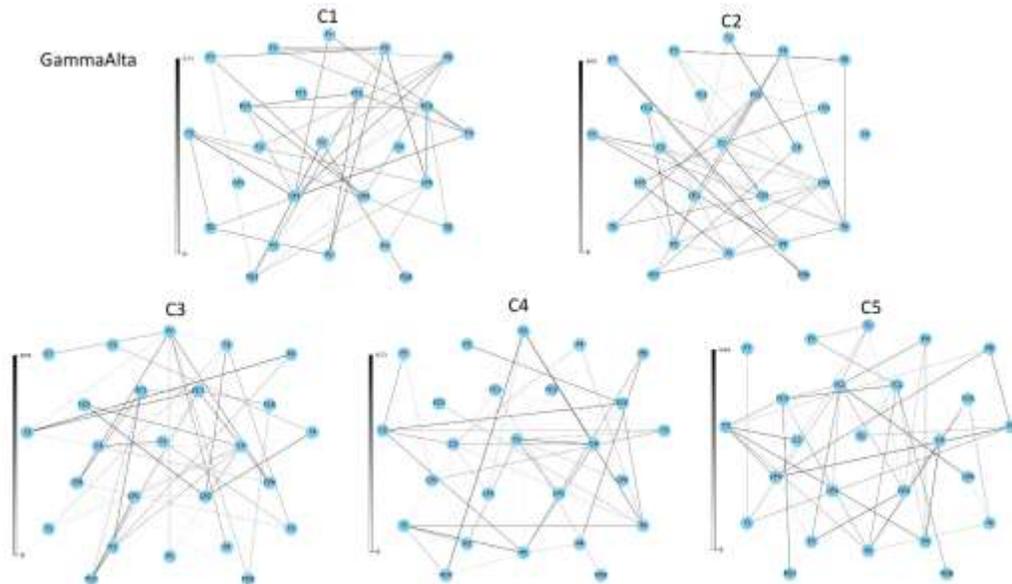


Figura 5: Grafo de conectividad por condición en la banda de frecuencia GammaAlta, donde la distancia de Jaccard determina que existe una mayor diferencia entre C1-C2, C1-C4 y C1-C5.

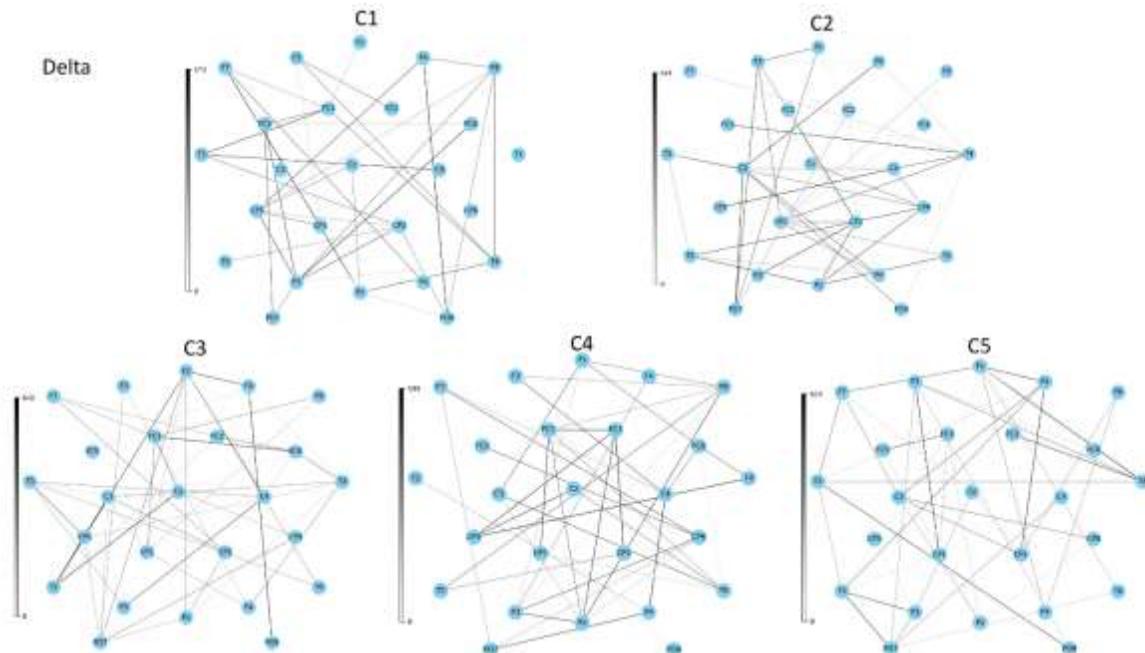


Figura 6: Grafo de conectividad por condición en la banda de frecuencia Delta, donde la distancia de Jaccard determina que existe mayor diferencia entre C1-C3.

## CONCLUSIONES

En los resultados obtenidos de análisis topológico de conectividad funcional en la tarea de procesamiento semántico, podemos observar que donde existe mayor diferencia de conectividad de acuerdo a las distancias:

- Hamming: cuando se comparan las condiciones, para C1-C2 y C1-C5 está en la banda GammaAlta, para C1-C4 en la banda Gamma y C1-C3 en la banda Delta.
- Jaccard: cuando se comparan las condiciones, para C1-C2, C1-C4, C1-C5 está en la banda GammaAlta, mientras que para C1-C3 está en Delta.

En conclusión, se puede observar que existen diferencias topológicas en función de las distancias en los grafos de conectividad para cada condición analizada en las diferentes bandas de frecuencia.

## BIBLIOGRAFÍA

1. Fabiola Gómez-Velázquez, Juan Quinones-Beltran, Vanessa Ruiz-Stovel, Andrés González-Garrido, 2019. An ERP study: interplay of phonological and orthographic processing during reading in spanish. *PSYCHOPHYSIOLOGY*, Volume 56, pp. S122-122.
2. Juan Quiñones-Beltran, 2019. Efecto del error ortográfico sobre el procesamiento semántico. Universidad de Guadalajara.
3. G. Quiroz, A. Espinoza-Valdez, R-A- Salido-Ruiz, L. Mercado, 2017. Coherence analysis of EEG in locomotion using graphs. *Revista Mexicana de Ingeniería Biomédica*, Vol 38 No. 1, pp 235-246.
4. D. Reinhard, "Graph theory". *Grad. Texts in Math*, Vol. 101, 2005.
5. Hamming, R. W., 1950. Error Detecting and Error Correcting Codes. *The Bell System Technical journal*, 29(2), pp. 147-160.
6. Real, R. & Vargas, J. M., 1996. The Probabilistic Basis of Jaccard's Index of Similarity. *Systematic Biology*, Volume 45, pp. 380-385.

## ECUACIÓN DE DIRAC EN UNA BOLSA ESFÉRICA

Salma Cristina Luna Ramos, Eduardo Salvador Tututi Hernández

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, UMSNH.  
email: [lunasalma5@gmail.com](mailto:lunasalma5@gmail.com), [eduardo.tututi@umich.mx](mailto:eduardo.tututi@umich.mx).

### RESUMEN

En este trabajo se presentan soluciones a la ecuación de Dirac de acuerdo al modelo de la bolsa de MIT. Como se sabe, este modelo explica el fenómeno de confinamiento de los quarks dentro de los hadrones. Nosotros nos centramos en el caso de una bolsa esférica. Encontramos las funciones de onda que describen los estados de los quarks dentro de la bolsa y los diferentes niveles de energía de los estados ligados. Mediante el uso del tensor de energía-momento determinamos las masas de mesones y bariones.

### INTRODUCCIÓN

En la naturaleza se observan cuatro interacciones o fuerzas fundamentales. Dos de estas fuerzas están presentes en fenómenos físicos que ocurren en la vida cotidiana: La fuerza gravitacional y la fuerza electromagnética. Las otras dos fuerzas que se denominan como la fuerza débil y la fuerza fuerte, se manifiestan a nivel atómico y subatómico. El modelo estándar (ME) de las partículas elementales es la teoría física que es ampliamente aceptado como la teoría que describe a las partículas fundamentales (que conforman la materia) y las interacciones entre las partículas electromagnéticas, débiles y fuertes. Las predicciones de este modelo han sido corroboradas con gran precisión en diversos experimentos [1]. Debido a que la intensidad de la fuerza gravitacional es muy débil, del orden de  $10^{-34}$  veces más débil que la interacción electromagnética, y las complicaciones para tener a la interacción gravitacional una teoría cuántica de campos satisfactoria, esta queda fuera del ME. De acuerdo al ME, la materia está conformada por fermiones (partículas de espín 1/2) que son los quarks tipo:  $u$ ,  $d$ ,  $c$ ,  $s$ ,  $t$  y  $b$  (respectivamente, up, down, charm, strange top y bottom) y los leptones:  $e$ ,  $\mu$ ,  $\tau$  (respectivamente, electrón muón y tau) y sus respectivos neutrinos. Los quarks interactúan mediante la fuerza electrodébil (palabra que se deriva de la unificación de la interacción electromagnética y débil) y también mediante la interacción fuerte; a diferencia de los leptones, estos solo interactúan mediante la interacción electrodébil.

La gran mayoría de las predicciones teóricas que se han derivado del ME y que se han comprobado hasta con 9 cifras significativas, se basan en cálculos perturbativos. Por ejemplo, la anomalía de momento dipolar magnético del electrón se calcula tomando en cuenta hasta el décimo orden en teoría de perturbaciones y para el cual se debe tomar en cuenta 12672 diagramas de Feynman [2]. El cálculo conlleva amplia experiencia en este tipo de cálculos. Sin embargo, la coincidencia, como ya mencionamos, es asombrosa con las respectivas mediciones experimentales. El desarrollo perturbativo es posible debido a que la constante de acoplamiento de la teoría que describe las interacciones electrodinámicas, la electrodinámica cuántica (QED), es  $\alpha = e^2/4\pi \approx 1/137$ , resulta ser precisamente la constante de estructura fina, (en unidades naturales) siendo  $e$  la carga del electrón. Consecuentemente,  $\alpha$  resulta muy pequeña y es utilizada como parámetro perturbativo. Para el caso de las interacciones fuertes, las cuales son descritas, al igual que QED, por una teoría de norma. Sin embargo, el Lagrangiano de la teoría es invariante bajo transformaciones de fase locales del grupo no abeliano SU(3) de color, lo cual da lugar las autointeracciones entre los mismos campos que describen la interacción fuerte [3]. La teoría de norma que describe a las interacciones fuertes es llamada QCD. Debido a las autointeracciones entre los campos de norma, QCD resulta sea más compleja que el caso de QED. El análogo en QCD de la constante de estructura fina de QED. es la constante de estructura fuerte, denotada como  $\alpha_s$ , la cual, estrictamente hablando no es constante, sino que cambia con la energía. En efecto, a altas energías, digamos mayores a 1 GeV (un giga-electron-volt),  $\alpha_s$  es suficientemente

pequeña como para a cabo un desarrollo perturbativo de la teoría similar al de QED, pero para energías menores este desarrollo ya no es posible ya que  $\alpha_s$  resulta cercana a la unidad, e incluso para energías la constante puede ser mayor. Consecuentemente, los quarks pueden sentir la interacción debido a la presencia de otros quarks muy intensa o muy débil dependiendo de la energía de los mismos. A esto en el argot de la especialidad se les conoce respectivamente libertad asintótica (a altas energías) y esclavitud infrarroja (a bajas energías). Esto último explica porque los quarks no se encuentran de manera libre en la naturaleza y están confinados dentro de las partículas denominadas hadrones, tales como los protones, los neutrones o los piones. Se han hecho amplias investigaciones sobre las propiedades de los hadrones utilizando varios métodos o enfoques en el régimen no perturbativo. Entre otros podemos mencionar a la llamada teoría de Lattice QCD [4] o el método basado en propiedades analíticas de la matriz  $S$  [5]. En particular se han construido modelos para los hadrones. Un modelo que toma esto como principio los modelos de la bolsa, y en particular el modelo del MIT [6]. La idea del modelo de la bolsa está basada, esencialmente, en que si los quarks y los mediadores de la interacción fuerte (los gluones) están confinados dentro de los hadrones una cierta región, digamos esférica de radio  $R$ , debe ser posible simular los efectos del confinamiento mediante condiciones de frontera apropiadas sobre la superficie esférica en cuestión, por ejemplo, suponer que la función de onda se anula sobre la esfera.

