

Material Avanzados

ISSN: en trámite

Dinámica de Fluidos

N° 5 • Año 3
Julio-diciembre 2024



Instituto de
Investigaciones
en Materiales

Universidad Nacional Autónoma de México

Rector

Leonardo Lomelí Vanegas

Secretario General

Patricia Dávila Aranda

Coordinador de la Investigación Científica

William Lee Alardín

Instituto de Investigaciones en Materiales

Director

José Israel Betancourt Reyes

Secretario Académico

Jaime Enrique Lima Muñoz

Editora responsable

Rocío de la Torre Sánchez

Coordinador editorial y de divulgación

Astron Rigel Martínez Rosas

Comité editorial:

Armando Reyes Montero

Chumin Wang Chen

Elí Sánchez González

Joaquín de la Torre Medina

Maricela Zapata Arroyo

Michel Rivero Corona

Producción:

Editorial IIM

Editor científico: Rocío de la Torre Sánchez

Comunicación Pública de la Ciencia: Julieta Reyes Arango

Editor digital: Omar Alejandro Pompa García

Diseño editorial: Celic Martínez Cañedo

Crédito de la portada:

Miguel Ángel Quetzeri Santiago



Instituto de
Investigaciones
en Materiales

La reproducción del material aquí mostrado se permite siempre y cuando: se cite esta revista, se reconozca a los autores y no sea utilizado con fines comerciales.

Editorial

Una vez concluido el tema de salud, es tiempo de iniciar una serie de publicaciones relacionadas con una importante área dentro del estudio de los materiales, que es la reología y ciencia de los fluidos. Pueden leer sobre modelos matemáticos, Reviews, simulaciones de fluidos, aplicaciones en la industria siderúrgica, aplicaciones en entornos rurales y ciencia que va de la academia a la práctica.

Contamos con contribuciones de la industria, institutos federales, asociaciones civiles y diversas universidades nacionales e internacionales. Les recomendamos enriquecer su lectura alternando los descriptivos textos escritos por investigadores experimentados (de nuestro IIM y de institutos que colaboran con nosotros) con los entusiastas textos escritos por prestadores de servicio social y alumnos que publican por primera vez en su vida (y lo hacen en nuestra revista). Solo nos queda agradecer su preferencia y desearles felices lecturas de las propuestas de comunicación científica que tenemos para ustedes en este número.

Rocío Guadalupe de la Torre Sánchez
Editora responsable

Editorial

MATERIALES AVANZADOS, Año 3, No. 5, julio-diciembre 2024, es una publicación semestral editada por la Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria, Alcaldía Coyoacán, Ciudad de México, C.P. 04510, a través del Instituto de Investigaciones en Materiales, Circuito Exterior S/N, Ciudad Universitaria, Alcaldía Coyoacán, Ciudad de México, C.P. 04510, Tel. (55)56224500 y (55)56224581, URL: <https://revista.iim.unam.mx/>, correo electrónico: revista@materiales.unam.mx. Editora responsable: Dra. Rocío de la Torre Sánchez, correo electrónico: vinculacion@materiales.unam.mx. Reserva de Derechos al uso Exclusivo 04-2023-062711234500-102, ISSN: en trámite, ambos otorgados por el Instituto Nacional del Derecho de Autor. Responsable de la última actualización de este número, Dra. Rocío de la Torre Sánchez, Secretaría de Vinculación del Instituto de Investigaciones en Materiales, Circuito Exterior S/N, Ciudad Universitaria, Alcaldía Coyoacán, C.P.04510, Ciudad de México fecha de la última modificación, 15 de agosto de 2024.

El contenido de los artículos es responsabilidad de los autores y no refleja el punto de vista de los árbitros, del Editor o de la UNAM.

Se autoriza la reproducción total o parcial de los textos aquí publicados siempre y cuando se cite la fuente completa y la dirección electrónica de la publicación.

Índice

- 10** Reología de polvos
Alberto Tecante
- 18** Reflexionando otra ciencia para México
Alberto Andrés Portilla Martínez
- 25** A cuentagotas: Un vistazo a la distribución del tamaño de gotas y su influencia en las propiedades de emulsiones
Janett Montaña-Salazar, Rosa María Mariscal-Romero, Ana Paulina Gómora-Figueroa, Adrián Peralta-Jarquín
- 39** La vitalidad como un fluido
Linette de la Paz Vega
- 42** Estudio *in situ* de la evolución del comportamiento reológico de una espuma modelo para la estimulación hidráulica de yacimientos
Germania Guadalupe Mancheno-Padilla, Esteban Francisco Medina-Bañuelos, Benjamín Marcos Marín-Santibáñez
- 49** Almacenamiento de hidrógeno en materiales sólidos
Karina Suárez Alcántara
- 55** Funcionalización de moléculas orgánicas: la versatilidad de obtener nuevos materiales semiconductores
G. A. Vázquez-Hernández, M.E. Sánchez-Vergara, L. Fomina, R. Salcedo

- 63** Cuando la física y la inteligencia artificial se unen para modelar fluidos
Zoila Sánchez López, Gabriela Berenice Díaz Cortés, Galileo Domínguez Zacarías
- 71** Hablemos de lubricación
Tania Chirinos Hernández
- 72** ¿Cápsulas con virus? Una nueva forma de combatir a *Pseudomonas aeruginosa* en la fibrosis quística pulmonar
Gerardo García-González, Patricia Martínez-Flores, Joselyn García, David Armando Encinas-Basurto, Josué Juárez, Gerardo Erbey Rodea-Montealegre, Luis Quihui-Cota, Marco Antonio López-Mata
- 83** Los estados de la materia y el diagrama de fases
José Torres Arenas
- 86** ¿Por qué estudiar la física de gotas?
Miguel Ángel Quetzeri Santiago
- 92** De la vis impresa de Hiparco a la cantidad de movimiento de Newton
José Luis Álvarez García
- 102** Fenómeno de convección natural en líquidos conductores
José Luis Morón-Cruz, Alberto Beltrán

106 Manufactura aditiva, nanopartículas y catálisis, el impacto de estos procesos en el desarrollo sostenible de la industria

Lucy-Caterine Daza-Gómez, Rocío Redón

118 Manufactura de estufas ecológicas, una nueva perspectiva que conecta el diseño con el usuario

Yovany Galindo, José Núñez

123 Olimpiadas de París 2024, de pseudociencias e inclusión intersexual y trans

Astron Rigel Martínez Rosas

136 Las ecuaciones cúbicas de estado en la dinámica de fluidos

Rosendo Monroy-Loperena

143 Suspensiones concentradas de partículas sólidas no coloidales: respuesta reológica y su modelado computacional

Alan Rosales-Romero, Adolfo Vázquez-Quesada, Marco Ellero, J. Esteban López-Aguilar

155 Redes poliméricas semi-interpenetradas: una alternativa atractiva en la ingeniería de tejidos y en la remediación ambiental

Jorge Alejandro Benítez-Martínez, Itzel Marisol Garnica-Palafox, Francisco Manuel Sánchez-Arévalo

162 Maltodextrinas modificadas: estructura, fuentes, aplicaciones e importancia en la industria alimentaria

Mónica Reyes-Reyes, Lucila Concepción Núñez-Bretón, Barbara Cooper-Bribiesca, Francisco Erik González Jiménez, Betsabe Yulieth Valencia Rios, O. Manero, Liliana Alamilla-Beltran

168 Materiales para la remoción de contaminantes emergentes presentes en agua

Sayra Orozco, Jaime Espino, Michel Rivero

174 Apoyo a la docencia: El Sol está compuesto de colores: espectroscopía

Karla Mónica Tufiño Villegas



Artículos

Reología de polvos

Alberto Tecante

Departamento de Alimentos y Biotecnología. Facultad de Química.
Universidad Nacional Autónoma de México. Cd. Universitaria, CdMx,
04510, México
tecante@unam.mx

Resumen

La reología de polvos es un área de investigación muy activa y de gran impacto científico y tecnológico en la comprensión de las propiedades de estos materiales, así como de su comportamiento de flujo durante su manejo y procesamiento. De manera general, se presentan aquí las principales propiedades físicas de los polvos y el estudio de su comportamiento reológico bajo condiciones empíricas y fundamentales. La discusión se enfoca en los polvos industriales (*powders*) que son aquellos que se procesan para obtener productos terminados de consumo final o materias primas para procesos subsecuentes. Los polvos ambientales (*dust*), usualmente considerados contaminantes o generadores de suciedad, no son tratados aquí.

Palabras clave:

Deformación, esfuerzo, flujo, mezclado, partículas, polvos, reología, sólidos.

Introducción

Un polvo, también llamado sólido a granel, es un material granular formado por partículas de tamaño heterogéneo en el que un gas, usualmente aire, ocupa el espacio

intersticial entre las partículas. Las partículas son generalmente rígidas y pueden tener líquidos adsorbidos en su superficie o como parte de su constitución química, por ejemplo, agua, y también interaccionar entre sí de diferentes formas y en diferentes grados [1, 2]. En consecuencia, el término polvos incluye a una gran variedad de materiales provenientes de las industrias química, metalúrgica, de la construcción, farmacéutica, de cosméticos y alimentos, entre otras, lo que hace evidente su importancia. El Cuadro 1 muestra una clasificación general de polvos basada en el intervalo de tamaño aproximado de partícula.

Los polvos son muy complejos, debido a sus propiedades físicas y a su sensibilidad a muchos factores externos que pueden modificar su comportamiento cuando están en reposo o en movimiento. Con frecuencia, la distancia entre las partículas cambia durante su desplazamiento y puede producirse un empaquetamiento que afecta a su dinámica. Por ejemplo, en los polvos cohesivos las partículas pueden aglomerarse a tal punto que no se mueven como entidades individuales sino como una masa más o menos empaquetada que se des-

Cuadro 1. Clasificación de material granular por tamaño de partícula. Complementado de [2]

Tamaño (μm)	Polvo/sólido	Partícula individual	Algunos ejemplos
Entre 0.1 y 1.0	Hiperfino, ultrafino	Ultrafina	Polvos metalúrgicos
Entre 1.0 y 10	Superfino	Superfina	Cemento, carbón activado
Entre 10 y 100	Granular	Gránulo	Almidón crudo, harinas
Entre 100 y 3000	Granular grueso	Granular	Granulados farmacéuticos
Entre 3000 y 10000	Sólido triturado	Triturada	Croquetas para mascota

plaza con dificultad. Por el contrario, en los polvos no cohesivos en los cuales la separación entre partículas es mayor, estas se mueven de manera individual y muestran menos dificultad para desplazarse. Los polvos cohesivos pueden soportar esfuerzos de cizalla [3, 4] cuando están en reposo y apilarse hasta un cierto grado sin desplazarse, deslizarse, resbalarse o moverse en avalancha. Las mezclas de polvos no cohesivos de diferentes tamaños o materiales pueden con frecuencia segregarse separando los constituyentes, aun cuando están en reposo [2]. Por otro lado, en los polvos cohesivos la segregación no es usual, pero alcanzan la uniformidad cuando se mezclan con otros polvos es más difícil y consume más energía [5].

Las operaciones de proceso como la fluidización, reducción de tamaño, mezclado mecánico o neumático, transporte mecánico o neumático, clasificación por tamaño, envasado por gravedad, tableteado, granulación, entre otras, someten a los polvos a esfuerzos y deformaciones que afectan su comportamiento. Por ello, al igual que en los líquidos, la reología se vuelve indispen-

sable para entender su comportamiento mecánico y la forma en que la estática y la dinámica de estos materiales se ve afectada o influenciada por distintos factores propios de su procesamiento y manejo. A pesar de que este hecho ha sido reconocido desde hace tiempo [6], los avances más importantes en este campo han ocurrido solamente a partir de la última década del siglo XX. Existe, actualmente, un número abundante y cada vez creciente de reportes científicos sobre las propiedades y comportamiento reológico de polvos y sus propiedades de flujo. Sin embargo, una revisión exhaustiva general o específica de estos aspectos está fuera del propósito de este artículo.

Propiedades físicas

Los polvos tienen propiedades físicas que les dan identidad en términos de su composición fisicoquímica, así como de su comportamiento bajo condiciones estáticas y dinámicas. La identidad puede ser individual, es decir, de las partículas que forman el polvo, o colectiva propia de toda la masa de polvo. La discusión detallada de todas y cada una de las propiedades físicas puede ser consultada en [1, 2, 7]. No

obstante, conviene señalar las propiedades más relevantes asociadas con el comportamiento de los polvos durante su manejo y procesamiento mecánico.

Adhesión: Es la adherencia entre un polvo y una superficie sólida. Es una propiedad de interfase de carácter primordialmente físico. Es débil en comparación con la adhesión química y usualmente es reversible.

Ángulo de reposo: Es el ángulo formado entre el plano horizontal y el perfil inclinado que forma una pila de polvo a granel cuando cae por gravedad y reposa sobre el plano. Es medido por el interior de la pila de polvo (Figura 1a).

Ángulo de reposo vertido: Es el ángulo de reposo por debajo del punto de fluidez del polvo a granel. Es el ángulo de reposo máximo o más pronunciado (Figura 1a).

Ángulo de reposo drenado: Es el ángulo de reposo cuando una pila de polvo emerge gradualmente y se desliza o se mueve en avalancha más allá de la periferia de la pila sobre un plano horizontal previamente enterrado en el polvo (Figura 1b).

Ángulo de deslizamiento: Es el ángulo formado por el perfil del polvo a granel cuando estando inicialmente estático escapa por la abertura del recipiente que lo contiene. Es medido por el interior del polvo que queda dentro del contenedor y debe indicarse la forma de dicho recipiente y su abertura [6] (Figura 1c).