Se han presentado soluciones a la ecuación de Dirac, de acuerdo al modelo de la bolsa de MIT para el caso de quarks sin masa con la finalidad de obtener propiedades estáticas de hadrones. Sin embargo, hasta nuestro conocimiento no hay soluciones para el espectro de energía de quarks en hadrones de acuerdo al modelo mencionado. En este trabajo se analizan soluciones para el espectro energía de quarks masivos.

### FORMALISMO BÁSICO

La ecuación que describe a fermiones libres sin estructura es la llamada ecuación de Dirac. Esta se puede escribir en forma covariante como

$$(\gamma_\mu \partial^\mu - m)\psi = 0 \quad (1)$$

donde  $\gamma_\mu$ , son las matrices de  $4 \times 4$  de Dirac y  $\psi$  es la función de onda, la cual representa a un vector columna de  $4 \times 1$  cuyas entradas dependen de la posición y del tiempo. Como ya hemos mencionada en la parte anterior, los modelos de bolsa de hadrones imponen condiciones de frontera sobre la superficie de la bolsa, la cual no necesariamente tiene una geometría esférica. Si suponemos una bolsa esférica de radio  $R$ , la condición de frontera que debe satisfacer  $\psi$  en (1), de acuerdo al modelo de la bolsa del MIT es

$$i\hat{n}(\theta, \phi) \cdot \vec{\gamma}\psi(x) = \psi(x) \Big|_{r=R}, \quad (2)$$

donde el vector unitario  $\hat{n}$ , es normal a la superficie de la bolsa. Para solucionar la Ec. (1), usamos el sistema de coordenadas esféricas y recurrimos al proceso de separación de variables. Primeramente, separamos la parte temporal de la parte espacial y posteriormente la parte angular de la radial. Cabe señalar que, en general, cuando el sistema bajo estudio puede ser descrito por un potencial central, los estados del sistema quedan clasificados mediante un conjunto de 4 operadores que conmutan entre si [7]. En consecuencia, los estados quedan clasificados en términos de los números cuánticos que en esencia quedan determinados mediante los valores propios de los operadores que conmutan entre si. Sin mayor preámbulo, las soluciones a (1) se pueden escribir como

$$\psi_{E,k,j,l,m} = N' \left( \begin{array}{c} \sqrt{\frac{E+mc^2}{E}} j_{\tilde{k}-1}(\epsilon r) Y_{j,l,m}^\uparrow(\theta, \phi) \\ -i \sqrt{\frac{E-mc^2}{E}} j_{\tilde{k}}(\epsilon r) Y_{j,l',m}^\downarrow(\theta, \phi) \end{array} \right) e^{-iEt/\hbar}, \tag{3}$$

donde,  $N'$  es una constante de normalización y  $E$ , el valor de la energía, la cual es a determinar. En (3) se está considerando la solución para  $\tilde{k} = |k|$ , con  $k=-1,2,\dots$ , y  $l'=l+1$ , siendo  $l$  un número entero positivo,  $j = l \pm 1/2$ , y  $m$  puede tomar valores semienteros acotados por  $|m| \leq j$ . Los símbolos  $j_k(x)$  son las funciones de Bessel esféricas de orden  $k$ . Las funciones  $Y_{j,l,m}^\uparrow$  y  $Y_{j,l,m}^\downarrow$  son las llamadas funciones armónicas; estas se pueden expresar en función de los armónicos esféricos como sigue

$$Y_{j,l,m}^\uparrow = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \left( \begin{array}{c} \sqrt{l+m+\frac{1}{2}} Y_l^{m-\frac{1}{2}} \\ \sqrt{l-m+\frac{1}{2}} Y_l^{m+\frac{1}{2}} \end{array} \right), \quad Y_{j,l,m}^\downarrow = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \left( \begin{array}{c} -\sqrt{l-m+\frac{1}{2}} Y_l^{m-\frac{1}{2}} \\ \sqrt{l+m+\frac{1}{2}} Y_l^{m+\frac{1}{2}} \end{array} \right) \tag{4}$$

siendo  $Y_l^m$  los armónicos esféricos. Las soluciones para valores de  $k$  positivo se obtienen de una manera simple si hacemos la sustitución en la Ec. (3) como sigue:  $i \rightarrow -i$  y de manera simultánea  $\tilde{k} \rightarrow k + 1$ .

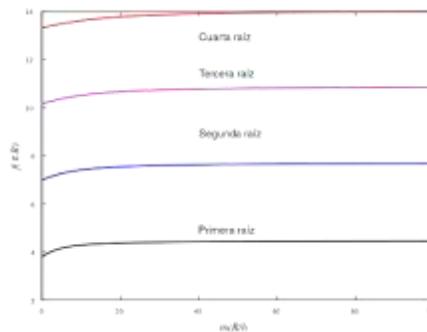
### ESPECTRO DE ENERGÍA

El espectro de energía, es determinado por los diferentes valores o niveles que pueda tomar la energía  $E$ . Para encontrar los niveles de energía, recurrimos a la condición de frontera en la Ec. (2). Tomando en cuenta las diferentes propiedades los armónicos esféricos y relaciones de relaciones de recurrencia de las funciones de Bessel esféricas [8]. Dependiendo de los valores de  $k$ , se tienen dos relaciones una para valores positivos y otra para valores negativos. A manera de ejemplo solo presentaremos el primer caso. La ecuación resultante es

$$f(\epsilon R) = \sqrt{E + mc^2} j_k(\epsilon R) + \sqrt{E - mc^2} j_{k-1}(\epsilon R) \tag{5}$$

donde  $m$  es la masa del quark, y  $\epsilon = \sqrt{E^2 - mc^2}/c\hbar$ . Los ceros de la Ec. (5) nos da el espectro de energía. Antes de obtener las soluciones numéricas en general a esta ecuación, podemos obtener soluciones en casos particulares. El primer caso es cuando la masa del quark es cero. En este caso recobramos el caso que se presenta en la literatura. Para este caso se tiene que el valor mínimo de la energía, lo que define el estado base, cumple con la relación:  $E \approx 2.04\hbar c/R$ . Otros valores que se pueden obtener son en el límite en que la masa del quark es muy grande,  $m \rightarrow \infty$ . Este caso corresponde al límite no relativista y la Ec. (5) se reduce a  $j_k(\epsilon R) \approx 0$ . Lo cual indica que las soluciones de la energía corresponden con los ceros de la correspondiente función de Bessel esférica. Otros valores de energía se muestran en la Fig. 1, en la cual el eje x se indica la masa  $mc^2$  medida en MeV, nótese que se mide en Mev-fm, siendo un fm igual a  $10^{-15}$  metros. Las diferentes curvas que se muestran corresponden a los ceros de la función que se muestra en la Ec. (5) como función de  $mc^2$  medida en MeVs, tomando el radio de la bolsa igual a la unidad. Las soluciones, como ya se ha mencionado el caso  $m = 0$ , ya se han estudiado.

Fig. 1



### CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS

En este trabajo se ha presentado un estudio de los estados de quarks masivos que se mueven libremente dentro de los hadrones, de acuerdo al modelo de la bolsa del MIT. Se analizaron los casos no-relativista (que se obtiene en el límite de masas de quarks muy grandes) y ultrarelativista (masa de quarks igual a cero). Los estados obtenidos para los quarks pueden ser el punto de partida para determinar las masas de los hadrones cuando se tome en cuenta los gluones. En este respecto ya se han hecho modelos para la interacción entre quarks mediante potenciales lineales o cuadráticos. Entonces las funciones de onda obtenidas pueden ser empleados para un estudio de tipo perturbativo.

### BIBLIOGRAFÍA

1. P.A. Zyla et al. (Particle Data Group), Prog. Theor. Exp. Phys. 2020, 083C01 (2020) and 2021 update.
2. Tatsumi Aoyama, Masashi Hayakawa, Toichiro Kinoshita, and Makiko Nio, "Tenth-Order QED Contribution to the Electron  $g-2$  and an Improved Value of the Fine Structure Constant", Phys. Rev. Lett. 109, 111807 (2012).
3. Matthew D. Schwartz, "Quantum Field Theory and the Standard Model" (Cambridge University Press, Cambridge, UK 1994).
4. I. Montvay and G. Münster, "Quantum Field on a Lattice" (Cambridge University Press, Cambridge, UK 1994).
5. S. Donachie, P. Landshoff, and O. Natchmann, "Pomeron Physics and QCD" (Cambridge University Press, Cambridge, UK 2002).
6. P. Hasenfratz and J. Kuti, Phys. Reports C75, 1 (1978).
7. J. J. Sakurai, "Advanced Quantum Mechanics" (Addison Wesley, Canada 1967).
8. G. B. Arfken, H. J. Weber, "Mathematical Methods for Physicists, 5<sup>th</sup> Ed." (Academic Press, San Diego, USA 2001).

## EXCITACIÓN DE PLASMONES DE SUPERFICIE EN SISTEMAS FOTÓNICOS 1D QUE CONTIENEN METAMATERIAL DISPERSIVO COMO MEDIO ABSORBENTE

José Eduardo Medina Magallon, Sergio Sánchez López, Petr Zhevandrov Bolshakova y Héctor Pérez Aguilar

Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo  
e-mail:jmedinamagallon@gmail.com.

### RESUMEN

En los últimos años hemos presenciado cómo la nanotecnología permite reducir varios dispositivos importantes (sensores, chips, fibras, etc.), abriendo un nuevo horizonte para sus aplicaciones. Además del desarrollo de la plasmónica que es un área de investigación dentro del campo de la nanofotónica que se ocupa principalmente en el estudio de los procesos de interacción de la luz y los electrones de conducción en interfaces metal-dieléctricas o en nanoestructuras metálicas. Esta manipulación de la luz está basada en las propiedades de los plasmones de superficie que son oscilaciones colectivas del gas de electrones en un metal. De esta manera, al acoplarse las ondas de luz con las oscilaciones electrónicas forman una nueva cuasipartícula llamada Plasmón Polaritón Superficial (SPP) que se propaga a través de la superficie de la estructura de tamaño nanométrico. En este trabajo se presenta un estudio numérico de una estructura fotónica periódicamente en 1D (guía de ondas de cristal fotónico (PCW)) que contiene inclusiones de metamaterial dispersivo que ya es considerado como un medio absorbente; es decir, se toma en cuenta para el modelo numérico la parte compleja de las funciones constitutivas del metamaterial. Los cálculos numéricos se realizaron mediante la técnica conocida como el Método de la Ecuación Integral. Se presentan los resultados numéricos de una PCW de longitud finita que está compuesta de metamaterial dispersivo, mostrando la presencia de un modo SPP a la frecuencia  $\omega_r = 0.0475$  cuando todavía no se considera el metamaterial como medio absorbente. Además, se muestran los cambios que sufre la excitación del modo SPP cuando el metamaterial es absorbente, lo que fue posible determinar a través del cálculo de la reflectancia, así como de la fase  $\phi$  del campo esparcido. Estas ondas de superficie en la PCW propuesta permiten ser otra alternativa de desarrollo de dispositivos ópticos que produzcan energías renovables, además de innumerables aplicaciones en diversos campos de la ciencia y la tecnología que abarcan desde la biomedicina hasta las telecomunicaciones.

### INTRODUCCIÓN

El reciente desarrollo de las estructuras de cristal fotónico ha creado interés entre científicos de diferentes campos [1]. Los Cristales Fotónicos (CFs) constituyen arreglos periódicos de diferentes materiales con una celda unitaria de dimensión del orden de la longitud de onda, tienen el potencial de desarrollar una nueva tecnología de circuitos ópticos integrados. Otros tipos de materiales estructurados que han atraído recientemente mucho interés son los metamateriales o materiales izquierdos (LHMs) [2,3], que deben su nombre al hecho de que los vectores  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{H}$  y  $\mathbf{k}$  forman un sistema izquierdo para una onda que se propaga a través de estos medios.

Muchas de las propiedades fundamentales del estado sólido pueden ser descritas con una analogía de un sólo electrón moviéndose en un arreglo periódico de átomos a los que se les asocia una carga positiva, abriendo un nuevo horizonte para sus aplicaciones. Por ello, el desarrollo nanotecnológico es muy importante en la actualidad, ya que permite reducir el tamaño de varios dispositivos electrónicos. Sin embargo, esta reducción deriva en problemas que perjudican la velocidad de funcionamiento de los componentes electrónicos de los circuitos integrados. Entre estos problemas cabe destacar el hecho de que las interconexiones metálicas que transportan información digital dentro de los chips disminuyen su capacidad a medida que el sistema se hace más pequeño. Esta limitación se ha hecho presente en los últimos años, en los que el ritmo de aumento de la velocidad de los microprocesadores ha disminuido en gran medida [4].

Durante los últimos años, la tecnología nanofotónica se ha convertido en una seria para resolver los problemas que acabamos de mencionar. La introducción de los cristales fotónicos ha aportado algunas soluciones en este aspecto, pues un cristal fotónico tiene un tamaño de varias longitudes de onda, ya que su periodicidad típica es del orden de la mitad de la longitud onda. Así, la nanofotónica basada en plasmones de superficie (SPs), también denominada plasmónica, constituye uno de los caminos más prometedores para conseguir la miniaturización de circuitos fotónicos. Esto debido a que la plasmónica combina los dos ingredientes más importantes para el diseño de este tipo de circuitos: la rapidez de operación de la fotónica y la miniaturización de la electrónica [4,5].

La plasmónica, se caracteriza por el confinamiento de campos electromagnéticos en volúmenes inferiores a la longitud de onda como resultado de la interacción de una onda electromagnética y los electrones de conducción en interfaces metal-dieléctrico o en nano estructuras metálicas [6]. Además, el estudio de la propagación de la luz a través de la materia, particularmente en estado sólido, comprende los fenómenos Ópticos exhibidos por sólidos incluyen la absorción selectiva, la dispersión, la doble refracción, los efectos de polarización y los efectos electroópticos y magnetoópticos. Por ello, los metamateriales, que exhiben propiedades físicas insólitas no presentes en la naturaleza, dando lugar a medios de transmisión que presentan una velocidad de fase y una velocidad de grupo antiparalelas (se propagan en dirección opuesta) para sintetizar respuestas selectivas; es decir, dejan pasar un determinado rango de frecuencias de una señal y atenúan el paso del resto. Además, los metamateriales podrían utilizarse para construir una lente perfecta que, teóricamente, no estaría limitada por la longitud de onda utilizada [7]. Así el interés de la comunidad científica por la disciplina de metamateriales ha ido creciendo de manera constante, con la aparición de nuevas líneas de investigación y el desarrollo de nuevas aplicaciones. En la actualidad, la implementación de lentes perfectas (tanto en el dominio óptico como en otros dominios como el acústico), como también el desarrollo de películas delgadas que se utilicen como recubrimiento en el desarrollo de diferentes dispositivos que aprovechen la absorción que presentan los metamateriales para que estos generen energía de manera más eficiente, como es en la implementación en celdas solares que es, junto con la invisibilidad, una de las áreas de investigación más activas a nivel mundial en el campo de metamateriales [8].

Este artículo está organizado de la siguiente forma. En la sección de Teoría presentamos el sistema en estudio e introducimos el modelo de Drude-Lorentz, así como un método integral el cual es utilizado para el cálculo de los modos electromagnéticos, y su respuesta óptica [9]. En la sección de Resultados presentamos algunos resultados numéricos preliminares del cálculo de la respuesta óptica de una guía de ondas de cristal fotónico (PCW) que contiene inclusiones con superficies lisas de LHM dispersivo, los cuales exhiben la presencia de un modo SPP en el sistema propuesto para la polarización TE. También, mostramos los resultados correspondientes a las funciones de permitividad eléctrica  $\epsilon(\omega)$  y de la permeabilidad magnética  $\mu(\omega)$  bajo el modelo de Drude-Lorentz para el LHM utilizado. Estos advierten el cambio en la región de existencia del LHM Finalmente, se presentan las principales conclusiones de este trabajo en la última sección.

## TEORÍA

El interés de este trabajo se refiere a la excitación de modos SPP en una guía de onda de cristal fotónico (PCW) de superficies planas y un arreglo periódico de inclusiones cilíndricas de metamaterial dispersivo cuando este es considerado como un medio absorbente. La forma de estudio será con la aplicación de un método numérico basado en la segunda identidad de Green para resolver la ecuación de Helmholtz.

En el caso de que alguno de los materiales que componen la PCW se trate de un medio conductor o de un LHM, el comportamiento de este al interactuar con la luz se hará a través del Modelo de Drude-Lorentz; ya que este modelo describe de manera adecuada las características de los medios conductores [10].

### Modelo de Drude-Lorentz

Partiremos del movimiento de los electrones en un oscilador armónico amortiguado y asumiremos que los electrones se mueven en la misma dirección que el campo eléctrico. Por lo que, este modelo describe la respuesta del vector de polarización con respecto del campo eléctrico, mediante [11]

$$\frac{d^2 P_j}{dt^2} + \gamma_L \frac{dP_j}{dt} + \omega_0 P_j = \varepsilon_0 \chi_L E_j,$$

donde el primer término describe la aceleración de las cargas,  $\gamma_L$  es el coeficiente de amortiguamiento, el tercer término representa las fuerzas de restitución con frecuencia característica  $\omega_0$  y cuarto término incluye un coeficiente de acoplamiento  $\chi_L$ . Considerando una dependencia temporal  $e^{i\omega t}$  obtenemos la solución dada por la polarización,

$$P_j(\omega) = \frac{\chi_L}{-\omega^2 + i\gamma_L \omega + \omega_0^2} \varepsilon_0 E_j(\omega), \quad (1)$$

donde  $\varepsilon_0$  es la permitividad del vacío.

Para pequeños amortiguamientos  $\frac{\gamma_L}{\omega_0} \ll 1$  la respuesta es resonante a la frecuencia propia  $\omega_0$ . Entonces la polarización y el campo eléctrico están relacionados por la susceptibilidad eléctrica como

$$\chi_{e,L} = \frac{P_j(\omega)}{\varepsilon_0 E_j(\omega)} = \frac{\chi_L}{-\omega^2 + i\gamma_L \omega + \omega_0^2}. \quad (2)$$

Por lo tanto, la permitividad eléctrica está dada por

$$\varepsilon_L(\omega) = \varepsilon_0 [1 + \chi_{e,L}]. \quad (3)$$

La respuesta magnética se puede modelar de manera similar a la respuesta dieléctrica, donde las ecuaciones de magnetización del medio  $M_j$  y de susceptibilidad magnética  $\chi_M$  son obtenidas de las ecuaciones de polarización y susceptibilidad eléctrica sólo reemplazando a  $E_j$  por  $M_j$  y  $\frac{P_j}{\varepsilon_0}$  por  $M_j$ , así

$$\mu(\omega) = \mu_0 [1 + \chi_m], \quad (4)$$

donde  $\mu_0$  es la permeabilidad magnética del vacío. Este modelo es utilizado para modelar un medio de LHM, dado que en este modelo las función dieléctrica y de permeabilidad magnética están dadas como funciones de la frecuencia ya que el medio es dispersivo [12, 13].

### Método de la Ecuación Integral

Suponiendo la dependencia temporal,  $e^{i\omega t}$ , para los campos electromagnéticos, la ecuación de onda puede ser transformada a la ecuación de Helmholtz,

$$\nabla^2 \psi_j(\mathbf{r}) + k^2 \psi_j(\mathbf{r}) = 0. \quad (5)$$

En esta ecuación  $\Psi_j(\mathbf{r})$  representa el campo eléctrico  $E_z$ , en el caso de polarización TE en el  $j$ -ésimo medio (Fig. 1) y  $\mathbf{r} = x\hat{\mathbf{i}} + y\hat{\mathbf{j}}$  es el vector de posición en el plano  $xy$ . La magnitud del vector de onda viene dada por  $\mathbf{k}_j = \mathbf{n}_j(\omega)\omega/c$  siendo  $\mathbf{n}_j(\omega) = \pm\sqrt{\mu_j(\omega)\epsilon_j(\omega)}$  el índice de refracción que implica las propiedades de los materiales que se dan en términos de la permeabilidad magnética  $\mu_j(\omega)$  y de la permitividad eléctrica que está dada por  $\epsilon_j(\omega)$ . La velocidad de la luz en el vacío indicada por  $c$ . El signo que aparece en la ecuación del índice de refracción debe ser tomado como negativo cuando se considera un metamaterial y positivo cuando el medio es un material dieléctrico o conductor.

Consideramos una PCW superficies planas y un arreglo periódico de inclusiones cilíndricas de metamaterial dispersivo como se muestra en la Fig. 1.

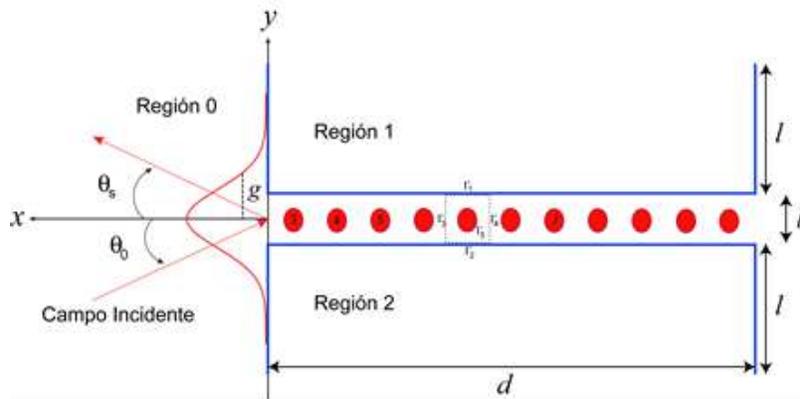


Fig. 1. Descripción gráfica de la PCW con superficies conductoras planas y una disposición periódica de inclusiones cilíndricas de LHM dispersivo. La región descrita por los contornos  $\Gamma$  define la celda unitaria del sistema con la periodicidad en la dirección horizontal en el caso de la guía de tamaño infinito.

El sistema formado por dos placas paralelas y un arreglo periódico de inclusiones cilíndricas se considera como un sistema de  $M$  cuerpos. La región 0 se caracteriza por un índice de refracción  $\mathbf{n}_0 = \sqrt{\epsilon_0(\omega)}$  (real), y las regiones 1 a  $M$  están definidas por las curvas  $\Gamma_j$  y se caracteriza por los correspondientes índices de refracción  $\mathbf{n}_j$  o, alternativamente, por las constantes dieléctrica  $\epsilon_j(\omega)$ . Las curvas que describen los perfiles se pueden escribir en términos de un sólo parámetro  $t_j$  como  $\mathbf{r}_j = [\xi(t_j), \eta_j(t_j)]$ .