Ángulo de fricción en la pared: Es el ángulo de inclinación de un plano inicialmente horizontal cuando su inclinación provoca el deslizamiento del polvo (Figura 1d).

Cohesión: La cohesión es la adherencia de las partículas de polvo a granel entre sí. Representa la resistencia del polvo a la cizalla [3] ante la aplicación de una carga normal de compresión.

Compresibilidad: Es el cambio de la densidad a granel con la presión aplicada al polvo.

Densidad: Usualmente es la densidad de la partícula que forma el polvo. En las mezclas de polvos es la densidad de las partículas que las forman.

Densidad a granel: Es la relación entre la masa de un polvo no compactado intencionalmente, también llamado no aireado, y el volumen que ocupa dicha masa. Depende del grado de compactación del polvo en el momento de la medición.

Densidad compactada: Es la relación entre la masa y el volumen de un polvo que ha sido compactado intencionalmente hasta un cierto grado.

Falla interna: Es la cizalla inducida por la aplicación de una carga normal conocida y controlada sobre una cama de polvo.

Fricción en la pared: Es la fuerza de fricción entre un polvo y una superficie sólida cuando hay movimiento. Usualmente el polvo se mueve y la superficie sólida está estática. Sin embargo, también puede ocurrir el caso contrario.

Permeabilidad: Es la tasa de migración del fluido intersticial, usualmente aire, a través del polvo por efecto de un gradiente de presión. Es importante en los polvos aireados, es decir, aquellos sometidos a operaciones de fluidización o de transporte neumático.

Resistencia a la tracción: Es la fuerza por unidad de área de superficie necesaria para romper una cama de sólido a granel compactado, sin presencia de cizalla, sobre el plano donde ocurre la fractura.

Tamaño de partícula: Es el tamaño expresado mediante un diámetro promedio conveniente [8] referido con frecuencia al diámetro equivalente de una esfera.

Volumen específico: Es el inverso de la densidad a granel.

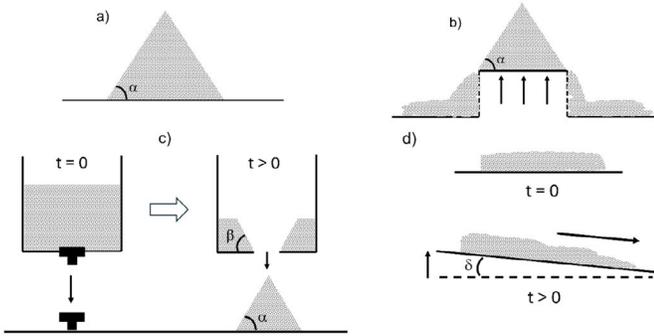


Figura 1. Representación esquemática de: a) ángulo de reposo y ángulo de reposo vertido (ángulo de reposo máximo), α , b) ángulo de reposo drenado, α , c) ángulo de deslizamiento, β , y d) ángulo de fricción en la pared, δ .

Propiedades reológicas

Fricción y cohesión: El comportamiento reológico de muchos polvos está descrito por una relación lineal, como ocurre con los sólidos elásticos y los fluidos viscosos. A esos polvos se les conoce como materiales ideales de Coulomb [2] y la relación lineal que describe su comportamiento es:

$$\tau = \mu\sigma + C \quad (1)$$

τ es el esfuerzo de cizalla [3, 4], μ es el coeficiente de fricción interna, σ es el esfuerzo normal [3, 4] y C es la cohesión del polvo. El coeficiente μ es el análogo de la viscosidad de los fluidos, dado que representa la resistencia del polvo al movimiento relativo ante la aplicación de un esfuerzo normal. La cohesión es el esfuerzo de cizalla necesario para que el polvo ceda ante la aplicación de un esfuerzo normal y empiece a fluir, dado que cuando $\tau < \mu\sigma + C$ no hay flujo. La cohesión se atribuye a la interacción entre las partículas de polvo responsable de la existencia de fuerzas internas en toda la masa de polvo [7]. Los conceptos de elasticidad y viscosidad no tienen sentido en el caso de los polvos, a menos de que las partículas que los forman no sean rígidas o que el polvo se convierta de alguna manera

en una pasta o suspensión concentrada de sólidos embebidos en un líquido, por ejemplo, un lodo, en cuyo caso el comportamiento reológico estaría descrito por las ecuaciones aplicables a los fluidos. El orden de magnitud de C sirve para distinguir los polvos cohesivos de los no cohesivos. Un polvo no cohesivo típico de esferas de vidrio ($175 \mu\text{m}$) tiene una cohesión entre 0 y 1.5 kPa, para una humedad adsorbida de 0 y 1 %, respectivamente, mientras que un polvo sustituto de crema para café tiene una cohesión entre 4.81 y 3.14 kPa, para contenidos de humedad de 0 a 7 %, respectivamente [7]. Cuando C es muy pequeño $\tau = \mu\sigma$ y, al multiplicar por el área del plano de falla del polvo, se obtiene $F = \mu N$, que es la bien conocida ecuación que relaciona la fricción entre cuerpos rígidos no granulares. La ecuación (1) suele presentarse como:

$$\tau = \sigma \tan\Phi + C \quad (2)$$

Φ es el ángulo de fricción, cuyo valor depende del material. Por ejemplo, entre 27 y 47° para alúmina, 33 y 40° para arena de cuarzo seca y 28 y 42° para harina de trigo [1]. Las desviaciones de las ecuaciones (1) y (2) requieren un análisis con la ecuación no lineal de Warren-Spring [7, 9].

Resistencia a la tracción: Esta resistencia está dada [1] por la relación:

$$T = \frac{W \text{ sen}\theta}{A} \quad (3)$$

W es el peso de la cama de polvo compactado, A es el área transversal y θ es el ángulo de inclinación en el momento en que la cama se fractura. Esta propiedad representa la tendencia del polvo compactado a resistir la escisión por la acción de una tensión de tracción y es considerada

como la manifestación macroscópica externa de fuerzas de atracción internas entre las partículas que forman el polvo [9]. La magnitud de estas fuerzas depende de la distancia entre las partículas empacadas. En los polvos cohesivos, T aumenta al aumentar la densidad de la cama compactada porque el número de partículas por unidad de volumen y la intensidad de las fuerzas entre partículas aumentan.

Resistencia a la cizalla: En los polvos no cohesivos $C \rightarrow 0$ en la ecuación (2) y cuando $\sigma = 0$ se cumple que $\tau = 0$. Entonces, el polvo no tiene resistencia a la cizalla, es decir, fluye libremente. En los polvos cohesivos, $C > 0$ y cuando $\sigma = 0$, se cumple que $\tau = C$. El polvo se resiste a la cizalla o, dicho de otra forma, está a punto de ceder y deslizarse por efecto de la presencia de un esfuerzo de cizalla. Por lo tanto, la magnitud de este esfuerzo es la resistencia a la cizalla.

Dilatancia: Es el aumento de volumen de un polvo cuando es sometido a deformaciones de cizalla [10]. Esta propiedad es importante durante el vaciado de silos.

Deslizamiento a punto: En general, los polvos cohesivos tienen “memoria”. El deslizamiento a punto (*ready sliding*) es un estado determinado por la historia previa de perturbación del polvo [1]. Por esta razón, puede ser necesario acondicionar previamente la muestra de polvo con una historia conocida antes de examinar la propiedad reológica o mecánica de interés.

Fluidez: Es la facilidad con la que una masa de polvo se desplaza una cierta distancia en un intervalo de tiempo. Es la respuesta dinámica de los polvos ante la aplicación de alguna cinemática particular. La dinámica

y la cinemática están relacionadas por alguna propiedad del polvo que gobierne su respuesta. Existen diferentes criterios para calificar la fluidez y así clasificar a los polvos. Las propiedades intrínsecas de los polvos y su interacción con factores externos afectan su fluidez.

Determinación experimental de las propiedades reológicas de los polvos

Existen diferentes métodos para determinar la fluidez de los polvos mediante la medición de alguna propiedad particular. Los métodos varían según se trate de polvos no aireados, aquellos con la fase gas intersticial natural, o polvos aireados cuya fase gas intersticial es modificada de alguna manera, por ejemplo, por fluidización. Los métodos pueden ser empíricos o fundamentales dependiendo del aparato que se use para aplicar la cinemática. La discusión se centra aquí en los polvos cohesivos no aireados [7-11, 12].

Pruebas cualitativas o empíricas: Sirven para comparar comportamientos de distintos polvos, por ejemplo, para propósitos de control de calidad. La fluidez se determina midiendo el ángulo de reposo y sus variantes por medio de embudos, cilindros con fondo cónico con orificio de descarga, y silos de diferente tamaño y sección transversal en los que el polvo fluye por gravedad o por vibración del dispositivo cuando la gravedad es insuficiente. La fluidez del polvo puede también ser caracterizada mediante el índice de Carr [7]:

$$\text{Índice de Carr} = \left(\frac{\text{densidad compactada} - \text{densidad a granel}}{\text{densidad compactada}} \right) 100 \quad (4)$$

y la relación de Hausner [7], H:

$$H = \frac{\text{densidad compactada}}{\text{densidad a granel}} \quad (5)$$

El Cuadro 2 muestra el uso de varios criterios para clasificar la fluidez de los polvos.

Pruebas fundamentales: En estas pruebas se aplica una cinemática controlada de esfuerzos o deformaciones. Se examinan las propiedades de falla interna de la masa de polvo no aireado como el ángulo de fricción en la pared, el ángulo efectivo de fricción interna, la función de falla, que representan la resistencia del polvo a fluir [13]. Adicionalmente, la cohesión y la resistencia a la tracción son específicas del comportamiento de flujo del polvo. Todas estas propiedades dependen notablemente del estado de compactación del polvo, el cual es significativo en los polvos cohesivos y prácticamente nulo en los no cohesivos o de flujo libre. La humedad, la temperatura y el tiempo de consolidación también pueden afectar a estas propiedades. Los instrumentos que se usan son esencialmente celdas de cizalla mono, bi, triaxiales y sus variantes como el anillo de cizalla, así como reómetros de polvos modernos [13, 14]. Asimismo, existen celdas comerciales específicas para determinar el ángulo de fricción en la pared y la resistencia a la tracción [15].

Cuadro 2. Criterios empíricos de fluidez de polvos. Compilado de [16, 17]

Fluidez	Ángulo de reposo (°)	H	Índice de Carr
Excelente	25 a 30	1.00 a 1.11	5 a 11
Buena	31 a 35	1.12 a 1.18	12 a 17
Adecuada ^(a)	36 a 40	n.e.	n.e.
Aceptable ^(b)	41 a 45	1.19 a 1.34	18 a 22
Pobre ^(c)	46 a 55	1.35 a 1.45	26 a 31
Muy pobre	56 a 65	1.46 a 1.59	35 a 38
Extremadamente pobre	Mayor de 66	Mayor de 1.60	Mayor de 38

^{a)}no necesita ayuda, ^(b)puede demorarse, ^(c)es necesario someterlo a vibración, n.e. no especificado.

Celda de cizalla y anillo de cizalla: La celda de cizalla o celda Jenike [18] y su variante el anillo de cizalla se usan para determinar la fluidez de los polvos cohesivos. Los fundamentos de su funcionamiento, ventajas, desventajas y limitaciones pueden consultarse en [1, 2, 11, 13, 18]. Las pruebas con estos dispositivos se consideran fundamentales, porque examinan la respuesta del polvo ante la aplicación de esfuerzos normales, σ , conocidos y controlados sobre una cama de polvo estática (celda) o dinámica (anillo) y se determinan los esfuerzos de cizalla, τ , resultantes. Con los pares de datos σ - τ se construye la curva de cedencia (*yield locus*) y con ella se determina la cohesión, el ángulo de fricción interna y la resistencia a la tracción límite. La fluidez se determina a partir del análisis con los semicírculos de Mohr [1, 2, 11, 13, 18] como se ilustra en la Figura 2.

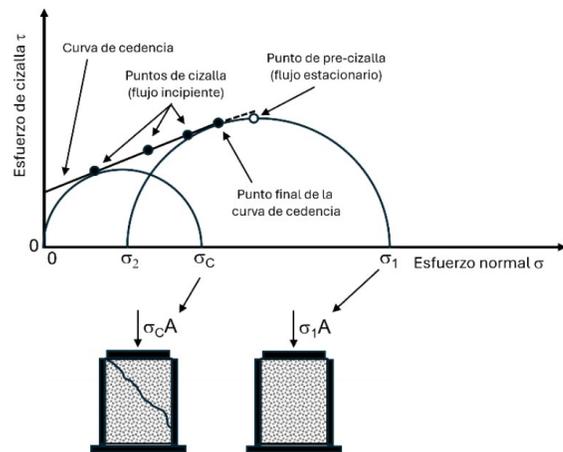


Figura 2. Curva de cedencia y semicírculos de Mohr para localizar el esfuerzo normal de cedencia no confinado, σ_C (flujo incipiente), y el esfuerzo normal de consolidación, σ_1 (flujo másico), como se muestra esquemáticamente debajo de la gráfica

El factor de flujo, ff, [7, 11], se calcula como:

$$ff = \frac{\sigma_1}{\sigma_C} \quad (6)$$

El valor de ff se usa como criterio de fluidez [18] como se muestra en el Cuadro 3.