Teniendo en cuenta la geometría de la PCW que se muestra en la Fig. 1 y aplicando el segundo teorema de Green y haciendo una aproximación del punto de observación en la región 0 a la superficie de la región  $j$ -ésima, se obtienen las siguientes ecuaciones integrodiferenciales acopladas:

$$\Psi^{(0)}(\mathbf{r}) = \Psi_{inc}^{(0)}(\mathbf{r}) + \frac{1}{4\pi} \sum_{j=1}^M \int_{\Gamma_j} \left[ G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_j(\mathbf{r}')}{\partial n} - \Psi_j(\mathbf{r}') \frac{\partial G_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial n} \right] ds, \tag{6}$$

(7)

$$\mathbf{0} = \frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma_j} \left[ \frac{\mathbf{f}_j}{\mathbf{f}_0} \mathbf{G}_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \frac{\partial \Psi_j(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{n}} - \Psi_j(\mathbf{r}) \frac{\partial \mathbf{G}_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial \mathbf{n}} \right] \delta_{ij} ds,$$

donde  $\delta_{ij}$  es la delta de Kronecker,  $\Psi_{inc}^{(0)}(\mathbf{r})$  representa el campo incidente y la suma de las integrales el campo esparcido, con  $i = 1$  hasta  $M$  y las expresiones  $\mathbf{f}_{0,j} = \epsilon_{0,j}(\omega)$  para polarización TE y  $\mathbf{f}_{0,j} = \mathbf{1}, \mu_{0,j}(\omega)$  para polarización TM, dependiendo de que material sea el  $j$ -ésimo medio.

Las Ecs. (6) y (7) constituyen un conjunto de  $2M$  ecuaciones integrales inhomogéneas acopladas que pueden resolverse numéricamente para obtener los valores límite del campo y su derivada normal sobre la superficie de los cuerpos esparcidos. El campo incidente se puede expresar en términos de su espectro angular

$$\Psi_{inc}(x, y) = \frac{1}{2\pi} \int_{-n_0(\omega/c)}^{n_0(\omega/c)} A(\mathbf{q}, \mathbf{k}_y) e^{i[qx - \alpha_0(q)y]} d\mathbf{q}, \quad (8)$$

con  $\alpha_0(q) = [(\omega/c)^2 - q^2]$ ,

$$A(\mathbf{q}, \mathbf{k}_y) = \psi_0 \sqrt{\pi} e^{-g^2(q - k_y)^2 / 4 + i\alpha_0(q)d} \quad (9)$$

y  $k_y = n_0 \sin \theta_0$ .

Con las consideraciones anteriores se tiene que la potencia incidente a través del plano  $L_x L_y$  está dada por

$$P_{inc}(\mathbf{k}_y) = L_z \frac{\pi}{2} g \alpha_0(\mathbf{k}_y) \frac{c^2}{8\pi\omega}, \quad (10)$$

donde se supuso que  $(\omega/c)g \gg 1$ .

La potencia esparcida es

$$P_{sc}(\mathbf{k}_y) = L_z \frac{c^2}{8\pi\omega} \frac{1}{2\pi} \int_{-n_0(\omega/c)}^{n_0(\omega/c)} \alpha_0(q) |S(\mathbf{q}, \mathbf{k}_y)|^2 d\mathbf{q} \quad (11)$$

donde

$$S(\mathbf{q}, \mathbf{k}_y) = -\frac{i}{2\alpha_0(q)} \sum_{j=1}^M \left[ \int_{\Gamma_j} \left( \frac{\partial \Psi^{(0)}(\mathbf{t}_j)}{\partial \mathbf{n}_j} \right) e^{i[qx(\mathbf{t}_j) - \alpha_0(q)y(\mathbf{t}_j)]} d(\mathbf{t}_j) \right]. \quad (12)$$

Finalmente utilizando las Ecs. (10) y (11), se obtiene la reflectancia  $R$  como

$$R(\mathbf{k}_y) = \frac{P_{inc}(\mathbf{k}_y)}{P_{sc}(\mathbf{k}_y)} = \frac{1}{F(\mathbf{k})} \int_{-n_0(\omega/c)}^{n_0(\omega/c)} \alpha_0(q) |S(\mathbf{q}, \mathbf{k}_y)|^2 \frac{d\mathbf{q}}{2\pi}. \quad (13)$$

## RESULTADOS

Consideremos una PCW que está formada con dos superficies planas y un arreglo periódico de inclusiones cilíndricas de metamaterial dispersivo. Las propiedades ópticas del metamaterial de acuerdo al modelo de Drude-Lorentz (Ecs. (3) y (4)) están dadas por

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - i\omega\gamma} \tag{14}$$

y

$$\mu(\omega) = 1 - \frac{F\omega^2}{\omega^2 - i\gamma\omega - \omega_0^2} \tag{15}$$

con la frecuencia de plasma  $\omega_p$ , la frecuencia de resonancia  $\omega_0$ , la fracción de llenado  $F = 0.56$  y  $\gamma = 10^{-n}\omega_p$ .

A continuación presentamos el análisis numérico de las funciones dadas en las Ecs. (14) y (15) cuando el metamaterial se considera como un medio absorbente, así como la respuesta óptica de una PCW de tamaño finito que está compuesta por dos superficies planas y un arreglo de inclusiones cilíndricas de LHM dispersivo; mediante el cálculo de la reflectancia  $R$  (Ec. (13)).

Como nuestro objetivo también se centra en estudiar al metamaterial como medio absorbente y además la excitación de SPPs en guías de onda de cristal fotónico de tamaño finito que contengan metamaterial dispersivo, procedemos a considerar una PCW truncada que está formada con dos superficies planas y un arreglo periódico de inclusiones cilíndricas de LHM dispersivo en la dirección  $x$  (ver Fig. 2).

En la Fig. 3 se muestra la parte real e imaginaria de estas funciones (Ecs. (14) y (15)) para los parámetros  $\omega_p = 10/2\pi$ ,  $\omega_0 = 4/2\pi$ ,  $F = 0.56$  y  $\gamma = 10^{-n}\omega_p$  con diferentes valores del entero  $n$ , lo que nos permiten determinar la región donde el metamaterial presenta un índice de refracción negativo dentro de la gama de frecuencias  $\omega_0 < \omega < \omega_{LM}$ .

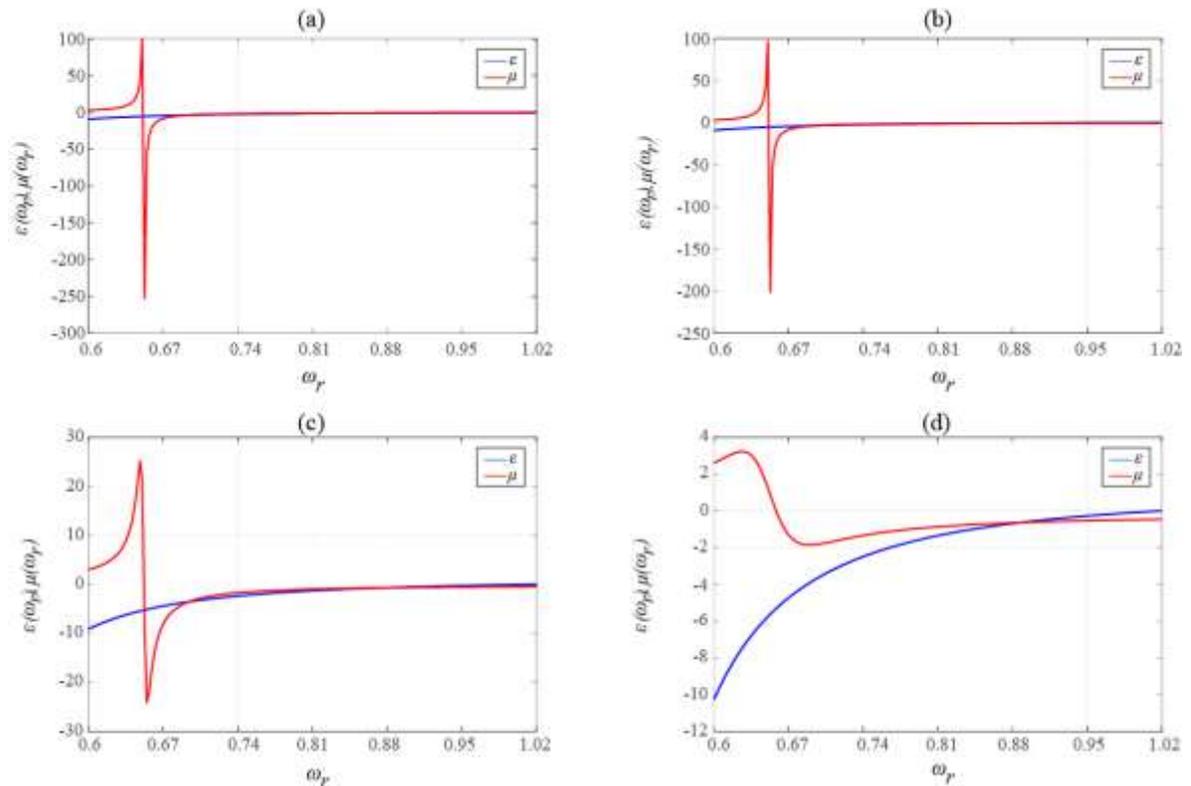


Fig. 3. Función dieléctrica  $\epsilon(\omega)$  permeabilidad magnética  $\mu(\omega)$  de un LHM dispersivo en función de la frecuencia para diferentes valores (a)  $\gamma = 0$ , (b)  $\gamma = 10^{-3}\omega_p$ , (c)  $\gamma = 10^{-2}\omega_p$  y (d)  $\gamma = 10^{-1}\omega_p$ .

Observamos diferencias entre las funciones  $\epsilon(\omega)$  y  $\mu(\omega)$  que se muestran en la Fig. 3. Es decir, encontramos que cuando el LHM como se considera un medio absorbente, el intervalo donde éste existe cambia. Se observa que la parte compleja de las funciones  $\epsilon(\omega)$  y  $\mu(\omega)$  cambian dependiendo del valor de  $\gamma$ , ya que siendo este más grande se presenta mas absorción del LHM.

Ahora analizaremos la reflectancia y las curvas de fase en función de la frecuencia  $\omega_r = \omega/\omega_p$  para diferentes valores de  $\gamma$ . La fase del campo esparcido está dada por [14]

$$\varphi = \arctan \frac{Im(\partial R/\partial k)}{Re(\partial R/\partial k)}$$

donde  $\partial R/\partial k$  es el coeficiente de reflexión diferencial.

En las Figs. 4(a) y (b) se muestran las reflectancias  $R$  y las fases  $\varphi$  del campo esparcido como función de la frecuencia  $\omega_r$  bajo polarización TE de la PCW de tamaño finito con inclusiones de LHM de superficie lisa. La PCW tiene una separación entre las placas de  $b = \pi$  y una fracción de llenado de las inclusiones cilíndricas de  $f = 0.005$  para todos los casos. Estas curvas presentan un mínimo para los valores de las frecuencias,  $\omega_r = 0.04719, 0.04719, 0.04718$  y  $0.04716$ , para los factores de amortiguamiento  $\gamma$ , respectivos, que tienen una gran correspondencia a la frecuencia teórica de  $\omega_r = 0.75023$  [15], que en nuestra normalización corresponde a  $\omega_r = 0.04721$ .

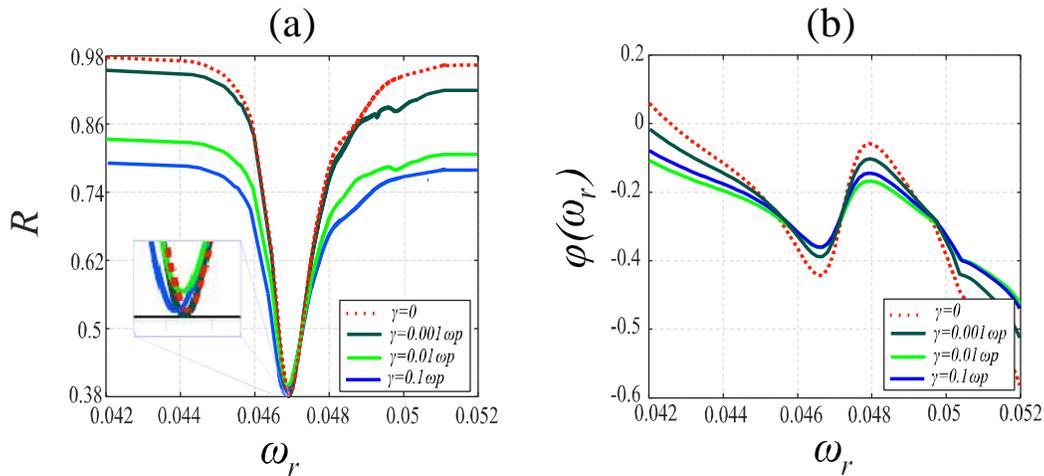


Fig. 4. (a) Reflectancias bajo polarización TE de una PCW de separación entre las placas de  $b = \pi$  y una fracción de llenado de las inclusiones cilíndricas de  $f = 0.005$ , correspondientes a diferentes valores del parámetro  $\gamma$ . (b) Fases del campo esparcido correspondientes a las reflectancias de (a).

En la Fig. 4 observamos la presencia de las resonancias plasmónicas mediante los mínimos en la reflectancia. La posición del mínimo en reflectancia se ve afectada al considerar diferentes valores del parámetro de amortiguación  $\gamma$  que deriva en diferente absorción por parte de la PCW de LHM. Además de este hecho, es posible observar que las curvas de reflectancia muestran evidencia de la absorción que presenta el LHM cuando  $\gamma$  se hace más grande, como se muestra en la Fig. 4(a). En la Fig. 4(b) se muestran las fases del campo esparcido correspondientes a los casos mostrados en la Fig. 4(a). Así, las Figs. 4(a) y (b) muestran la posible existencia de SSPs a las frecuencias de

$\omega_r = 0.04719, 0.04719, 0.04718$  y  $0.04716$  para los factores de amortiguamiento  $\gamma$ , respectivamente.

### CONCLUSIONES

Hemos desarrollado un método numérico para estudiar una PCW de LHM absorbente. Con este método se determinó la reflectancia de este sistema. De acuerdo con los resultados obtenidos para diferentes valores del factor de amortiguamiento que caracteriza la absorción del LHM, podemos decir que tenemos cuatro modos SPP en la PCW de LHM que es de tamaño finito a las frecuencias,  $\omega_r = 0.04719, 0.04719, 0.04718$  y  $0.04716$ , teniendo buena correspondencia al valor de  $\omega_r = 0.04721$  reportado en la literatura. Hecho que se corrobora con el análisis de la fase del campo esparcido  $\varphi$  como función de la frecuencia  $\omega_r$ , ya que esta presenta que el punto medio del intervalo que definen los puntos críticos que presentan la curva de fase coinciden con la frecuencia en la que ocurre el mínimo en la reflectancia, lo que nos indica la posible existencia de modos SPP en la PCW en estudio. Además, observamos diferencias entre las funciones  $\epsilon(\omega)$  y  $\mu(\omega)$  cuando el LHM se considera como un medio absorbente, ya que el intervalo donde éste existe cambia. También, se observa que la parte compleja de las funciones  $\epsilon(\omega)$  y  $\mu(\omega)$  cambia dependiendo del valor de  $\gamma$ , ya que siendo este más grande se presenta mas absorción del LHM. Considerar al metamaterial como un medio absorbente permite ser otra alternativa de desarrollo de dispositivos ópticos que produzcan energías renovables, así como innumerables aplicaciones en diversos campos de la ciencia y la tecnología que abarcan desde la biomedicina hasta las telecomunicaciones.

### BIBLIOGRAFÍA

1. Y. A. Vlasov, M. O'Boyle, H. F. Hamann and S. J. McNab, "Active control of slow light on a chip with photonic crystal waveguides," *Nature*, Vol 438, 2005, pp. 65-69.
2. V. Veselago, "The electrostatics of substances with simultaneously negative values," *Sov. Phys. Usp.*, 10(4), 1968.
3. V. Shalaev y W. Cai., "Optical Metamaterials. Springer," USA, 2010.
4. J. Bravo-Abad, "Transmisión resonante de luz a través de laminas metálicas nano estructuradas," Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada de la Universidad Autónoma de Madrid, Madrid, España, 2006, 170 págs.
5. H. A. Atwater, "The promise of plasmonics," *Scientific American*, 2007, pp 39-45.
6. J. M. Santillán, "Estudio de las propiedades ópticas de materiales nanoestructurados y aplicaciones", Facultad de Ciencias Exactas, Universidad de la Plata, Buenos Aires, Argentina, 2013, pp 1-10.
7. J. B. Pendry, "Negative Refraction Makes a Perfect Lens," *Physical Review Letters*, vol. 85, 18, 2000.
8. J. P. Del Risco, J. D. Baena y J. D. Ortiz, *Momento* 47, 49 (2013).
9. A. Mendoza-Suárez, F. Villa-Villa and J. A. Gaspar-Armenta, "Plasmonic modes in a dispersive left handed material optical fiber," *Rev. Mex. Fis.*, Vol. 54, 2008, pp. 82-86.
10. N. Engheta, R. Ziolkowski, "Metamaterials: Physics and engineering explorations," IEE Press Editorial Board, 2006.
11. M. K. Kärkkäinen, "Numerical study of wave propagation in uniaxially anisotropic Lorentzian backward-waves slabs," *Phys. Rev. E*, vol. 68, 026602, 2003.
12. R. A. Shelby, D. R. Smith, S. C. Nemat-Nasser, S. Schultz, "Microwave transmission through a two-dimensional, isotropic, left-handed metamaterial," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 78, pp. 489-491, 2000.
13. D. R. Smith, W. J. Padilla, D. C. Vier et al. *Phys. Rev. Lett.* 84 (2000) 4184.
14. G. R. Fowles, (1975). "Introduction to modern optics."
15. R. Ruppin, "Surface polaritons and extinction properties of a left-handed material cylinder", *J. Phys. Condens. Matter*, Vol. 16, 2004, pp. 5991-5998.

## SÍNTESIS DE $ZnAl_2O_4$ PARA FOTODEGRADACIÓN SOLAR DE CONTAMINANTES PERSISTENTES EN AGUA Y GENERACIÓN FOTOCATALÍTICA DE HIDROGENO

Edith Avalos Marrón<sup>1,2,3</sup>, Christian Gómez-Solís<sup>2</sup>, Rubén Arturo Rodríguez Rojas<sup>3</sup>, Luis Armando Díaz-Torres<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Laboratorio de Fotocatálisis y Fotosíntesis Artificial (F&FA), Centro de Investigaciones en Óptica, A.C., Lomas del Bosque 115, Lomas del Campestre, León, 37150, Guanajuato, México. <sup>2</sup> Universidad de Guanajuato, Campus León, División de Ciencias e Ingenierías, Lomas del Bosque 103, Lomas del Campestre, León, 37150, Guanajuato, México. <sup>3</sup> Centro Universitario de los Lagos, Universidad de Guadalajara, Enrique Díaz de León, 47463, Lagos de Moreno, México.

E-mail: [ame\\_848@hotmail.com](mailto:ame_848@hotmail.com)

### RESUMEN

En este estudio, se han sintetizado nanocristales de espinelas de Aluminato de Zinc ( $ZnAl_2O_4$ ) preparados por el método de combustión autopropagada. Las muestras sintetizadas recibieron tratamientos térmicos a 600, 700, y 900°C. Se identificó la fase cristalina mediante Difracción de Rayos X. Además, se observó la actividad fotocatalítica de los nanocerámicos obtenidos mediante la fotodegradación del colorante azul de metileno bajo irradiación solar. Se logró observar y estimar la tasa de generación de hidrogeno bajo irradiación de luz visible en solución acuosa. Según los datos experimentales las muestras mostraron tener efecto fotocatalítico.

### INTRODUCCIÓN

La nanotecnología ha revolucionado los progresos científicos. Estas tecnologías revolucionarias nos ayudan en un amplio espectro de posibles soluciones a problemáticas de actualidad, como lo es la presencia de contaminantes en el medio ambiente que alteran la estabilidad de los recursos naturales. Actualmente, los procesos convencionales la degradación oxidativa de contaminantes no son suficiente para la desaparición de algunos contaminantes persistentes, como los colorantes y fármacos de uso común, en las aguas residuales del consumo humano. Así pues, el desarrollo de métodos de purificación y descontaminación eficiente ha promovido la búsqueda de nuevos fotocatalizadores basados en nanocerámicos semiconductores, cuyas propiedades físico-químicas<sup>1</sup> permiten su aplicación en una gran variedad de campos<sup>2</sup>: descontaminación de aguas residuales, generación de hidrógeno, conversión de la energía solar, sensores, etc. Estos materiales no solo presentan propiedades únicas, sino las mismas pueden modularse para adecuarlas a una determinada aplicación, mediante el control de su morfología, composición y estructura<sup>3</sup>.

### PARTE EXPERIMENTAL

#### Síntesis y caracterización del Aluminato de Zinc ( $ZnAl_2O_4$ )

La síntesis de los nanocristales de espinelas de aluminato de Zinc ( $ZnAl_2O_4$ ) se llevó a cabo mediante el método de combustión autopropagada. Donde; se disuelven los precursores Nitrato de Zinc ( $Zn(NO_3)_2$ ), Nitrato de Aluminio ( $Al(NO_3)_3$ ) y ácido cítrico ( $C_6H_8O_7$ ) en etanol y agua en una relación 1:1. Posteriormente se añade  $1.7 \times 10^{-2}$  etilenglicol y 0.1mol de hidróxido de amonio la resina obtenida se lleva a ignición durante 15 min. a una temperatura de 400°C. Después las muestras reciben un tratamiento térmico a 600, 700, 800 y 900°C para obtener un polvo sinterizado. Las muestras fueron analizadas con difracción de rayos X (DRX) para su corroboración así también mediante mediciones de absorbancia por reflectancia difusa.

#### Prueba fotocatalítica del nanocerámico mediante fotodegradación de un colorante

Este método se basa en la degradación del colorante azul de metileno en solución acuosa bajo irradiación solar. Se prepara una solución de 30mg de material en 30ml de solución del colorante tomando alícuotas cada 15min. durante 180min. La absorbancia de las soluciones finales se midió con espectroscopia UV-Vis.

### Prueba fotocatalítica del nanocerámico mediante la medición de hidrogeno

Las reacciones fotocatalíticas de desprendimiento de hidrógeno se llevaron a cabo en un Pyrex de irradiación lateral. El reactor, se conecta a un sistema de circulación de gas en un vidrio cerrado a temperatura ambiente. Se suspendieron 50 mg del catalizador en 200 ml de solución acuosa. Antes de la irradiación de luz visible, el sistema reactivo se desgasificó por evacuación, para eliminar el aire y asegurar que el sistema de reacción estaba en condiciones anaeróbicas posteriormente se irradió con una lámpara Xe de 300 W con un filtro de corte de 420 nm para la evolución de H<sub>2</sub> en condiciones de agitación magnética. La cantidad de hidrogeno se analizó mediante un cromatógrafo de gases en línea.

## RESULTADOS

### Caracterización del material

Los análisis de las muestras después de la calcinación mediante espectroscopia de Difracción de Rayos X han demostrado la presencia y formación de la espinela. Se identificó la fase cristalina mediante Difracción de Rayos X. Los picos del patrón de DRX se indizaron de acuerdo con la tarjeta JCPDS-00-005-0669<sup>4</sup>, correspondiente a una estructura cristalina de espinela de ZnAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>. Los planos característicos que se presentaron fueron los índices de hkl (220), (311), (400), (331), (422), (511) y (440) como se muestra en la figura 1 para todas las muestras respectivamente (600, 700, 800 y 900°C).