Cuadro 3. Fluides de acuerdo con el criterio de ff [7, 11, 18]

ff	Condición
Menor de 1	No hay flujo
Entre 1 y 2	Muy cohesivo, mucha dificultad para fluir
Entre 2 y 4	Cohesivo, fluye con dificultad
Entre 4 y 10	Poco cohesivo, fluye con facilidad
Mayor de 10	No cohesivo, fluye libremente

Reómetros de polvos

Las primeras investigaciones sistemáticas con estos equipos se hicieron principalmente con reómetros para fluidos adaptados para poner en movimiento con un dispositivo de palas verticales rectas una masa de polvo contenida en una copa cilíndrica (Figura 3a). El comportamiento del polvo ante cinemáticas estacionarias angulares o no estacionarias oscilatorias fue examinado mediante la variación del torque con la rapidez o el esfuerzo de cizalla según el reómetro utilizado y los resultados presentados como “viscosidad” del polvo [19]. Actualmente, se ha popularizado el uso de un reómetro de polvos [14, 20] en el que se aplica una cinemática helicoidal con un dispositivo de dos hojas horizontales de forma triangular torcida en sentido contrario que desciende y asciende al mismo tiempo que gira angularmente sobre su eje en el interior de la masa de polvo (Figura 3b).

Según el fabricante [14], la cinemática helicoidal usada con distintos accesorios permite caracterizar la dinámica de flujo de polvos no aireados, aireados, consolidados, así como propiedades a granel como compresibilidad y permeabilidad. Adicionalmente, el acoplamiento de una celda de cizalla al reómetro permite determinar las propiedades señaladas en la sección precedente.

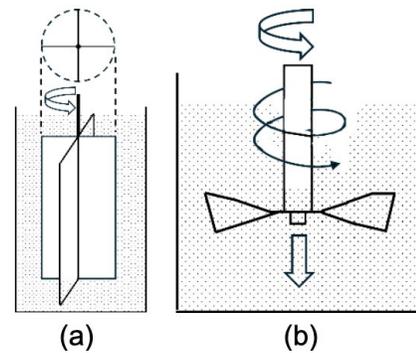


Figura 3. (a) Palas rectas, (b) hojas torcidas

Conclusión

Existen muchos métodos diferentes para analizar el comportamiento mecánico de polvos. La reología de polvos permite determinar ese comportamiento bajo condiciones usuales de manejo y procesamiento de estos materiales. Los métodos pueden agruparse en empíricos y fundamentales. Los primeros usan mediciones simples y rápidas que permiten diagnosticar y resolver situaciones prácticas durante el procesamiento. Sin embargo, su utilidad puede ser limitada a actividades específicas como el control de calidad. Los segundos permiten comprender de una mejor manera las propiedades y el comportamiento del polvo con base en el estudio de su mecánica fundamental. El término fluides no deja de ser relativo, porque el flujo real de un polvo depende de sus propiedades y de la cinemática aplicada en los diferentes instrumentos usados para su evaluación.

Referencias

- [1] R. L. Brown, J. C. Richards, Principles of Powder Mechanics. Essays on the Packing and Flow of Powders and Bulk Solids, Pergamon, Oxford, UK, 1970.
- [2] R. M. Nedderman, Statics and Kinematics of Granular Materials, Cambridge University Press, New York, 1992.
- [3] J. M. Aguilera, L. D. Hidalgo, Glosario de Términos Reológicos para Alimentos en español y en portugués, Gráficas Barrastil, Valencia, España, 1996.
- [4] Groupe Français de Rhéologie, Dictionnaire de Rhéologie : Français, Anglais, Allemand, Espagnol, Société d'Éditions du Bâtiment et des Travaux Publics, Paris, France, 1990.

- [5] I. Gijón-Arreortúa, A. Tecante, Mixing time and power consumption during blending of cohesive food powders with a horizontal helical double-ribbon impeller, *Journal of Food Engineering* 149 (2015) 144–152. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2014.10.013>
- [6] B. H. Kaye, *Powder Mixing*, Chapman & Hall, London, UK, 1997.
- [7] G. V. Barbosa-Cánovas, E. Ortega-Rivas, P. Juliano, H. Yan, *Food Powders: Physical Properties, Processing and Functionality*, Kluwer Academic/Plenum Publishers, New York, 2005.
- [8] M. Anderliesten, *Mean Particle Diameters. From Statistical Definition to Physical Understanding*, Gildeprint, Enschede, The Netherlands, 2008.
- [9] P. García-Triñanes, S. Luding, H. Shi, Tensile strength of cohesive powders, *Advanced Powder Technology* 30 (2019) 2868–2880. <https://doi:10.1016/j.ap.2019.08.017>
- [10] M. E. Cates, M. D. Haw, C. B. Holmes, Dilatancy, jamming, and the physics of granulation, *Journal of Physics: Condensed Matter* 17(24) (2008) S2517–S2531. <https://doi:10.1088/0953-8984/17/24/010>
- [11] D. Schulze, *Powders and Bulk Solids: Behavior, Characterization, Storage and Flow*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2008.
- [12] M. Peleg, Flowability of food powders and methods for its evaluation - a review, *Journal of Food Process and Engineering* 1 (1977), 303–328.
- [13] L. Svarovsky, *Powder Testing Guide: Methods of Measuring the Physical Properties of Bulk Powders*. Elsevier Applied Science Publishers LTD, Great Britain, 1987.
- [14] <https://www.micromeritics.com/ft4-powder-rheometer/?lang=es> (consultado en marzo de 2024).
- [15] <https://www.ajax.co.uk/powdertest.htm#group-1> (consultado en marzo de 2024).
- [16] Farmacopea de los Estados Unidos Mexicanos (FEUM). Ángulo de reposo (2021) <https://pdfcoffee.com/feum-angulo-reposo-2-pdf-free.html> (consultado el 12 de junio de 2024)
- [17] Farmacopea de los Estados Unidos Mexicanos (FEUM). Densidad aparente y densidad compactada de los polvos (2021). <https://pdfcoffee.com/densidad-polvos-4-pdf-free.html> (consultado el 12 de junio de 2024)
- [18] A. W. Jenike, Storage and flow of solids. Bulletin. No. 123 of the Engineering Experiment Station, Vol 53, No. 26, November 1964. University of Utah, Salt Lake City, United States. <https://digital.library.unt.edu/ark:/67531/metadc1067072/m1/1/> (consultado en marzo de 2024).
- [19] A. Barois-Cazenave, P. Marchal, V. Falk, L. Choplin, Experimental study of powder rheological behaviour, *Powder Technology* 103 (1999) 58–64.
- [20] R. Freeman, Measuring the flow properties of consolidated, conditioned and aerated powders — A comparative study using a powder rheometer and a rotational shear cell, *Powder Technology* 174 (2007) 25–33. <https://doi:10.1016/j.powtec.2006.10.016>

Reflexionando otra ciencia para México

Andrés Portilla Martínez

Organización No Gubernamental Disociadxs. Coordinación de reducción de riesgos y daños. Colectivo DiVU: Diversidad, cultura, género, alimentación y ciencia A.C. www.divu.mx @divu_ac @colectivodivu andresmeaney@gmail.com

“El trabajo de un buen escrito se desarrolla en tres niveles: uno musical, donde se compone; uno arquitectónico, donde se construye; y por último, uno textil, donde se teje”.
Walter Benjamin

Rechazar lo propio y favorecer lo extranjero

Expresiones como “es que así es mi filosofía de vida” o “me gusta cuando nos reunimos a filosofar” han trivializado y banalizado la participación de la filosofía en nuestros espacios. Sobre todo en los espacios donde hacemos ciencia, pues se cree que la filosofía ya no es necesaria (o ni siquiera tenemos idea de lo que significa). La ciencia ha influenciado ampliamente a la filosofía moderna y ha reemplazado muchas de las especulaciones metafísicas con puntos de partida diferentes. Desafortunadamente, la situación de regreso no es igual (a pesar de que en su origen el pensamiento científico debía ser acompañado del filosófico). En la actualidad, la ciencia se ha olvidado de eso y ha cerrado sus puertas a la filosofía. Quizás “ya se le subió”, entre tantos logros acumulados a lo largo de la historia y entre tanta ciencia ficción. El cientificismo domina discursos profesionales, cotidianos y hasta pseudocientíficos.

Si tan solo la ciencia nos dejara tomar prestado la manera de pensar que la filosofía ha conservado (y desarrollado durante un milenio), nuestra realidad sería otra. Y es que su valor hacia la sociedad podría incrementar si pudiéramos aplicar los logros científicos utilizando la inteligencia que la filosofía nos puede proporcionar. Por ejemplo, si miramos a la falacia ecológica, entendiendo a la falacia no como mentira sino como se usa en filosofía: una forma de pensar que no es lógica. La falacia nos dice que todos los miembros de un grupo muestran las mismas características del grupo. Es decir que, si de un grupo de personas elegimos a una y luego queremos explicar a todas las personas del grupo con la información obtenida de esa única persona, estaríamos cayendo en la falacia ecológica. Esto lo vemos todo el tiempo, cuando nos recetan un medicamento dejamos que las oficinas de la industria farmacéutica decidan qué dosis debemos tomar a partir de su estudio clínico, en lugar de dejar que una persona profe-

sional de la salud las determine; porque los medicamentos no son los que tienen dosis, somos las personas quienes las tenemos.

Aquí, la filosofía nos ayuda a identificar la falacia ecológica (y luego a reconocer que los medicamentos pueden tener efectos diferentes en personas distintas, a pesar de ser consumidos de la misma manera). La ciencia no proporciona toda la información necesaria para tomar la mejor decisión. Confiar exclusivamente en la ciencia puede producir percepciones alteradas de la realidad. Para contrarrestar esto debemos adoptar formas de pensar que son más familiares en la filosofía que en la ciencia. Sin embargo, debido a nuestra concepción generalizada de la ciencia como omnipotente y omnipresente, resulta extremadamente difícil repensar nuestros enfoques y percepciones científicas. Esta lógica avasallante se debe a que la ciencia moderna y su desarrollo han estado históricamente ligados a procesos de dominación y explotación colonial. Además, el conocimiento científico occidental se ha construido sobre la base de una cosmovisión eurocéntrica que ha excluido y subordinado a otros sistemas de conocimiento y formas de vida [1].

Y es que hasta en la forma de escribir ciencia estamos atorados. En México se sigue practicando la llamada *redacción impersonal*. “Se obtuvo el resultado esperado”, “se pesaron 0.1 mg”, “se lograron trescientos experimentos imposibles en una semana”... Así, quien escribe habla en tercera persona y evita utilizar referencias personales a manera de estrategia retórica discursiva que busca crear distancia entre el autor y el texto, estableciendo así la autoridad y la objetividad de la ciencia. Muy parecido al plural mayestático (del latín “plural de ma-

jestad”) que utilizan los monarcas o líderes políticos al nunca referirse a ellos mismo con un “yo”, sino que utilizan la primera persona del plural “nosotros” al dirigirse a sus súbditos (y con esto dan a entender que existe una relación de poder). Según Bruno Latour (filósofo de la ciencia), la persona científica crea la ilusión de que la ciencia es un proceso objetivo neutral, separado de los valores, intereses y relaciones sociales. Él critica esta concepción de objetividad y argumenta que la ciencia es en realidad una actividad social colectiva, en la cual los científicos están involucrados en la construcción activa del conocimiento. Por eso, en este texto quiero acercarme más al lector para alejarme de esa entidad científicista despersonalizada y mostraré algunos signos y síntomas a los que nos enfrentamos como personas para entonces explorar la posibilidad de hacerlos a un lado y curarnos de la ciencia mexicana, que tal parece que además de favorecer a lo extranjero, es también apolítica y afilosófica.

El meridiano científico

A la ciencia se le muestra “desprendida” de los eventos mundiales. Aislada y estudiosa. Pero lo cierto es que siempre ha estado sujeta a los acontecimientos sociopolíticos globales. Revisemos la historia del meridiano cero (o meridiano de Greenwich) y podremos ver un poco de esto. Desde este punto geográfico se define *dónde debemos partir para comenzar a contar las horas* o, en otras palabras, *dónde debemos comenzar a contar nuestra historia del día a día*. Pero no siempre estuvo en Greenwich, antes estuvo en las Islas Canarias, y antes en Francia, y antes en Roma... Tonatiuh Suárez, en su artículo el *Aleph Geográfico*, apunta muy bien que “Mientras el paralelo cero se encuentra inexorablemente en el ecuador, el meridiano cero va cambiando de un lugar

a otro, dependiendo de donde se vaya ubicando la capital hegemónica del mundo” [2]. Es decir que, desde tiempos antiguos, quien controle ese punto controlará el discurso hegemónico, y al parecer, mientras sigamos apreciando de esa manera al meridiano, seguiremos esperando a que desde fuera nos vayan diciendo de dónde debemos partir para contar nuestra historia.