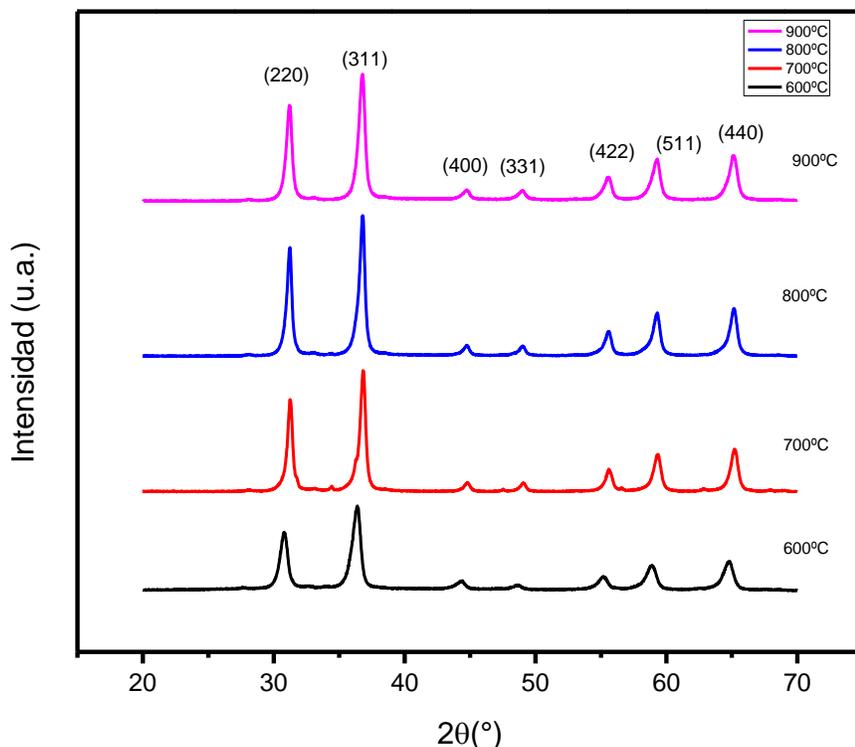


Figura 1. Patrón de Difracción de Rayos X de los nanocerámicos.

### Prueba fotodegradación con colorante

Se observó la actividad fotocatalítica de los nanocerámicos obtenidos mediante la fotodegradación del colorante azul de metileno bajo irradiación solar observándose una degradación en todas las muestras (a 600, 700 800 y 900°C). Por ejemplo; en la figura 2 se muestra el nanocerámico con

tratamiento térmico a 600°C (A6) degradación conforme transcurre desde el tiempo 0 hasta los 180min. Mientras que en la figura 3 se muestra la medición con absorbancia por reflectancia difusa observando un desplazamiento hipocrómico de las curvas, mostrando así la degradación del colorante. Mostrando que la luz solar; como energía directa; es absorbida por el compuesto de Aluminato de Zinc para producir el proceso de fotocatalisis. Las radiaciones cerca del espectro visible o ultravioleta (240-700nm) interactúan con los electrones de la molécula y estas reacciones son las más importantes desde el punto de vista ambiental.



Figura 2. Degradación de azul de metileno con Aluminato de Zinc ( $\text{ZnAl}_2\text{O}_4$ ) como fotocatalizador bajo irradiación solar.

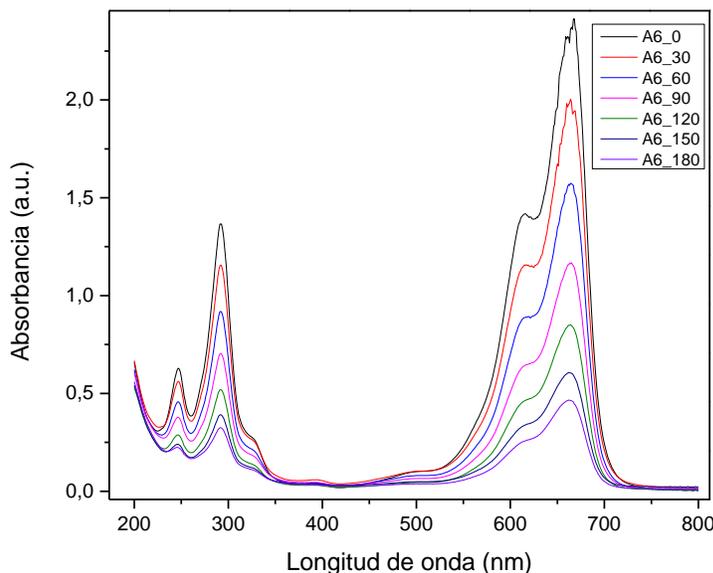


Figura 3. Medición de la degradación de azul de metileno con Aluminato de Zinc ( $\text{ZnAl}_2\text{O}_4$ ) con tratamiento térmico 600°C de 0 a 180min.

### Producción y medición de hidrogeno

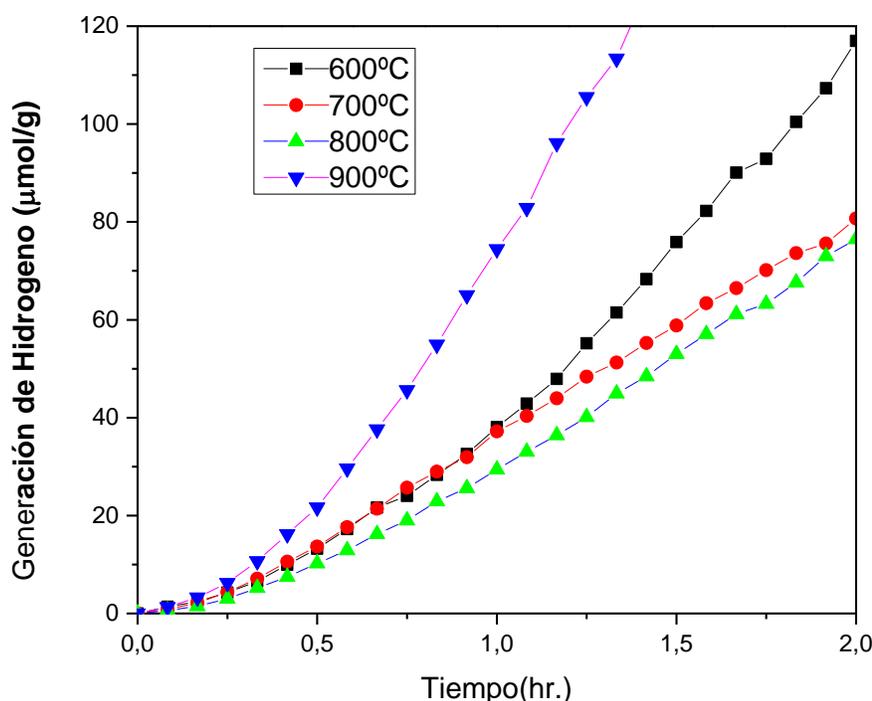


Figura Tiempo de evolución de hidrogeno.

La evolución fotocatalítica de la medición de hidrogeno de los nanocerámicos se evaluó de acuerdo con su tratamiento térmico. Tomando en cuenta esto; la producción se midió mediante un cromatógrafo de gases en línea; los resultados mostraron: con tratamiento térmico de 600°C producción de  $34.78\mu\text{molh}^{-1}\text{g}^{-1}$ , 700°C producción de  $31.41\mu\text{molh}^{-1}\text{g}^{-1}$ , 800°C producción de  $25.44\mu\text{molh}^{-1}\text{g}^{-1}$  y para la muestra a 900°C una producción de  $62.55\mu\text{molh}^{-1}\text{g}^{-1}$ .

### CONCLUSIONES

El Aluminato de Zinc se preparó con éxito mediante la técnica de combustión autopropagada. Se identificó la fase cristalina del Aluminato de Zinc mediante Difracción de Rayos X. Los resultados de DRX confirmaron que con todas las temperaturas de calcinado mostraron la estructura cristalina de espinela cúbica típica del Aluminato de Zinc.

Los resultados obtenidos sugieren que los nanocerámicos de  $\text{ZnAl}_2\text{O}_4$ , representan buenos candidatos para la eliminación fotocatalítica de colorantes en aguas residuales; así como también abren la posibilidad para la generación fotocatalítica de hidrogeno a partir de agua.

### BIBLIOGRAFÍA

1. F. Zerarga, FP-LAPW study of the structural, elastic and thermodynamic properties of spinel oxides  $\text{ZnX}_2\text{O}_4$  (X=Al, Ga, In). *Comput. Mater. Sci.* 50, 9, 2011, pp. 2651-2657. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2011.04.013>.
2. .B. Hadi, A first-principle investigation of  $\text{NO}_2$  adsorption behavior on Co, Rh, and Ir-embedded graphitic carbon nitride: Looking for highly sensitive gas sensor. *J. P. Lett. A.* 2019. <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2019.126057>.

3. S. Sampath, Optical Properties of Zinc Aluminate, Zinc Gallate, and Zinc Aluminogallate Spinels. J. Am. Ceram. Soc. 81, 3, 1998, pp. 649 - 654. <https://doi.org/10.1111/j.1151-2916.1998.tb02385.x>.
4. S. F. Wang, A comparative study of  $ZnAl_2O_4$  nanoparticles synthesized from different aluminum salts for use as fluorescence materials. J. Sci. Rep. 5, 2015, pp. 12849. [10.1038/srep12849](https://doi.org/10.1038/srep12849).

## APLICACIÓN DE LA ESPINELA $ZnAl_2O_4$ EN LA DETECCIÓN DE GAS PROPANO

José Trinidad Guillen Bonilla<sup>1</sup>, Alex Guillen Bonilla<sup>2</sup>, María Eugenia Sánchez Morales<sup>3</sup>, Verónica María Rodríguez Betancourt<sup>4</sup>, Víctor Manuel Soto García<sup>4</sup>, Víctor Manuel Rangel Cobián<sup>5</sup>, Héctor Guillen Bonilla<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Electrónica, <sup>4</sup>Departamento de Química, <sup>5</sup>Departamento de Ingeniería de Proyectos, CUCEI, Universidad de Guadalajara, Blvd. M. García Barragán 1421, 44410, Guadalajara, Jalisco, México. <sup>2</sup>Departamento de Ciencias Computacionales e Ingenierías, CUVALles, Carretera Guadalajara-Ámeca, Km 45.5, 46600, Ámeca, Jalisco, México.

<sup>3</sup>Departamento de Ciencias Tecnológicas, CUClénega, Universidad de Guadalajara, Av. Universidad No. 1115, Col. Linda Vista, CP 47810, Ocotlan, Jalisco, México.  
trinidad.guillen@academicos.udg.mx

### RESUMEN

En este trabajo se propone un detector de gas propano a base de la respuesta eléctrica del óxido semiconductor tipo espinela de  $ZnAl_2O_4$  en función de la temperatura y del tiempo. El sensor químico ( $ZnAl_2O_4$ ) se construye con polvos del compuesto obtenidos de un proceso de síntesis de química húmedo. Para desarrollar el sistema de detección se desarrolló un circuito analógico que consiste en un puente de Wheatstone donde a uno de sus brazos se le conecta el sensor resistivo; sus señales de salida son comparadas con un circuito sumador-restador cuya señal de salida es la entrada de un circuito comparador de lazo abierto. El principio de operación del detector se basa en dos etapas: calibración y detección. En la calibración, el nuevo sensor resistivo se coloca en una atmósfera donde no hay presencia de gas propano y se calibra el circuito, siendo su señal de alarma aproximadamente cero,  $V_{Alarm} \approx 0$ . En la detección, el sensor se coloca en el lugar donde se desea monitorear la presencia de las concentraciones de propano. Entonces, si el sensor detecta la presencia del gas, su resistencia varía y esta variación causa un desbalanceo del puente de Wheatstone, como una consecuencia, su diferencial de potencial es diferente de cero. Esto significa, que el puente de Wheatstone fue desbalanceado, el detector de gas propano genera una señal de alarma diferente de cero,  $V_{Alarm} \approx 11.3$  Volts. Esta señal de alarma indica la presencia de gas propano en la atmósfera. Nuestro nuevo sensor fue probado con una concentración de 1000 ppm de propano a temperatura de 250°C. De acuerdo con nuestros resultados, el  $ZnAl_2O_4$  es ideal para ser aplicado en la industria donde se manejan altas temperaturas (mayores a 200 °C).