Lamentablemente, en México se nos enseña que las ciencias duras deben ser apolíticas y que como científicos preparados no debemos involucrarnos en esos rebuscados temas dignos de instituciones y de políticos. Isabelle Stengers, en su manifiesto de *Otra Ciencia es Posible*, argumenta que la forma en que se practica la ciencia actual es una forma de aceleración, en la que el objetivo principal es publicar cada vez más resultados y obtener cada vez más financiamiento. Según ella, esta forma de hacer ciencia ha llevado a la exclusión de perspectivas y enfoques que no se ajustan a esta idea de la ciencia [3]. Por eso es probable que no veamos necesaria la política en los espacios científicos, pero debemos recordar que la política no es solo lo que hacen los políticos. La política la podemos hacer cualquier persona y en todos nuestros lugares, siempre y cuando se generen espacios de escucha efectiva. Si no hacemos política con y desde la ciencia, estamos dejando que otras personas tomen las decisiones por nosotros. Es decir, seguiremos esperando que *quien controle el meridiano* maneje la política de la ciencia. Con esto, Bruno Latour argumenta que la ciencia no puede ser neutral y objetiva, ya que los científicos no operan en un vacío, sino que están influenciados por una serie de factores políticos, económicos y culturales. Según Latour, los científicos deben reconocer y ser conscientes de estas

influencias, y deben involucrarse activamente en la política para garantizar que la ciencia sea utilizada para el bien común [4]. Durante nuestra formación como científicos se nos dice que debemos aprender a hablar y a escribir de dos formas, una para la comunidad científica y otra para la comunidad no científica. Esto funciona para que, en la primera, los términos especializados ayuden a comunicar de manera precisa, reduciendo al máximo las ambigüedades y *ser lo más concreto posible*. En la segunda también se nos dice que debemos utilizar terminología precisa para reducir lo más posible las ambigüedades y comunicar de la forma más concreta posible. Entonces, si en ambas es lo mismo, ¿para qué tanto ocultismo en torno a los tecnicismos profesionales? Es evidente y lógico que ambas tienen en común comunicar ideas. Esto no es nada nuevo, pero aunque no lo parezca, esconde un trasfondo turbio, un problema que, sin saber, lo estamos enfrentando. Ese trasfondo, además de favorecer lo extranjero, arrastra una herencia positivista.

La ciencia carroñera

Durante mi estancia doctoral en el Instituto Politécnico Nacional y mientras intentaba contar mi historia, escribí un texto en español utilizando fuentes en inglés en el que usé la palabra *carroñero* –traducción literal de la palabra *scavengers*–, para continuar con el mismo recuso literario de la metáfora que nuestros congéneres investigadores utilizan en inglés. Esta se refiere a la actividad de una molécula que busca los desechos celulares para lidiar con ellos (como lo haría un animal carroñero). En este intento de utilizar el lenguaje y los recursos literarios, me gané un insulto y un regaño por *idealista soñador*. De esta historia (dentro de muchas) quiero destacar cómo se pone en

evidencia la herencia positivista en la ciencia que se practica en México. Recordemos esas ideas tan horribles que algún día Karl Popper dejó escritas en papel en su obra “La lógica de la investigación científica”, donde nos cuenta cómo él piensa que la ciencia se encuentra por encima de literatura. En su libro argumenta que la ciencia es un método de conocimiento superior a otros métodos, incluyendo la literatura, la religión y la filosofía especulativa. Según Popper, la ciencia se diferencia de la literatura en que la ciencia busca crear teorías que puedan ser refutadas a través de la observación empírica y la experimentación, mientras que la literatura no tiene este objetivo y se enfoca en la expresión artística y la narrativa [5]. Cuando mis tutores rechazaron la traducción literaria que hice del concepto, me di cuenta de que en realidad no sabían por qué lo hacían, salvo sus ganas de demostrar superioridad epistémica. Y digo que no sabían, porque no parecían estar enterados de la influencia positivista popperiana de sus argumentos, misma que en otros países (incluso los dueños del mundo) han logrado erradicar, tomando recursos de figuras retóricas para argumentar y explicar sus textos. Porque la literatura y otras formas de arte pueden proporcionar una comprensión más completa y profunda de la realidad humana y del mundo natural. Al final, terminamos siendo igual de carroñeros como esas moléculas buscando y consumiendo las sobras de las ideas positivistas de los dueños, y también malinchistas, por creer que existe una policía de la ciencia que vigila y restringe los movimientos creativos.

No podría decir quién es ese tal dueño de la ciencia, pero hasta ahorita, y con este texto, sabemos que tal dueño controla el meridiano cero y que habla inglés. Aquí surge

otro punto importante: ¿por qué seguimos haciendo ciencia en inglés? Para comienzos del siglo XX, la ciencia se escribía en alemán, francés e inglés. El francés fue desapareciendo poco a poco y, para después de la Segunda Guerra Mundial, el alemán dejó de figurar como idioma científico (y esto porque el fascismo nazi provocó la migración de la comunidad científica a países angloparlantes y las restricciones de visas limitaron la llegada de nuevos estudiantes a Alemania). Para los años 50, el 50 % de publicaciones estaban en inglés y el 20 % en ruso. Fue para los años 70 que el inglés toma posición sobre el ruso, el chino y el francés, llegando a ocupar hoy hasta el 90 % del total de publicaciones [6]. ¿Habría que esperar a que una calamidad global suceda o que la partida de ajedrez de los poderosos esté a nuestro favor para que dejemos de hacer ciencia en inglés? Yo digo que no, y a continuación doy otro argumento a favor.

Son 17 años los que tarda en trasladarse la información de la mesa de laboratorios a los libros de texto en países angloparlantes [7]. Acá en México, eran más o menos 23 años de retraso cuando yo cursé la carrera en química farmacéutica biológica. Es decir que en el 2013, en la mayoría de las materias se me enseñaba lo que se había observado en una mesa de laboratorio 23 años atrás. Para el 2017, en la maestría en Ciencias en Farmacología seguíamos con un retraso de más o menos 21 años. Fue para el 2018 que debí actualizarme para acortar la brecha y lograr varios proyectos de investigación “de punta” que realizamos (mi equipo y yo) durante esos años, mismas que se publicaron en revistas suecas, alemanas y estadounidenses, con el distintivo de ser un *Journal Citation Report* (JCR) (revistas internacionales de alto impacto). En estos artículos y de entre

varios temas describimos los mecanismos moleculares de la unión fármaco-receptor en modelos computacionales (*in silico*) y modelos celulares (*in vivo*) (figura1) [8-11]. Y en efecto, es tan sofisticado como suena, pero de nuevo el mismo problema, todo lo que escribimos debe estar en inglés.

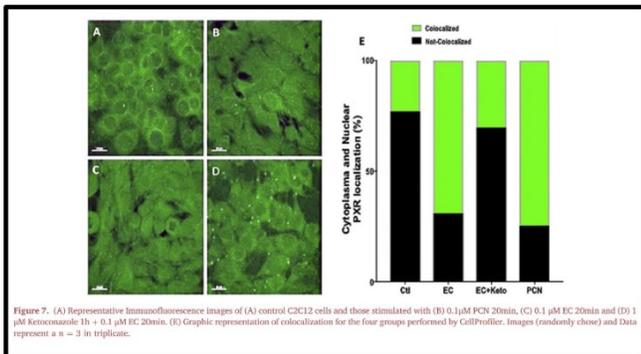


Figure 7. (A) Representative immunofluorescence images of (A) control C2C12 cells and those stimulated with (B) 0.1 μM PCN 20min, (C) 0.1 μM EC 20min and (D) 0.1 μM EC + 1h + 0.1 μM EC 20min. (E) Graphic representation of colocalization for the four groups performed by CellProfiler. Images (randomly chosen) and Data represent a n = 3 in triplicate.

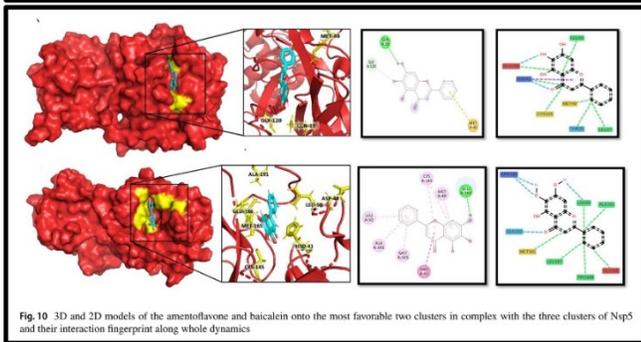


Fig.10 3D and 2D models of the amentoflavone and baicalein onto the most favorable two clusters in complex with the three clusters of Nsp5 and their interaction fingerprint along whole dynamics

Figura 1. Imágenes tomadas de dos publicaciones de investigaciones realizadas por mi equipo. En la imagen de arriba se muestra un cultivo celular crecido en portaobjetos y teñido con colorantes especiales para que puedan fluorecer (brillar) unas proteínas específicas [11]. En la imagen de abajo analizamos, mediante modelos computacionales, la posibilidad de una molécula de origen natural para unirse a una proteína del coronavirus y que funcione como inhibidor, por lo tanto, esta molécula es investigada como posible medicamento anti SARS-CoV-2 [10].

Estas investigaciones (consideradas por nuestros colegas dueños del mundo como *ciencia de vanguardia*), es ciencia para ellos (o para quienes saben inglés). Y entonces, si estuviesen en español se me ocurre que podrían pasar varios fenómenos. El primero es que sería ciencia para nosotros, ciencia para México y luego para el mundo. El segundo es que más gente (inscrita o no a un

programa académico) podrá acceder a esta información, haciendo más democrático este proceso y, con un poco de suerte, la gente (al estar enterada de lo que hacemos en los centros de investigación) podría recuperar la confianza por la ciencia mexicana. Un tercer fenómeno que se me ocurre es el hecho de participar en el acortamiento de la brecha del conocimiento, ya que no habría que realizar un esfuerzo extra para traducir textos que en un inicio debieron estar en español, y entonces, esos 23 años que se experimentan en las aulas donde se habla español podrían reducirse a los 17 años iniciales (o hasta menos tiempo). Entonces, a pesar de que exista un idioma para hacer ciencia, no tenemos por qué obedecerla, y ese es el punto.

La alternativa infernal y qué hacer

El hecho de que no podamos decidir por una nueva alternativa de cómo hacer y cómo publicar *ciencia* es a lo que Isabelle Stengers llama "la alternativa Infernal". Según Stengers, la "alternativa infernal" se refiere a la situación en la que nos encontramos cuando creemos que solo tenemos dos opciones para resolver un problema. Argumenta que, en muchos casos, las soluciones a los problemas que enfrentamos hoy en día están limitadas por un conjunto de opciones que se consideran "realistas" o "factibles" y que esta limitación de opciones es una consecuencia de la creencia generalizada en que el único camino posible hacia la solución de los problemas es a través de una lógica de la dominación, la competencia y el control. En su opinión, esta lógica es la que ha llevado a la creación de la "alternativa infernal". Entonces, la alternativa infernal es una llamada a repensar nuestro enfoque hacia los problemas y buscar soluciones que no estén limitadas por las opciones dentro

del marco dominante de pensamiento, ya que la búsqueda del progreso y el desarrollo a cualquier costo puede llevar a consecuencias indeseables y a una pérdida de control sobre nuestro propio destino. En cambio, debemos estar dispuestos a explorar nuevas posibilidades y a considerar perspectivas alternativas que nos permitan construir un futuro más sostenible, justo y equitativo para todos. Stengers propone la adopción de una ciencia "lenta" que se centre en la construcción de conocimientos a largo plazo y en la toma de decisiones informadas y responsables [3]. Por eso es necesaria una descolonización de la ciencia, generando nuevos abordajes de cómo hacer ciencia que tenga en cuenta la diversidad epistémica y cultural. Esto implica reconocer y valorar los saberes y cosmovisiones de los pueblos originarios y otros grupos marginados, y promover su participación en la producción de conocimiento científico y tecnológico.

No tenemos que esperar a que nos llegué el legendario extranjero a explicar cómo funcionan las cosas, la ciencia y la creatividad. Que, en efecto, existen instituciones que ya están replanteando la forma de hacer ciencia para México, como lo es el Instituto Nacional de Medicina Genómicas (INMEGEN), la Universidad Autónoma Metropolitana y la Universidad Autónoma de la Ciudad de México, que han implementado líneas de investigación que colocan al territorio y a la población mexicana como problema eje, tanto en las ciencias biológicas como en las ciencias sociales.

Es fundamental que, como país, nos autoapreciemos y tengamos el valor suficiente para creer en nuestra propia creatividad y habilidades. Debemos tener la confianza de inventar conceptos, diseñar fármacos y rede-

finir teorías científicas. Por lo tanto, es fundamental que nuestra propia comunidad sepa sobre la ciencia que hacemos en México, los alcances de esta y los posibles desenlaces. Convirtámonos en dueños de nuestra propia ciencia y acortemos la brecha del conocimiento para que este llegue a más personas. Utilicemos la pluma de la literatura como aliada para tejer ciencia con hilos de la imaginación y observación, o bien, cinceleemos con palabras cada sentimiento o cada historia que viva en nuestra mente. Acompañémonos del brazo de la filosofía para apoyar nuestro discurso y que la política impacte en nuestro deseo ardiente de convertir a México en un hogar más digno. A toda nuestra raza mexicana les insto a que dejemos de ver al dueño del meridiano como faro y generemos nuestra propia luz. Tenemos la infraestructura y las posibilidades de contar nuestra historia desde nuestro lugar.

Referencias

1. Dussel E. Eurocentrismo y modernidad (introducción a las lecturas de Frankfurt). Capitalismo y geopolítica del conocimiento. El eurocentrismo y la filosofía de la liberación en el debate intelectual contemporáneo. 2001. p. 59–70.
2. Meaney TS. El aleph geográfico. CIUDADES [Internet]. 2003;11. Available from: <https://geoestrategias.com.mx/descargas/publicaciones/20-el-aleph-geografico.pdf>
3. Stengers I. Otra ciencia es posible. Manifiesto por una desaceleración de las ciencias. Ediciones N, editor. 2019. 176 p.
4. Latour B. Ciencia en acción. Labor E, editor. 1987.
5. Popper K. La lógica de la investigación científica. TECNOS E, editor. 1980. 447 p.
6. BBC. Cómo el inglés se convirtió en la lengua "universal" de la ciencia y por qué en el futuro puede dejar de serlo [Internet]. BBC News Mundo. 2019. Available from: <https://www.bbc.com/mundo/noticias-49610224>
7. Morris ZS, Wooding S, Grant J. The answer is 17 years. J R Soc Med. 2011;104:510–20.
8. Portilla-Martínez A, Ortiz-flores MÁ, Meaney E, Villarreal F, Nayelli N, Ceballos G. (-) -Epicatechin Is a Biased Ligand of Apelin Receptor. Int J Mol Sci. 2022;1–22.
9. Ortiz-Flores M, Portilla-Martínez A, González-Ruiz C, Villarreal F, Meaney E, Nájera N, et al. Catechins modulate the activity of mu opioid receptor (μ OR): An in silico approach. Informatics Med Unlocked. 2020;20.
10. Portilla-Martínez A, Ortiz-Flores M, Hidalgo I, González-Ruiz C, Meaney E, Ceballos G, et al. In silico evaluation of

flavonoids as potential inhibitors of SARS-CoV-2 main non-structural proteins (Nsps)—amentoflavone as a multitarget candidate. *J Mol Model* [Internet]. 2022;28(12):1–19. Available from: <https://doi.org/10.1007/s00894-022-05391-6>

11. Ortiz-Flores M, Portilla-Martínez A, Cabrera-Pérez F, Nájera N, Meaney E, Villarreal F, et al. PXR is a target of (-)-epicatechin in skeletal muscle. *Heliyon*. 2020;6(10).

12. Dussel E. Hacia la liberación científica y tecnológica [Internet]. *América Latina en Movimiento*. 2014. p. 492–4. Available from: http://enriquedussel.com/txt/Textos_Articulos/447.2014.pdf

A cuentagotas: Un vistazo a la distribución del tamaño de gotas y su influencia en las propiedades de emulsiones

Janett Montaña-Salazar, Rosa María Mariscal-Romero, Ana Paulina Gómora-Figueroa, Adrián Peralta-Jarquín

Departamento de Ingeniería Petrolera, División de Ingeniería en Ciencias de la Tierra, Facultad de Ingeniería, UNAM
rosa.m.mariscal@comunidad.unam.mx

Resumen

Las emulsiones se encuentran en muchos productos de nuestra vida cotidiana, algunos ejemplos están presentes en cosméticos, detergentes, alimentos, medicamentos... También tienen aplicaciones variadas en la industria petrolera, ya que se utilizan en lodos de perforación, para la reducción de viscosidad del aceite, recuperación mejorada de aceite (Enhanced Oil Recovery, EOR, por sus siglas en inglés) y en la fabricación de fluidos para la terminación de pozos, por mencionar algunos ejemplos. Las emulsiones se definen como sistemas coloidales termodinámicamente inestables compuestos por dos fases líquidas inmiscibles entre sí, una fase es continua y otra dispersa (en forma de gotas). El tamaño, forma y distribución de dichas gotas tienen implicaciones significativas en las propiedades físicas, químicas y reológicas de las emulsiones.

La descripción de una emulsión a través de su distribución de tamaño de gota puede llegar a ser compleja, debido a que la morfología de las gotas es variable. En este sentido, la caracterización de estas últimas permite obtener un inventario estadístico de su tamaño para analizar la estabilidad y la viscosidad de las emulsiones.

La descripción de una emulsión a través de su distribución de tamaño de gota puede llegar a ser compleja, debido a que la morfología de las gotas es variable. En este sentido, la caracterización de estas últimas permite obtener un inventario estadístico de su tamaño para analizar la estabilidad y la viscosidad de las emulsiones.

En este estudio se exploran factores cruciales que determinan la formación y estabilidad de emulsiones, tales como la viscosidad,

el tipo de emulsión y las dimensiones de las gotas. Para profundizar en el análisis del tamaño de las gotas, se ha creado un programa computacional en Python nombrado ROJA_LIRFFF, el cual se apoya en las capacidades de la biblioteca skimage en el dominio de la visión artificial. ROJA_LIRFFF tiene la capacidad de analizar micrografías de emulsiones, identificando y diferenciando claramente las gotas de las impurezas o ruido ambiental. Skimage, reconocida como una biblioteca líder en el procesamiento de imágenes, proporciona herramientas robustas para la manipulación y análisis de imágenes con alta precisión. Al integrar y aprovechar sus submódulos especializados, ROJA_LIRFFF optimiza el proceso, permitiendo una cuantificación automatizada del número y tamaño de las gotas a partir de extensas micrografías, representando así un ahorro significativo en tiempo y esfuerzo. Para este trabajo, se analizaron 145 imágenes correspondientes a 18 emulsiones, donde cada imagen era de 2592 x 1944 píxeles. En total se analizaron 20 933 gotas con un promedio de 1 162 gotas por imagen, el radio de gota oscila entre los 0.00371 y 4.98485 mm con un radio promedio de 0.034433 mm. También, se obtuvieron las distribuciones de tamaño de gota. Después de caracterizar a las emulsiones y analizar los resultados, se encontró que el tamaño de gota aumenta conforme incrementa la salinidad y se observa la misma tendencia con respecto al tiempo, esto es, del día 0 y al día 7. Posteriormente, el tamaño de gota disminuye para las emulsiones con salinidad de 8 000 a 25 000 ppm, lo cual puede relacionarse con mayor estabilidad de las emulsiones con el paso del tiempo. También se observó un aumento ligero de la viscosidad (cerca de 11 cP) para los sistemas que mostraron mayor reducción de tamaño

de gota con el tiempo. Las emulsiones se mantuvieron en observación por más de 30 días, sin embargo, comenzaron a romperse desde el día 7.

Palabras clave

Emulsiones, industria petrolera, tamaño de gota, viscosidad, surfactante, inteligencia artificial, python, visión artificial

Introducción

En la actualidad, muchos campos maduros de aceite presentan problemas de producción debido a la presencia de agua. Algunas de estas problemáticas incluyen la formación de emulsiones agua en aceite (W/O), la corrosión, la generación de incrustaciones y la precipitación de sólidos orgánicos. Estos problemas pueden presentarse tanto en el sistema de producción como en líneas de descarga en superficie. A pesar de que la generación de emulsiones es un problema durante la producción de aceite, estas pueden funcionar como una alternativa para el transporte de hidrocarburos en la industria petrolera, mejorando los tiempos de producción, el manejo y el acondicionamiento de hidrocarburos, resultando en un mejor aprovechamiento de estos (Khalil de Oliveira et al., 2014; Langevin et al., 2004; Maaref & Ayatollahi, 2017; Salager, 2000; Zhou et al., 2017). Una emulsión es una mezcla homogénea que se compone de dos fases líquidas, normalmente inmiscibles, una continua (externa) y otra dispersa (o interna), en forma de gotas (Figura 1); dichas mezclas son estabilizadas por un surfactante o agente emulsificante. Las emulsiones pueden clasificarse de la forma siguiente (Fullerton Cook & W. Martin, 1953; Sanz Olmos, 2017):

- Emulsión aceite en agua (O/W): la fase externa es acuosa (agua) y la interna es oleosa (aceite).

- Emulsión agua en aceite (W/O): la fase externa es oleosa (aceite) y la interna es acuosa (agua).
- Emulsiones múltiples: son sistemas polifásicos y termodinámicamente inestables y pueden ser: agua en aceite en agua (W/O/W) o aceite en agua en aceite (O/W/O).

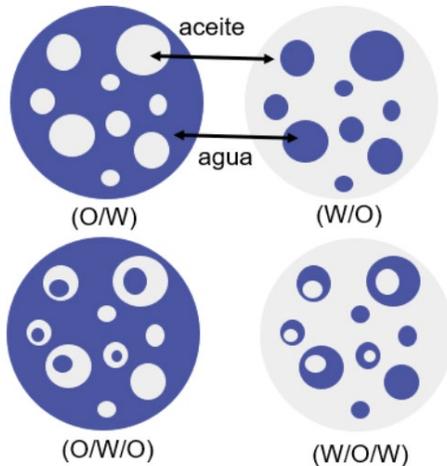


Figura 1. Clasificación de emulsiones por fases: sencillas y múltiples (elaboración propia)

Las emulsiones también se clasifican por su tamaño de gota, el cual tiene un impacto significativo en la estabilidad de la emulsión. Las emulsiones con gotas más pequeñas tienden a ser más estables y menos propensas a la coalescencia¹. La Tabla 1 muestra algunas características de las emulsiones con base en su tamaño de gota (McClements, 2011).

Tabla 1. Propiedades que presentan las emulsiones dependiendo de su tamaño de gota (McClements, 2011)

Tipo de emulsión	Radio de la gota	Estabilidad termodinámica	Área superficial (m ² /g)	Cantidad de surfactante
Emulsión (macroemulsión)	0.1–100 μm	Metaestable	0.007–70	Moderado de bajo a medio
Nanoemulsión	10–100 nm	Metaestable	70 – 330	Bajo a medio (<10 %)
Microemulsión	2–50 nm	Estable	130–1300	Moderadamente alto (>10–20 %)

¹ La coalescencia se produce cuando las gotas dispersas entran en contacto y se unen para formar gotas de mayor tamaño.

La estabilidad de una emulsión depende de factores múltiples, como los constituyentes que la conforman. Su estabilidad cinética es una consecuencia del tamaño de las gotas y la presencia de una película interfacial alrededor de estas, la cual es generada por agentes emulsificantes (o surfactantes), los cuales suprimen la floculación y la coalescencia de las emulsiones (Kokal, 2006; Ortega R., 2018). Entre las principales propiedades de las emulsiones que se estudian se encuentran la conductividad, la viscosidad, la dispersión y el tamaño de gota, entre otras. A continuación, se describen dichas propiedades:

Conductividad: Depende esencialmente de la naturaleza de la fase continua (o externa), puesto que se determinan las cargas eléctricas presentes en esta fase, mientras que la fase dispersa no tiene continuidad. La conductividad de una emulsión suele variar en función de la proporción volumétrica de la fase externa. La variación de la conductividad es proporcional al volumen de agua presente en emulsiones O/W y se considera nula para una emulsión W/O, puesto que la fase acuosa usualmente contiene electrolitos disueltos, ya que la conductividad del aceite suele ser 100 o 1000 veces menor que la conductividad del agua (también conocida como salmuera) (Salager, 2000).

Viscosidad: Depende de las interacciones a nivel molecular y de las propiedades físico-químicas de los fluidos que constituyen a la interfase agua-aceite. La viscosidad de la emulsión puede ser sustancialmente mayor que la viscosidad del aceite o del agua que forman a las emulsiones mostrando un comportamiento no-newtoniano² (Kokal, 2006; Salager, 2000).

² Un fluido no newtoniano es aquel fluido cuya viscosidad varía con la temperatura y el esfuerzo de corte que se le aplica. Como resultado, un fluido no newtoniano no tiene un valor de viscosidad definido ni constante.

Dispersión y tamaño de gota: La distribución del tamaño de gota de una emulsión depende de varios factores, incluyendo la tensión interfacial (TIF), la concentración de surfactante, la presencia de sólidos y las relaciones volumétricas del aceite y el agua. La Figura 2, muestra los diferentes tipos de distribución que se encuentran en las emulsiones: (Figura 2.A) unimodal, (Figura 2.B) tipo log normal producida por una agitación turbulenta homogénea; emulsiones con una distribución de tamaño angosta o muy polidispersa; (Figura 2.C) emulsiones bimodales resultantes de una mezcla de dos emulsiones, las cuales pueden formarse intencionadamente para alcanzar una baja viscosidad. La viscosidad de una emulsión es función de la forma y tamaño de gota, ya que, a medida que aumenta la polidispersidad del tamaño de gota, la viscosidad disminuye (Figura 2.E). Cuando se mezclan dos emulsiones con la misma fase interna, pero tamaños de gota muy diferentes, la distribución resultante presenta una distribución bimodal. Si las modas están lo suficientemente separadas se puede obtener una reducción considerable de la viscosidad (Figura 2.F). Lo anterior se debe a la forma en que se acomodan las gotas en el seno del fluido, esto es, las gotas más pequeñas pueden colocarse entre los intersticios de

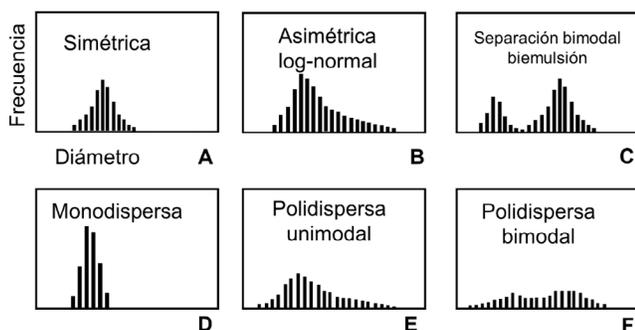


Figura 2. Distribución de diferentes formas del tamaño de gota (modificada de Ortega R., 2018)

las gotas más grandes, reduciendo así las interacciones y, por consiguiente, la viscosidad (Kokal, 2006; Ortega R., 2018).