### INTRODUCCIÓN

En la actualidad, con el crecimiento de las urbes, más requerimientos de seguridad industrial y doméstica están siendo requeridos, por tal motivo, muchos grupos de investigación alrededor del mundo están desarrollando nuevos materiales para la detección de gases tóxicos (principalmente CO, CO<sub>2</sub>, propano y NO, etc.). En los nuevos materiales se modifica su resistencia eléctrica cuando ellos son expuestos a atmósferas con presencia de gas tóxico. Los cambios de resistencia eléctrica cuando son expuestos a concentraciones de estos gases se aprovecha en el diseño de nuevos circuitos electrónicos cuyo objetivo es la adaptación de la señal eléctrica. En la referencia [1], los autores estudian la respuesta dinámica de impedancia para el óxido CoSb<sub>2</sub>O<sub>6</sub> y a partir de su respuesta eléctrica, se proponen un nuevo detector de gas de dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>). El detector se basa en amplificadores operacionales a 250°C, la máxima concentración detectable fue de 100 ppm y la magnitud de impedancia promedio fue de 2.623KΩ. El circuito electrónico mostró buena eficiencia, rápida respuesta y alta funcionalidad. Por otro lado, en la referencia [2], se describe la respuesta estática del NiSb<sub>2</sub>O<sub>6</sub>. A partir de su respuesta eléctrica, los autores proponen y construyen un nuevo dispositivo para la detección de gas de monóxido de carbono (CO). El detector se basa en amplificadores operacionales, puede detectar concentraciones dentro del intervalo de 1 ppm hasta 300 ppm, puede operar a las temperaturas de 100 a 300°C. El nuevo dispositivo es económico, fácil de construir, posee alta eficiencia, rápida respuesta a la presencia de gas tóxico y es altamente sensible.

Considerando la información de la literatura [3-5], nuestro grupo de investigación sintetizó polvos del óxido semiconductor  $\text{ZnAl}_2\text{O}_4$  a baja temperatura aplicando un proceso de química húmeda asistido con radiación de microondas para su aplicación como detector de gases tóxicos (propano). Con los polvos del óxido, se manufacturaron pellets con el propósito de investigar su capacidad para detectar atmósferas de propano ( $\text{C}_3\text{H}_8$ ) en corriente directa (C.D.). Los experimentos hechos sobre el óxido  $\text{ZnAl}_2\text{O}_4$  presento estabilidad térmica, una alta sensibilidad y una excelente respuesta dinámica a temperatura de  $250^\circ\text{C}$ . De acuerdo a esta información, el  $\text{ZnAl}_2\text{O}_4$  es idóneo para ser aplicado como sensor de atmósferas de propano. Esto se demuestra en este trabajo desarrollando un nuevo dispositivo cuyas características son alta resolución, tiempos de respuesta seleccionable durante el diseño y voltajes pequeños de operación.

### DETECTOR DE GAS PROPANO

En la Figura 1 se muestra el diagrama electrónico para la detección de gas propano de la espinela  $\text{ZnAl}_2\text{O}_4$ . De los polvos obtenidos del proceso de síntesis del óxido, se consideró 0.3 g de polvo del material que después fueron comprimidos mediante una prensa hidráulica para manufacturar los pellets usados durante la prueba de detección. Las dimensiones de los pellets fueron de 12 mm de diámetro y 0.5 mm de espesor, respectivamente. Para una adecuada prueba de detección de gases, al pellet se le colocaron dos contactos óhmicos de pintura de plata coloidal. Más tarde, los pellets se introdujeron dentro de una cámara de alto vacío ( $10^{-3}$  torr) y las terminales se conectaron al multímetro Keithley 2001. La superficie de los pellets, fueron expuestos a flujos de aire y gas propano (1000 ppm) durante periodos de 5 minutos y con el multímetro se registraron variaciones de resistencia dentro del intervalo de 1,520 y 1,670 k $\Omega$ .

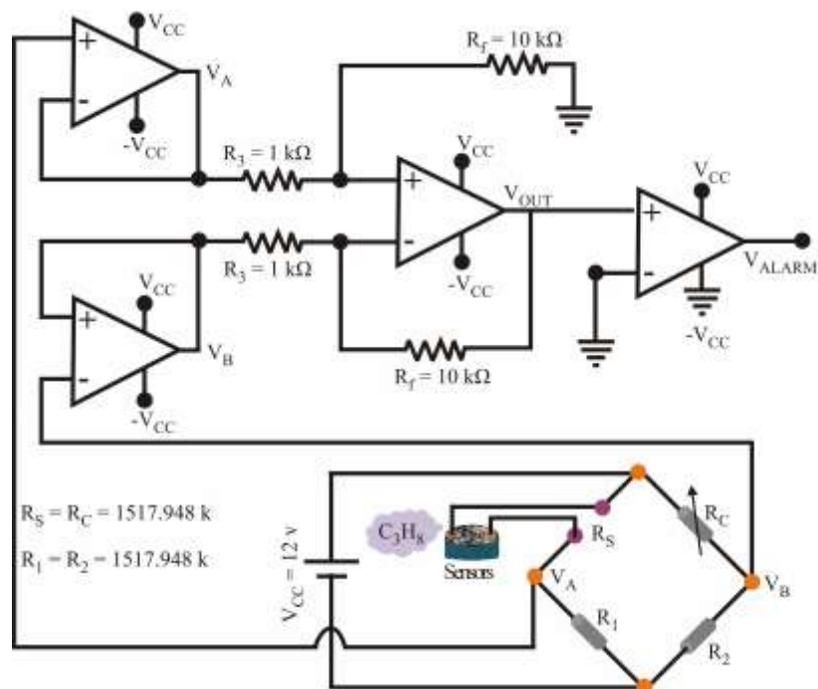


Figure 1. Diagrama electrónico propuesto para el detector de atmósferas de gas propano: Temperatura de operación de  $250^\circ\text{C}$  y una concentración de 1000 ppm.

A partir de la respuesta eléctrica obtenida para el  $\text{ZnAl}_2\text{O}_4$ , seleccionamos un punto de operación de **1517.948 K $\Omega$**  y entonces se propone un detector de atmósferas de gas propano. Su diagrama electrónico se presentó en la Figura 1. De acuerdo a este diagrama (ver Figura 1), el detector electrónico consiste de un puente de Wheatstone, dos circuitos seguidores, un circuito sumador-

restador, un circuito comparador de lazo abierto y una fuente de alimentación de  $\pm 12$  Volts. El puente de Wheatstone tiene dos voltajes de salida  $V_A, V_B$  y sus valores de resistencia son  $R_s = R_c = R_1 = R_2 = 1517.948 K\Omega$ :  $R_s$  es la resistencia del sensor de gas propano,  $R_c$  es una resistencia variable para calibrar el puente de Wheatstone y  $R_1, R_2$  son resistencias de precisión. Los dos circuitos seguidores están hechos con amplificadores operacionales y son para estabilizar los voltajes  $V_A, V_B$  e incrementar la impedancia del circuito sumador-restador. El circuito sumador-restador consiste de un amplificador operacional y cuatro resistencias de precisión: dos  $R_3 = 1K\Omega$  y dos  $R_f = 10K\Omega$ , su función es hacer la diferencia entre los voltajes  $V_A$  y  $V_B$  y el resultado lo amplifica 10 veces. Finalmente, el comparador es un amplificador operacional cuya entrada inversora (-) y  $-V_{cc}$  están conectadas a común (tierra), su función es generar 0 Volts cuando el sensor no detecta la presencia de gas propano en la atmósfera y también genera una señal de alarma ( $V_{Alarm}$ ) si el sensor detecta gas propano en la atmósfera. El voltaje  $V_{Alarm}$  es equivalente al voltaje de saturación del amplificador operacional,  $V_{sat} = 11.3V$ . Nuestro nuevo detector de gas opera a la temperatura de  $250^\circ C$  y una concentración de gas de 1000 ppm. Para su operación requiere de dos etapas: calibración y detección.

### Calibración

En la etapa de calibración, el sensor de gas se coloca en una atmósfera sin presencia de gas propano y el detector se calibra implementando los siguientes pasos: a) el puente de Wheatstone se calibra con la resistencia variable  $R_c$  hasta que la condición  $V_{AB} = 0$  es satisfecha,

$$V_{AB} = V_A - V_B = 0 \quad (1)$$

donde el voltaje  $V_A$  es calculado por

$$V_A = \frac{R_1}{R_1 + R_s} V_{cc} \quad (2)$$

y el voltaje  $V_B$  es

$$V_B = \frac{R_2}{R_2 + R_c} V_{cc}. \quad (3)$$

Sustituyendo las expresiones (2) y (3) en la ecuación (1), el voltaje  $V_{AB}$  toma la forma

$$V_{AB} = V_{cc} \left( \frac{R_1}{R_1 + R_s} - \frac{R_2}{R_2 + R_c} \right). \quad (4)$$

Sustituyendo los valores del Puente de Wheatstone y el valor de la fuente de voltaje (Ver Figura 1), obtenemos

$$V_{BA} = 12V \left( \frac{1517.94K\Omega}{1517.94K\Omega + 1517.94K\Omega} - \frac{1517.94K\Omega}{1517.94K\Omega + 1517.94K\Omega} \right) = 12V \left( \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right) = 0; \quad (5)$$

b) los voltajes  $V_B$  y  $V_A$  se estabilizan con los circuitos seguidores; c) El circuito sumador-restador hace la diferencia entre  $V_A$  y  $V_B$ , posteriormente el resultado es amplificado 10 veces ( $\frac{R_f}{R_3} = 10$ )

$$V_{out} = \frac{R_f}{R_3} V_{AB} = \frac{R_f}{R_3} (V_A - V_B). \quad (6)$$

Sustituyendo valores en ecuación (6) y considerando las ecuaciones (1) y (5) se obtiene

$$V_{out} = \frac{R_f}{R_3} (V_A - V_B) = \frac{10K\Omega}{1K\Omega} \left( \frac{12V}{2} - \frac{12V}{2} \right) = 10(6V - 6V) = 0 \quad (7)$$

d) el comparador tiene su voltaje de salida definido por

$$V_{Alarm} = V_{Sat} = A_{ol}V_{out} = 100,000(0) = 0 \quad (8)$$

$A_{ol} \approx 100,000$  es la ganancia de lazo abierto del amplificador operacional. En este caso, el detector no genera señal de alarma ( $V_{Alarm} \approx 0$ ) porque el sensor no detecta la presencia de la concentración del gas propano en la atmósfera.

### Detección

En la etapa de detección, el sensor  $ZnAl_2O_4$  se instala en una atmósfera donde es posible la presencia de gas propano y es deseable monitorearla. Para que el sensor realice adecuadamente el proceso de detección de propano, se requiere las siguientes etapas: a) cuando el sensor químico detecta la presencia de gas propano en la atmósfera, su resistencia eléctrica disminuye  $\Delta R_s$  y causa un desbalance el puente de Wheatstone, tal que, la condición (9) es satisfecha

$$V_A > V_B \quad (9)$$

Por que

$$\frac{V_{cc}R_1}{R_1 + R_s - \Delta R_s} > \frac{V_{cc}R_2}{R_2 + R_c} \quad (10)$$

Sustituyendo los valores del circuito electrónico mostrado en Figura 1, obtenemos

$$\frac{12V(1517.94K\Omega)}{1517.94K\Omega + 1517.94K\Omega - \Delta R_s} > 6V. \quad (11)$$

b) el resultado de la diferencia de voltaje se amplifica diez veces con el circuito sumador-restador,

$$V_{out} = \frac{R_f}{R_3} V_{cc} \left( \frac{R_1}{R_1 + R_s - \Delta R_s} - \frac{R_2}{R_2 + R_c} \right) = 120V \left( \frac{1517.94K\Omega}{1517.94K\Omega + 1517.94K\Omega - \Delta R_s} - \frac{1}{2} \right) \quad (12)$$

y se cumple la condición  $V_{out} > 0V$ ; c) el voltaje  $V_{out}$  causa que el comparador tenga saturación positiva y entonces su voltaje de salida es  $V_{Sat} \approx 11.3V$  debido a la ganancia de lazo abierto del amplificador operacional,

$$V_{Alarm} = A_{ol}V_{out} = 100,000(V_{out}) = V_{Sat} \approx 11.3V \quad (13)$$

Observando ecuación (13), la señal de alarma  $V_{Alarm}$  y el voltaje de saturación  $V_{Sat}$  son equivalentes, estos se producen si y solamente si el nuevo detector está detectando la presencia de gas propano en la atmósfera monitoreada.