En la industria del petróleo y el gas muchos campos de aceite se encuentran en una etapa madura y presentan problemas de producción debido a la presencia de agua; como se mencionó antes, estos problemas pueden presentarse tanto en el sistema de producción como en la superficie. Estas problemáticas también pueden presentarse en campos no convencionales, es decir, en campos productores de aceite extra-pesado³, donde la movilidad del agua es mucho mayor que la del aceite, debido a que la viscosidad de este último es significativamente mayor que la del agua, dificultando la producción del aceite. Por lo tanto, las emulsiones O/W pueden funcionar como una alternativa para el transporte de hidrocarburos en la industria petrolera, ya que el aceite se dispersa en el agua en forma de gotas produciendo una emulsión estable con viscosidad baja, mejorando la fluidez del aceite y reduciendo los tiempos de producción, manejo y acondicionamiento de hidrocarburos (Khalil de Oliveira et al., 2014; Langevin et al., 2004; Maaref & Ayatollahi, 2017; Salager, 2000; Zhou et al., 2017).

Las emulsiones de aceite se forman naturalmente cuando el aceite y la salmuera entran en contacto entre sí en presencia de un agente emulsionante o surfactante bajo algún estímulo mecánico, como la agitación. La relación agua/aceite y la presencia de surfactantes son críticas para la formación

³ Los aceites extra-pesados se caracterizan por tener una densidad relativa menor a 0.9895 ($^{\circ}\text{API} < 11.5$), su composición promedio en % mol es: $C_1 < 25$, $C_2 - C_6 < 15$ y $C_7 + > 55$, relación gas-aceite (RGA) $< 25 \text{ m}^3/\text{m}^3$ y su viscosidad es mayor a 25 cP a condiciones de yacimiento (Reyes Ruiz et al., 2017).

de una emulsión. Durante la producción de petróleo crudo hay varias fuentes de mezcla, a las que a menudo se hace referencia al cizallamiento, incluido el flujo a través de la roca del yacimiento, la perforación en fondo de pozo, bombas, el flujo a través de tuberías y cabezales de producción, válvulas, estranguladores, entre otros (Kokal, 2006). En la **Tabla 2** se muestran algunas aplicaciones para diferentes tipos de emulsiones de acuerdo con su tamaño de gota. (Montaño Salazar, 2021).

Tabla 2. Aplicaciones de emulsiones en la industria petrolera y otras industrias (L. Schramm, 2006; Lárez Velásquez et al., 2015; McClements, 2011)

Tipo de emulsión	Radio	Aplicaciones en la industria petrolera	Otras aplicaciones
Emulsión (macroemulsión)	0.1–100 μm	Se usan a nivel yacimiento para bloquear o desviar el control de la movilidad de los fluidos (inyección de vapor).	Pavimentación, alimentos (estabilización de lípidos).
Nanoemulsión	10 – 100 nm	Control de movilidad y alteración de la mojabilidad de la roca o medio poroso.	Alimentos, cosméticos, industria farmacéutica.
Microemulsión	2 – 50 nm	EOR, limpieza de pozos productores, limpieza de la zona productora.	Aceite metalúrgico, detergentes, textiles y papel.

El estudio de la relación de la estructura de las gotas y las propiedades de las emulsiones es crucial para entender su comportamiento y el desarrollo de sistemas más eficientes con propiedades mejoradas. Sin embargo, la evaluación de estos sistemas es bastante compleja, ya que durante la experimentación para la formación de emulsiones, la modificación de parámetros es fundamental para cubrir la mayor cantidad de variables. Lo anterior puede implicar la obtención de numerosos resultados experimentales que demandan un análisis detallado, lo que a su vez exige tiempo y una buena organización.

Para abordar esta complejidad se desarrolló la herramienta ROJA_LIRFFF, que emplea la aplicación de la inteligencia artificial con el propósito de adquirir, analizar, integrar,

modelar, visualizar e interactuar con los resultados experimentales provenientes de 145 microfotografías, correspondientes a 18 emulsiones, las cuales fueron monitoreadas durante aproximadamente 30 días. Esta metodología facilitó un análisis más profundo de los datos y su transformación, almacenamiento y procesamiento mediante el uso de la biblioteca *skimage*. Además, se implementó inteligencia artificial con el fin de diseñar y evaluar patrones que permitieran identificar tendencias significativas en los resultados obtenidos.

La IA es una técnica que permite imitar el comportamiento humano (Marr 2018). La velocidad de cómputo, la capacidad de almacenamiento, la confiabilidad y la interconectividad de las computadoras que, combinadas con los patrones de razonamiento humano, brindan a la IA la capacidad de resolver problemas complejos y de gran escala, como muchos problemas en la vida cotidiana. Hasta ahora, las tecnologías de IA se han aplicado en el reconocimiento de patrones de imágenes con éxito (Unnikrishnan et al. 2021, Morishima y Nakano 2010). Otros ámbitos en los que las IA también se utilizan ampliamente son en la fabricación, desarrollo y producción, debido a su capacidad para simular, optimizar y automatizar procesos complejos (Li et al. 2017, Arinez et al. 2020). Sin embargo, existen diferencias fundamentales en las aplicaciones de las tecnologías de IA en estos dos campos. En primer lugar, el resultado de una aplicación de tecnología de IA en la fabricación puede llevarse a cabo sin intervención humana directa y tienen por objetivo la optimización del rendimiento. Por el contrario, el resultado de una aplicación de tecnología de IA para el reconocimiento de patrones requiere la

aprobación humana y su objetivo es alcanzar un rendimiento aceptable de identificación de elementos.

Python es uno de los lenguajes de programación más utilizados en el campo de la IA, debido a su facilidad de uso y su amplia gama de bibliotecas. Python es un lenguaje de programación de código abierto que se distribuye bajo la Licencia Python de Código Abierto (Python Software Foundation License), lo cual ha contribuido a su crecimiento y popularidad, debido a que la comunidad activa ha creado una gran cantidad de bibliotecas y marcos de trabajo que complementan y amplían las capacidades de Python en diversas áreas (Anaconda Software Distribution 2020). Python destaca por su sintaxis clara y legible, ya que, al ser de código abierto, tiene una biblioteca estándar amplia con módulos y paquetes para una gama de tareas muy variada, lo que facilita el desarrollo de diversas aplicaciones.

Actualmente, existe software de procesamiento de imágenes de código abierto como ImageJ, el cual es una plataforma de análisis de imágenes y se utiliza ampliamente para el procesamiento de estas; sin embargo, presenta limitaciones para el manejo de condiciones de ruido. En este trabajo se ha explorado la aplicación de IA por medio de Python como medio de solución al procesamiento de imágenes y se hace una comparación con ImageJ. Por ejemplo, algunas ventajas que ofrece Python respecto a ImageJ son:

Python no solo se limita al procesamiento de imágenes, sino que ofrece herramientas estadísticas, de ciencia de datos e inteligencia artificial.

- Python cuenta con una gama amplia de bibliotecas para el procesamiento de imágenes, como OpenCV y scikit-image, que

brindan flexibilidad y funcionalidad para la manipulación y análisis de imágenes.

- Python permite el desarrollo eficiente de tareas complejas que requieren el uso de algoritmos específicos.

En este sentido, el reconocimiento de patrones de imágenes mediante inteligencia artificial (IA) puede auxiliar en la evaluación de la uniformidad y estabilidad de las gotas de emulsiones. La herramienta ROJA_LIRFFF permite la cuantificación y la valoración automatizada de las gotas, favoreciendo el análisis de la distribución de tamaño de estas, debido a que el conteo y medición de las gotas puede ser una actividad larga y tediosa, o bien, los programas disponibles no reconocen las gotas de forma clara por diferentes factores como la resolución de la imagen, la interferencia de otros objetos, sólidos suspendidos, una morfología distinta, entre otros. ROJA_LIRFFF aprovecha librerías libres de Python para el tratamiento de imágenes, las cuales generan una máscara sobre la cual (por medio de filtros) es posible identificar objetos más allá de la presencia de las impurezas suspendidas en la imagen, una vez identificadas las imágenes es posible cuantificar su extensión en píxeles y relacionar esta estimación con un tamaño de objeto.

Sección experimental

Preparación y caracterización de emulsiones
Se elaboraron 18 emulsiones, la relación aceite-agua empleada para preparar las emulsiones fue: 70 % aceite ($\rho=0.918$ g/mL, $\mu=72.7$ cP) y 30 % agua (salmueras), el volumen total fue de 100 mL. Las salmueras se prepararon con CaCl_2 y MgCl_2 a concentraciones desde 1000 a 25 000 ppm. El surfactante usado es de tipo aniónico ($\rho=0.923$ g/mL), la concentración de surfactante (H) osciló entre 0.5 % y 5 % v/v. Para conocer el tipo de

emulsión se utilizó la prueba de la gota, colocando agua destilada y se agregó una gota de emulsión, si esta se disuelve, se deduce que se trata de una emulsión O/W, en caso contrario, si la gota permanece suspendida en el agua, se tiene una emulsión W/O. Se monitoreó la estabilidad de las emulsiones por medio de la prueba de la botella por más de 30 días, las cuales comenzaron a separarse desde el día 7.

Los fluidos se mezclaron con un homogeneizador (IKA) a 700 rpm por 15 minutos. Al término de la agitación (día 0) se determinó la viscosidad, el tipo de emulsión y el tamaño de gota. Las emulsiones se observaron durante 7 días para determinar su estabilidad por el método de la botella. Pasado este tiempo, se obtiene nuevamente la viscosidad, tipo de emulsión y tamaño de gota con el microscopio. Una vez que se adquieren los resultados para los días 0 y 7, se determinó la distribución del tamaño de gota y se compararon los resultados de la viscosidad y el tamaño de gota. La medición de la viscosidad se realiza con el viscosímetro DVNext Brookfield, el cual se programó para realizar las mediciones a 30, 60, 120, 240 y 250 revoluciones por minuto (rpm) durante 20 segundos para cada rapidez de corte.

Para medir el tamaño de gota se coloca una alícuota de la emulsión sobre un portaobjetos y se coloca un cubreobjetos, se utilizó el microscopio OMAX para capturar micrografías de las gotas de las emulsiones elaboradas. Se tomaron micrografías con un aumento de 10x (0.25). Después, de forma paralela se obtuvo el tamaño de las gotas con la aplicación ImageJ⁴ y ROJA-LIRFFF

para realizar una comparación. A continuación, se describe el procesamiento de las imágenes con la herramienta desarrollada.

Desarrollo de herramienta ROJA_LIRFFF

Se utilizó Python 3.7 y los paquetes cv2, numpy, matplotlib, imageio, statistics, pandas, math, ipyml, skimage, random y glob (Figura 3). En conjunto, estas bibliotecas proporcionan una suite completa para el análisis avanzado de imágenes y datos. Las bibliotecas importadas en el fragmento de código mostrado en la Figura 3 tienen diferentes propósitos y funciones para el procesamiento, análisis de imágenes y datos en Python dentro del contexto de uso en ROJA_LIRFFF. Por ejemplo, %matplotlib widget permite la visualización interactiva de gráficos en Jupyter Notebooks. El comando `ii.imread` se utiliza para la carga de las imágenes; cv2 (OpenCV) para la visión por computadora y el procesamiento de imágenes. Cuando se adjunta la imagen, esta se carga como un arreglo, que en escala de grises toma valores entre 0 (negro) y 255 (blanco) por lo que se ocupa numpy para la manipulación de matrices; matplotlib.pyplot facilita la visualización de las imágenes. imageio.v3 se usa para leer y escribir los archivos de las imágenes; statistics proporciona funciones estadísticas básicas usadas en los análisis estadísticos de los píxeles y objetos en las imágenes. Pandas se aplica para el análisis y manipulación de datos estructurados que es donde se vacía la información estadística y después se escribe en un archivo de salida excel. Para medir el área de las gotas se usaron (de la biblioteca math) las funciones de `raw`, `pow` y `pi`; ipyml se usó para la integración de Matplotlib con widgets interactivos en Jupyter. Las bibliotecas skimage y sus sub-

⁴ En el siguiente enlace se puede descargar la aplicación <https://imagej.net/ij/download.html>

módulos (color, transform, util, draw, filters, measure) ofrecen diversas funciones para el procesamiento y análisis de imágenes. Por ejemplo, por medio del comando `skimage.measure.label` se aplica morfometría a la máscara de la imagen para contar el número de objetos en una imagen y con `skimage.measure.regionprops` se analiza el tamaño en pixeles de los objetos en la imagen. Finalmente, `glob` se usó para buscar archivos o directorios que coincidieran con un patrón específico, de esa manera se hacía la carga de las micrografías de las emulsiones.

```

▶ %matplotlib widget
import cv2
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import imageio.v3 as iio
import statistics as st
import pandas as pd
import math as mt
import ipyml
import skimage
import skimage.color
import skimage.transform
import skimage.util
import skimage.draw
import skimage.filters
import skimage.measure
import random
import glob

[ ] def Gotas(archivo, factor):

```

Figura 3. Detalle de las paqueterías utilizadas para el desarrollo de ROJA_LIRFFF

El programa ROJA_LIRFFF está diseñado para identificar gotas en imágenes mediante una serie de módulos y filtros especializados. En la Figura 4 se muestra un ejemplo del proceso de identificación de gotas. En la

Figura 4.A se exhibe la visualización y carga de la imagen a trabajar, en la Figura 4.B se observa la imagen en escala de grises y además se pasa por un filtro de suavizado gaussiano de `skimage` para reducir el ruido en la imagen, lo que ayuda a mejorar la segmentación posterior. En la Figura 4.C se presenta cómo queda la primera máscara de objetos identificados en la imagen y un método de umbralización (`skimage.filters.threshold`) para convertir la imagen en una imagen binaria, donde los objetos de interés están en primer plano (generalmente blanco) y el fondo está en segundo plano (generalmente negro), también se realiza una primera estadística de los objetos que conforman la imagen, que en este primer paso incluyen ruido. Posteriormente, se realiza una umbralización estadística de tamaños de objetos, además se aplica un filtro de visión artificial de `skimage` llamado `filters` para resaltar los bordes de objetos característicos y se usa la función `skimage.measure.find_contours` para detectar y extraer los contornos de los objetos en la

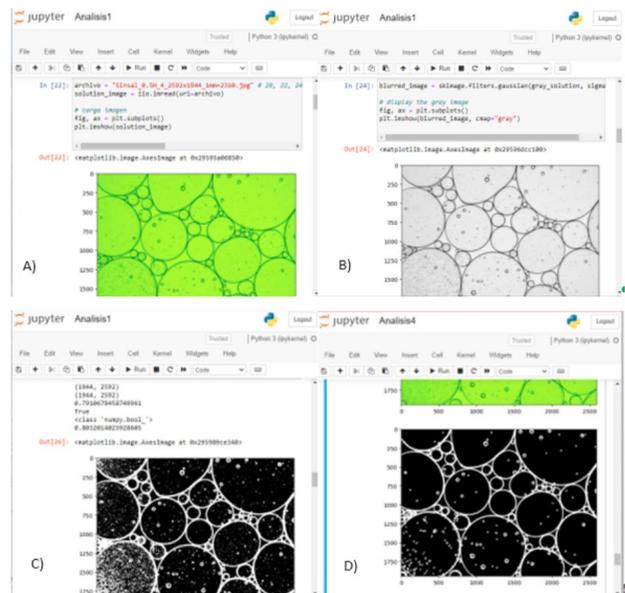


Figura 4. Aplicación de los filtros A a D para el conteo de gotas en ROJA_LIRFFF

imagen, ver **Figura 4.D**. A continuación, se enlistan los objetos (gotas) y se realiza el conteo y estadística sobre estos.

Resultados

A continuación, se presentan los resultados obtenidos para las emulsiones O/W obtenidas con salmueras $MgCl_2$ desde 1000 a 15 000 ppm y la emulsión W/O obtenida con salmuera $MgCl_2$ de 25 000 ppm y una concentración de surfactante (H) de 0.5% v/v. Las **Figuras 5 a 7 y 10** exhiben los resultados de viscosidad, tamaño y la distribución del tamaño de gota para los días 0 y 7 a salinidad variable. De forma general se observa que la viscosidad (106.40 cP) de la emulsión preparada con la salmuera de 1000 ppm no cambia significativamente con respecto al tiempo (día 7; 116.90 cP). Además, el tamaño de gota tiende a ser menor a salinidad baja (1000 ppm) y aumenta con el incremento de salinidad (25 000 ppm), ver **Figura 6**.

En la **Figura 5** se muestra la tendencia de la viscosidad con respecto al cambio de salinidad para las emulsiones preparadas con salmuera de $MgCl_2$ al día 0, la línea negra punteada muestra la viscosidad del aceite de partida (72.7 cP; 250 rpm) como punto de referencia para el resto de las

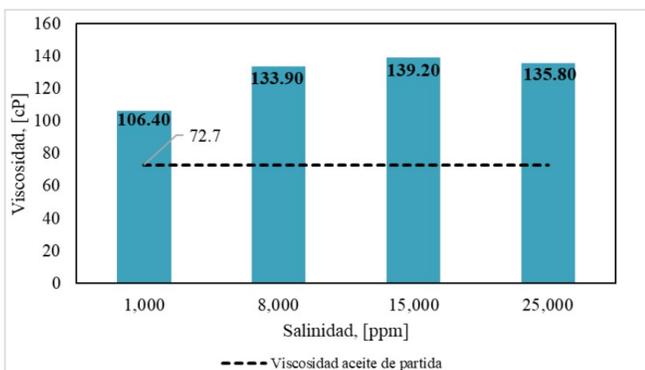


Figura 5. Emulsiones preparadas con salmuera de $MgCl_2$ al día 0, comparación entre la viscosidad a diferentes salinidades

viscosidades de las emulsiones. Se observa que la viscosidad de las emulsiones preparadas es mayor que la del aceite de partida, independientemente de la salinidad.

En la **Figura 6**, de igual forma, se muestra la tendencia de la viscosidad respecto a la salinidad de las emulsiones preparadas con salmuera de cloruro de magnesio para el día 7. Se puede observar que la viscosidad fue mayor a la del aceite de partida (72.7 cP; 250 rpm) e incluso es mayor que en el día 0, esto puede deberse a que la emulsión se volvió más estable.

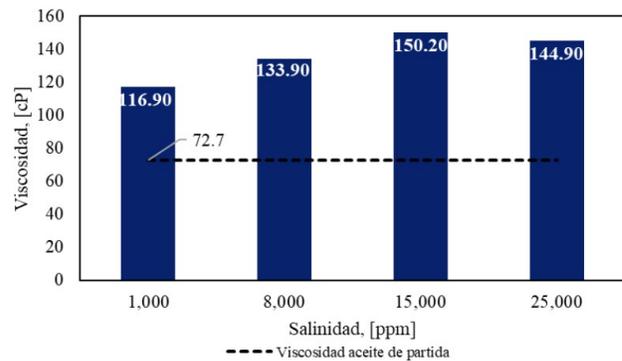


Figura 6. Emulsiones preparadas con salmuera de $MgCl_2$ al día 7, comparación entre la viscosidad y el tamaño de gota a diferentes salinidades

Todas las emulsiones resultaron ser estables al término del monitoreo (21 días y no se observó la ruptura de estas por el método de la botella.); presentando un aumento de la viscosidad con respecto al tiempo. Dicha estabilidad podría asociarse con la reducción del tamaño de gota, como se observa en la **Figura 7**, donde se muestra la tendencia que existe entre el tamaño de gota y la salinidad. Para el día 0 se observó que, al incrementar la salinidad, aumenta el tamaño de gota, también se observan los tamaños de gota más grandes (1000 ppm con 17.26 μm) a 25 000 ppm con 96.22 μm], lo cual puede asociarse a que las emulsiones no se habían estabilizado. Para el día

7 se observó que el tamaño de gota de las emulsiones disminuyó para los sistemas preparados con salmueras de 8 000 ($r=17.89$ [μm]) a 25 000 ppm ($r=39.03$ [μm]), lo cual puede asociarse con una mayor estabilidad para las emulsiones. Cabe mencionar que para la emulsión de 1000 ppm hubo un aumento de tamaño de gota del día 0 de 17.26 [μm] al día 7 con 17.89 [μm], y aunque es muy pequeño, sugiere que la estabilidad de este sistema no se ve afectada.

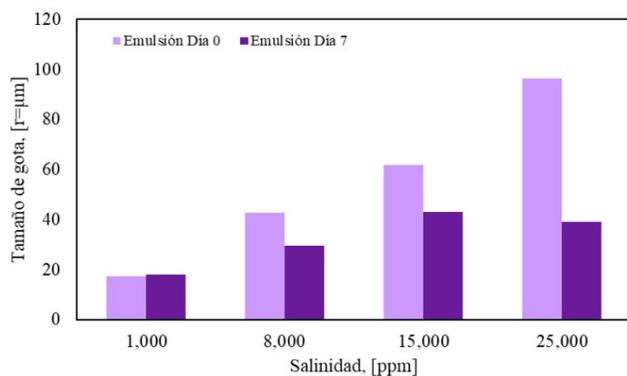


Figura 7. Tamaño de gota contra salinidad para 0 y 7 días para emulsiones elaboradas con salmueras de cloruro de magnesio (MgCl_2)

La determinación del tamaño de gota se realizó con la herramienta ROJA_LIRFFF y se utilizó el programa ImageJ, de licencia libre (utilizado en diferentes áreas como la medicina, biología y ciencia de los materiales), para comparar los resultados. A continuación, se describe con un ejemplo lo obtenido mediante ambos programas. A pesar de que ImageJ da opciones para manipular la imagen y optimizar el conteo de las gotas, el programa no reconoce muchas de las gotas, pero sí identifica espacios entre las gotas y partículas suspendidas, ver Figura 8. En un gran número de los casos se debe realizar la selección manual de las gotas; también, hay que remover manualmente huecos y materia suspendida. Finalmente, ImageJ arroja una tabla, con todas las “gotas” y el área de cada gota (Tabla 3).

Para el sistema O/W con una relación 30% agua y 70% aceite con agua destilada y una concentración de surfactante del 0.5% H, se identificaron con ImageJ 251 objetos para una sola micrografía; sin embargo, a simple vista se observa que al menos 20 gotas no fueron reconocidas y por consecuencia tampoco fueron contadas y también se puede observar que sí reconoció objetos que no son gotas y fueron contabilizados como tal, y aunque bien el programa realiza un conteo automático, este no es del todo correcto, ya que no reconoce todas las gotas y cuenta impurezas. Por lo tanto, se llevó a cabo de manera manual la depuración de las gotas y el tiempo de selección, limpieza y conteo de las gotas para esta imagen fue de 1 hora, ver Figura 8.

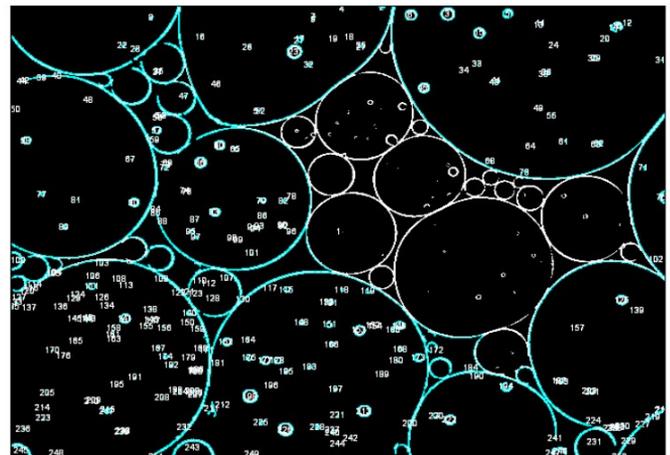


Figura 8. Máscara obtenida mediante ImageJ para el conteo de gotas. Las etiquetas con numeración representan todos los objetos identificados por ImageJ, incluyendo gotas, partículas suspendidas y espacios entre gotas. En este caso se identificaron 251 objetos

Ahora bien, empleando el programa ROJA_LIRFFF, se puede ver en la Figura 9 que la máscara generada es mucho más limpia y se reconocen todas las gotas sin seleccionar a las impurezas. Para la misma imagen se identificaron 123 gotas. Además de que el programa desarrollado genera una imagen de mejor calidad, realiza el conteo auto-

Tabla 3. Ejemplo de tabla con datos que genera ImageJ del conteo de gotas y su tamaño

	Label	Área	Mean	StdDev	Mi n	Ma x
24 4	Sinsal_0.5H_4_2592x1944_1mm=2310-1.jpg	1.124E-06	255.00 0	0.000	255	255
24 5	Sinsal_0.5H_4_2592x1944_1mm=2310-1.jpg	1.518E-04	255.00 0	0.000	255	255
24 6	Sinsal_0.5H_4_2592x1944_1mm=2310-1.jpg	6.953E-05	255.00 0	0.000	255	255
24 7	Sinsal_0.5H_4_2592x1944_1mm=2310-1.jpg	5.922E-05	255.00 0	0.000	255	255
24 8	Sinsal_0.5H_4_2592x1944_1mm=2310-1.jpg	1.874E-07	255.00 0	0.000	255	255
24 9	Sinsal_0.5H_4_2592x1944_1mm=2310-1.jpg	7.496E-07	255.00 0	0.000	255	255
25 0	Sinsal_0.5H_4_2592x1944_1mm=2310-1.jpg	5.622E-07	255.00 0	0.000	255	255
25 1	Sinsal_0.5H_4_2592x1944_1mm=2310-1.jpg	3.748E-06	255.00 0	0.000	255	255

máticamente y obtiene el tamaño y radio de las gotas. También arroja una tabla de resultados con la media, mediana, moda y desviación estándar, para las gotas en un archivo Excel, dichos resultados se pueden exportar a otro programa para manipulación posterior de los datos, ver **Tabla 4**. El tiempo de la identificación de las gotas y la obtención de la tabla con datos fue de 5 a 10 minutos. El tiempo total de tratamiento con esta herramienta nueva depende de cuántas imágenes se analizan al mismo tiempo y de la velocidad de la computadora con la que se trabaje.

ROJA_LIRFFF posee una arquitectura programática, basada en skimage, que permite una personalización y adaptación significativas en comparación con ImageJ. Esta flexibilidad inherente le brinda a ROJA_LIRFFF la capacidad de incorporar algoritmos de procesamiento de imágenes y filtros optimizados para la detección y diferenciación precisa de espacios y partículas suspendidas en emulsiones, proporcionando así una mayor precisión y eficiencia en estas tareas específicas. Sin embargo, una de las limitaciones notables de la herramienta ROJA_LIRFFF, desarrollada en Python utilizando la biblioteca skimage, es la ausencia de una función para la selección manual de datos.