### DISCUSIÓN

El óxido semiconductor  $ZnAl_2O_4$  fue sintetizado mediante una ruta de química húmedo asistido con radiación de microondas y los polvos fueron caracterizado eléctricamente en presencia de concentraciones de propano. Para la caracterización eléctrica se utilizaron pellets, los cuales, fueron manufacturados con los polvos del compuesto. Durante las pruebas de detección a los pellets se aplicó un voltaje de corriente directa  $V_{CD}=1V$  y se registró el valor de resistencia en función del tiempo, comprobando de esta manera el comportamiento típico del óxido  $ZnAl_2O_4$  como un sensor químico de gas (en nuestro caso en propano). Los resultados obtenidos en los experimentos son consistentes con los reportados en las referencias [1,3].

Analizando la respuesta eléctrica del sensor ( $ZnAl_2O_4$ ) se propone una metodología para su adaptación de señal, siendo la base para el diseño de un sistema detector de atmósferas de propano y amplificadores operacionales. En el diseño se considera la respuesta dinámica del sensor, ganancia del circuito electrónico, así como sus parámetros y su funcionalidad. Nuestro nuevo prototipo tiene amplia gama de aplicación en el hogar e industrias donde existe interés en

detectar zonas con alto riesgo de explosión debido a fugas de combustible. Su construcción es económica y tiene excelentes características de funcionalidad. Nuestro trabajo futuro tiene las siguientes direcciones: modelar y analizar la respuesta eléctrica del óxido  $\text{ZnAl}_2\text{O}_4$  y desarrollar detectores de gas aplicando dispositivos electrónicos programables con el objetivo de aplicarlo al internet de las cosas.

### CONCLUSIONES

La microestructura del óxido semiconductor  $\text{ZnAl}_2\text{O}_4$  fue preparado usando un método de síntesis alternativo de química húmedo con el propósito de obtener tamaños de partícula nanométrico para su aplicación como sensor de gases. Este tipo de procesos tienen la ventaja de obtener la fase cristalina a baja temperatura en comparación con las vías de síntesis tradicionales (reacción de estado sólido). Además, con las rutas de química húmedo es posible registrar diferentes morfologías de gran interés para el desarrollo electrónico de la tecnología de los sensores de gases tóxicos. La morfología (micro-rods) obtenido del  $\text{ZnAl}_2\text{O}_4$  mostraron tener una buena estabilidad térmica y una alta respuesta dinámica al momento de someter los pellets en atmósfera de propano (1000 ppm) a temperatura constante de 250 °C. La respuesta dinámica encontrada del material fue calculado en el rango 1520–1670 k $\Omega$  y la sensibilidad del sensor se estimó en el rango 0.11–1.33. En base a estos resultados, diseñamos un detector de atmósferas de propano cuya resolución es  $\Delta R_{s,min} = 5.717 \Omega$ , tiempo de respuesta de 3 s., voltaje de salida de operación es de 11.3V, su concentración de operación es 1000 ppm y temperatura de operación de 250 °C.

### BIBLIOGRAFÍA

1. A. Guillen Bonilla, V. M. Rodríguez Betancourt, H. Guillen Bonilla, L. Gildo Ortiz, O. Blanco Alonso, N. E. Franco Rodríguez, J. Reyes Gómez, A. Casillas Zamora, J. T. Guillen Bonilla, "A new CO<sub>2</sub> detection system based on the trirutile-type CoSb<sub>2</sub>O<sub>6</sub> oxide", *Journal of Materials Science: Material in Electronics*, Issue 18, **2018**, 13 Pages.
2. J. T. Guillen Bonilla, H. Guillen Bonilla, V. M. Rodríguez Betancourt, A. Casillas Zamora, J. A. Ramírez Ortega, L. Gildo Ortiz, M. E. Sánchez Morales, O. Blanco Alonso, A. Guillen Bonilla, "Carbone Monoxide (CO) detection device based on the Nickel Antimoniate Oxide and a DC Electronic Circuit", *Applied Science*, Vol. 9, **2019**, 3799, 17 Pages.
3. S. Farhadi, S. Panahandehjoo, "Spinel-type zinc aluminate ( $\text{ZnAl}_2\text{O}_4$ ) nanoparticles prepared by the co-precipitation method: A novel, green and recyclable heterogeneous catalyst for the acetylation of amines, alcohols and phenols under solvent-free conditions", *Applied Catalysis A: General*, Vol. 382, **2010**, 293–302.
4. B. Cheng, Z. Ouyang, B. Tian, Y. Xiao, S. Lei, "Porous  $\text{ZnAl}_2\text{O}_4$  spinel nanorods: High sensitivity humidity sensors", *Ceramics International*, Vol. 39, **2013**, 7379–7386.
5. M. Kumar, M. Mohapatra, "A case study of energy transfer mechanism from uranium to europium in  $\text{ZnAl}_2\text{O}_4$  spinel host by photoluminescence spectroscopy", *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, Vol. 159, **2016**, 42–47.
6. R. Alammouz, J. Podlecki, P. Abboud, B. Sorli, R. Habchi, "A review on flexible gas sensors: From materials to devices", *Sensors and Actuators A*, Vol. 284, **2018**, 209–231.
7. H. Gómez-Pozos, T.V.K. Karthik, M. de la L. Olvera, A. García Barrientos, O. Pérez Cortés, J. Vega-Pérez, A. Maldonado, R. Pérez-Hernández, V. Rodríguez-Lugo, "ZnO thin films as propane sensors: Band structure models to explicate the dependence between the structural and morphological properties on gas sensitivity", *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, Vol. 106, **2017**, 16–28.

## ÍNDICE DE AUTORES

- Aguilar Hernández Paola Melissa 172  
 Alcalá González Rubí 98  
 Alva Medrano Hugo 193, 209  
 Amador Rocha María Esther 98  
 Ambriz-Vargas F. 249  
 Aparicio Fernández María del Rayo A. 3  
 Aparicio Flores Orto Elio 3  
 Aparicio Méndez M. del Rocío 188  
 Aparicio Méndez María del Rocío 143  
 Aranda Sánchez Jorge Isidro 85  
 Arroyo Correa Gabriel 155, 161, 168, 193  
 Avalos Marrón Edith 293  
 Ávila Acosta Rosalba 263  
 Bárcenas M. 60  
 Barradas Guevara José Enrique 143  
 Basurto-Islas Gustavo 172  
 Bautista Bustamante Emmanuel 249  
 Benítez A. 249  
 Bonilla Paz Itzia Alejandra 255  
 Calderón Rosas Norma Claudia 66, 108  
 Calixto Carrera Sergio 54  
 Calva Hernández David 66  
 Castañeda Palafox Sandra Judith 269  
 Castañeda Priego Ramón 131  
 Castellanos V.A. 60  
 Castro Cena Jennifer Yazmin 98  
 Cedillo alcantar Diana 54  
 Chávez Esquivel Arturo 255  
 Concha Sánchez Yajaira 92  
 Contreras Bárbara José Roberto 237  
 Cordero-Cid A. 188  
 Cruz Albaro Eligio 85  
 Cruz Ortiz Norma Liliana 66  
 De Hoyos De León Brayna 98  
 Delgadillo M.L. 60  
 Díaz Bautista Erik 92  
 Díaz Torres Luis Armando 32, 269, 293  
 Escobedo Galván Claudia Rafela 80  
 Espinoza Bonilla José Arturo 8  
 Espinoza-Valdez Aurora 275  
 Estevez Delgado Gabino 243, 255  
 Estevez Delgado Joaquín 243  
 Félix Beltrán Olga Guadalupe 143  
 Figueroa-Gerstenmaier Susana 172  
 Galíndez Espinoza Deyli Anid 263  
 Gallardo-Moreno Geisa 275  
 Galván Navarro Eric Didier 219  
 Garcia Cordero Jose Luis 54  
 García Galván Keops Xeki 237  
 Garibay Tapia Alonzo 255  
 Garnica Guillermo 54  
 Gómez Solís Christian 32, 269  
 Gómez Vieyra Armando 37, 47, 229  
 Gómez-Solís Christian 293  
 Gómez-Velázquez Fabiola R. 275  
 González Canales Félix Francisco 143  
 González-Garrido Andrés 275  
 Guillen Bonilla Alex 298  
 Guillen Bonilla Héctor 298  
 Guillen Bonilla José Trinidad 298  
 Hernández Aguilar Mauro Sergio 37, 47, 229  
 Hernández Mota Sonia 37, 47, 229  
 Hernández-Sebastián N. 249  
 Herrera Velarde Salvador 125, 131, 172  
 Kharissova Oxana V 21  
 Kourmychev Evguenii 3  
 Lara Pelayo Víctor Hugo 263  
 López Flores Ángel Daniel 118  
 Lugo Piña Lizeth Deyanira 98  
 Luna Ramos Salma Cristina 281  
 Mares Arcila Javier Humberto 104  
 Martínez Tovar Hilda Cristina 98  
 Medel Lopez Maria Cristina 26  
 Medina Magallón José E. 219  
 Medina Magallon José Eduardo 285  
 Mellado Villaseñor Eduardo 209  
 Méndez Alcaraz José Miguel 125  
 Méndez Sánchez Arturo F. 118  
 Mendoza Rojas Julio Cesar 104  
 Montes Mejia Blanca I. 21  
 Morales-Morales F. 249  
 Naydenova Izabela 54  
 Olivares Martínez Alma Delia 131  
 Ortiz-Garcia Nahomi G.  
 Oviedo Valdivieso Alejandro 237  
 Pérez Aguilar Héctor 193, 209, 219, 285  
 Pérez Martínez M. Isabel 80  
 Pérez-Ramírez F. J. 60  
 Piña Hernández Martin 263  
 Ponce Treviño Luz Nayeli 98  
 Puy y Alquiza María Jesús 8  
 Quirós A. 60  
 Ramírez Mendoza María Fernanda 3  
 Ramírez Zavaleta Fernando Iguazú 85  
 Rangel Cobián Víctor Manuel 298  
 Raya Montañó Alfredo 92  
 Rodríguez Betancourt Verónica María 298  
 Rodríguez Rojas Rubén Arturo 293  
 Rojas Duque Alejandra 80  
 Rubio Navarro Diana Lorena 263  
 Ruiz-Stovel Vanessa D. 275  
 Salgado Suárez Gladys Denisse 26  
 Sánchez López Sergio 219, 285  
 Sánchez Morales María Eugenia 298  
 Sánchez Olalde Marina 263  
 Sánchez Rico Tsanda 104  
 Sánchez Tec Omar 263  
 Serrano Arévalo Karla Ivonne 193  
 Sosa Aranda Michelle 125  
 Soto García Víctor Manuel 298  
 Tajonar Sanabria Francisco Solano 26  
 Tea Ruiz Pablo Abraham 104  
 Tirado Hernández María Magdalena Josefina 263  
 Torres García José de Jesús 66

Tututi Hernández Eduardo Salvador 281  
Velasco Luna Fernando 26  
Villagómez Mora Mariana 32  
Zavala Cerda Alberto 104  
Zhevandrov Bolshakova Petr 285

# EDITORAS

MARÍA EUGENIA SÁNCHEZ MORALES  
GLORIA VERÓNICA VÁZQUEZ GARCÍA  
AMALIA MARTÍNEZ GARCÍA  
CRISTINA E. SOLANO SOSA  
EVA LILIANA RAMOS GUERRERO



ISBN OBRA COMPLETA  
TRABAJOS CIENTÍFICOS EN MÉXICO



ISBN TOMO IV  
FÍSICO MATEMÁTICAS Y CIENCIAS DE LA TIERRA