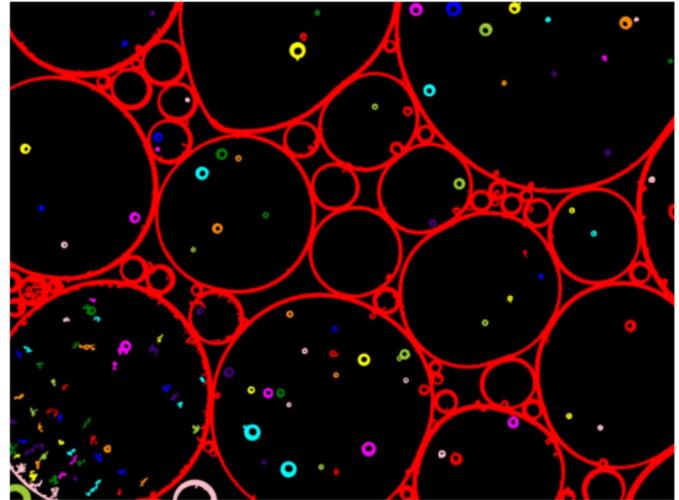


Figura 9. Máscara de ROJA_LIRFFF, donde los elementos marcados en color rojo corresponden a las gotas de interés y el resto de los colores identifican gotas de menor tamaño. El espectro de colores solo se utiliza para marcar a los objetos identificados en la imagen, sin relación con un espectro

Tabla 4. Datos de ROJA_LIRFFF del conteo de gotas y su tamaño

nombre_image n	Sinsal_0.5H_4_2592x1944_1mm=2310.jp g
got no	123
got min	0.00407226
got max	3.840338786
got mean	0.039007781
got median	0.005390617
got mode	0.004138178
got_std	46995.64851

En la **Figura 10** se presentan los histogramas obtenidos a partir de la información arrojada por ROJA_LIRFFF, la cual incluye la distribución del tamaño de las gotas para las emulsiones de 1000 y 25 000 ppm a los 0 y 7 días. Se observa que el tamaño de las gotas tiende preferentemente hacia el lado izquierdo, lo cual indica que el tamaño de gota es pequeño y que las emulsiones son estables en ese intervalo de tiempo y sin importar la salinidad, también se nota que la distribución del tamaño es asimétrica, debido a que las emulsiones se formaron por una agitación turbulenta homogénea.

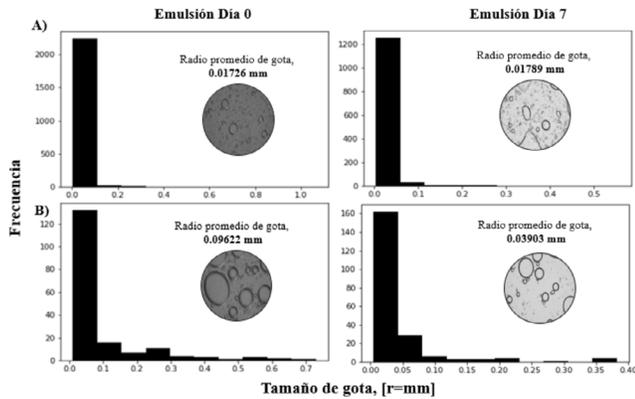


Figura 10. Distribución del tamaño de gota (respecto a su radio) de las emulsiones presentadas corresponden a con corte 70 % aceite y 30 % de agua A) 1000 ppm es una emulsión de O/W y B) 25 000 ppm es una emulsión de W/O.

Por el tamaño de gota obtenido para todas las emulsiones analizadas. Estas se clasifican como macroemulsiones, las cuales podrían servir a nivel yacimiento para bloquear, desviar o mejorar el control de la movilidad de los fluidos (inyección de vapor), pero no para transportar hidrocarburos, ya que su viscosidad es mayor a la del aceite de partida, ver **Tabla 2**. (L. Schramm, 2006; Lárez Velásquez et al., 2015, McClements, 2011). Las emulsiones preparadas con salmueras de 1000 a 15 000 ppm resultaron ser de tipo O/W y para 25 000 ppm es de tipo W/O. El tipo de emulsión no parece tener implicaciones importantes en la viscosidad de las emulsiones, ya que para 15 000 ppm presenta una viscosidad de 139.20 [cP] y para 25 000 ppm se redujo la viscosidad a 135.80 [cP]. Para el día 7, las gotas de las emulsiones preparadas con salmueras de 1000 a 15 000 ppm incrementaron. Sin embargo, para 25 000 ppm la viscosidad disminuye (144.90 [cP]) en comparación con la emulsión de 15 000 ppm. (150.20 [cP])

Conclusiones

El tamaño de gota puede relacionarse con la viscosidad y estabilidad de las emulsiones, en este caso particular se identificó

que para las emulsiones preparadas con salmuera de cloruro de magnesio y 0.5 % v/v de surfactante H el tamaño de gota está relacionado con la salinidad; es decir, con el aumento de la salinidad incrementa el tamaño de gota. En cuanto a la viscosidad, todas las emulsiones presentan un aumento de la viscosidad con el tiempo, esto podría asociarse a la reducción del tamaño de gota del día 0 al día 7 y lo que favorece la estabilidad de las emulsiones. Para el día 0 se observan los tamaños de gota más grandes (1000 ppm con 17.26 [μm] a 25 000 ppm con 96.22 [μm]), lo que indica menor estabilidad para las emulsiones recién elaboradas. Para el día 7 el tamaño de gota de las emulsiones disminuyó con el aumento de la salinidad para 8 000 (r=17.89 [μm]) a 25 000 ppm (r=39.03 [μm]), lo cual se asocia con una mayor estabilidad para las emulsiones. El cambio del tamaño de gota impactó más en la viscosidad de las emulsiones elaboradas con salmuera de 15 000 y 25 000 ppm, ya que al reducir el tamaño de gota la viscosidad incrementó 11 cP aproximadamente.

Al analizar el tamaño de gota de las emulsiones, el radio oscila entre 17.3 y 96.2 [μm], por lo que pueden clasificarse como macroemulsiones. De acuerdo con las aplicaciones descritas en la literatura, este tipo de emulsiones pueden aplicarse a nivel de yacimiento para bloquear y desviar la movilidad de fluidos. El estudio de emulsiones a nivel de laboratorio suele generar una gran cantidad de datos y su organización y análisis no es una tarea sencilla, por lo que es necesario el empleo de herramientas y programas que faciliten el tratamiento de los datos y la toma de decisiones. En este caso, la herramienta ROJA_LIRFFF desarrollada para la caracterización de las gotas y

su análisis estadístico resultó ser una opción sobresaliente para realizar el conteo y distribución del tamaño de las gotas. Una de las ventajas más notables es que no solo se requiere de menos tiempo computacional, sino que también produce resultados más precisos y limpios. Esta herramienta proporciona información estadística instantánea sobre las emulsiones analizadas, la cual puede exportarse a otros programas para un procesamiento posterior. En contraste, ImageJ puede demandar más tiempo debido a la necesidad de ajustes manuales en la selección de datos para cada imagen procesada.

Un área de mejora para la herramienta ROJA_LIRFFF radica en la optimización y eficiencia de su proceso de segmentación y análisis de imágenes. Aunque el programa ya posee una serie de módulos y filtros que facilitan la identificación de objetos, hay margen para perfeccionar la precisión y robustez de la detección, especialmente en escenarios donde existen condiciones de iluminación variables o cuando las imágenes presentan niveles elevados de ruido. Además, considerando la evolución constante de las técnicas de visión artificial y aprendizaje automático, ROJA_LIRFFF podría beneficiarse de la integración de algoritmos más avanzados y entrenados específicamente para la detección y caracterización de gotas en emulsiones, con el fin de proporcionar resultados aún más precisos y consistentes en su análisis.

Agradecimientos

R. M. Mariscal Romero reconoce el apoyo de CONAHCYT por la beca postdoctoral recibida a través del Programa de Estancias Postdoctorales por México 2022. Los auto-

res agradecen al proyecto PAPIIT IA102919 y al proyecto PAPIIT IA105621 por el financiamiento otorgado.

Referencias

- Anaconda Software Distribution. (2020). Anaconda Documentation. Anaconda Inc. Retrieved from <https://docs.anaconda.com/>
- Arinez, J. F., Chang, Q., Gao, R. X., Xu, C., & Zhang, J. (2020). Artificial intelligence in advanced manufacturing: Current status and future outlook. *Journal of Manufacturing Science and Engineering*, 142(11), 110804. <https://doi.org/10.1115/1.4047855>
- Fullerton Cook, E., & W. Martin, E. (1953). *Farmacia Práctica de Remington*.
- ImageJ, ImageJ: Image Processing and Analysis in Java Reference, <https://imagej.net/ij/index.html>
- Khalil de Oliveira, M. C., Teixeira, A., Couto Vieira, L., & Da Fonseca Junior, R. (2014). Flow assurance challenges for long subsea pipelines. 2–11. <https://doi.org/10.13140/2.1.4090.1445>
- Kokal, S. L. (2006). Chapter 12 Crude Oil Emulsions. In *Petroleum Engineering handbook* (pp. 533–569).
- L. Schramm, L. (2006). Emulsions, Foams, and Suspensions: Fundamentals and Applications. In *Emulsions, Foams, and Suspensions: Fundamentals and Applications*. <https://doi.org/10.1002/3527606750>
- Langevin, D., Poteau, S., Hénaut, I., & Argillier, J. F. (2004). Crude oil emulsion properties and their application to heavy oil transportation. *Oil and Gas Science and Technology*, 59(5), 511–521. <https://doi.org/10.2516/ogst:2004036>
- Lárez Velásquez, C., López González, F., & Koteich Khatib, S. (2015). Nanopartículas: fundamentos y aplicaciones (C. Lárez, F. López, & S. Koteich, Eds.; Issue Octubre 2015). https://www.researchgate.net/profile/Cristobal-Larez-Velasquez/publication/285356585_Nanopartículas_fundamentos_y_aplicaciones/links/5fd22371299bf188d4085adc/Nanopartículas-fundamentos-y-aplicaciones.pdf#page=167
- Li, B. H., Hou, B. C., Yu, W. T., Lu, X. B., & Yang, C. W. (2017). Applications of artificial intelligence in intelligent manufacturing: a review. *Frontiers of Information Technology & Electronic Engineering*, 18, 86–96. <https://doi.org/10.1631/FITEE.1601885>
- Maaref, S., & Ayatollahi, S. (2017). The effect of brine salinity on water-in-oil emulsion stability through droplet size distribution analysis: A case study. *Journal of Dispersion Science and Technology*, 2–39. <https://doi.org/10.1080/01932691.2017.1386569>
- Marr, B. (2018). What is artificial intelligence and how will it change our world. <https://www.bernardmarr.com/default.asp?contentID=963>
- McClements, D. J. (2011). Edible nanoemulsions: Fabrication, properties, and functional performance. *The Royal Society of Chemistry*, 7(6), 2297–2316. <https://doi.org/10.1039/c0sm00549e>

- Montaño Salazar, J. (2021). Implicaciones de los iones calcio y magnesio en las propiedades reológicas de emulsiones para transporte del hidrocarburo. [Universidad Nacional Autónoma de México]. <https://doi.org/10.26226/morressier.5f6c5f439b74b699bf390ad9>
- Morishima, K., & Nakano, T. (2010). Development of a new automatic nuclear emulsion scanning system, S-UTS, with continuous 3D tomographic image read-out. *Journal of Instrumentation*, 5(04), P04011. <https://doi.org/10.1088/1748-0221/5/04/P04011>
- Ortega R., J. D. (2018). Formulación de emulsiones de crudo con potencial aplicación como método de control de agua en pozos con problemas de conificación. Universidad Central de Venezuela.
- Python Software Foundation. Python Language Reference, version 3.7. Available at <http://www.python.org>
- Reyes Ruiz, M. G., León García, A., & López Bautista, G. (2017). Nueva clasificación para yacimientos de aceites pesados y extrapesados de México. 57(6), 421–436.
- Salager, J.-L. (2000). Emulsion Properties and Related Know-how to Attain Them (pp. 73–125). <https://doi.org/10.1201/b14005-4>
- Sanz Olmos, S. (2017). Emulsiones (Issue I, pp. 1–9). <https://botplusweb.portalfarma.com/documentos/2017/4/11/114468.pdf>
- Unnikrishnan, S., Donovan, J., Macpherson, R., & Tormey, D. (2021). In-process analysis of pharmaceutical emulsions using computer vision and artificial intelligence. *Chemical Engineering Research and Design*, 166, 281-294. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2020.12.010>
- Zhou, H., Luo, Q., Gong, Q. T., Liu, Z. Y., Liu, M., Zhang, L., Zhang, L., & Zhao, S. (2017). Interfacial dilational properties of di-substituted alkyl benzene sulfonates at kerosene/water and crude oil/water interfaces. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 520, 561–569. <https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2017.02.011>

La vitalidad como un fluido

Linette de la Paz Vega

Facultad de Química, UNAM. Circuito escolar S/N, Ciudad Universitaria, Coyoacán, CDMX

04510 México

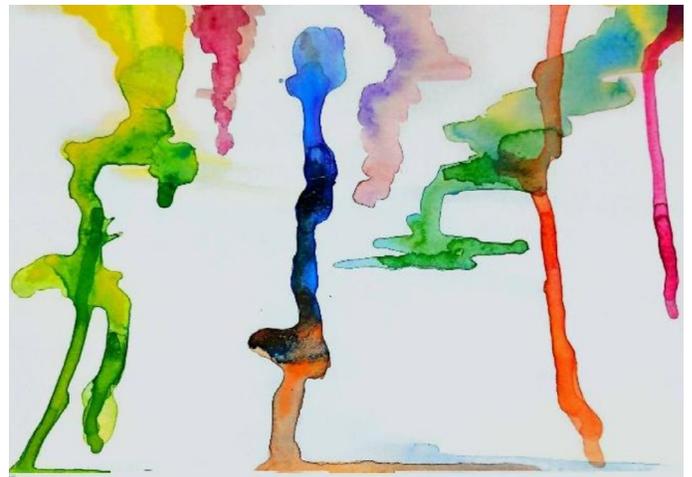
linettedelapaz@gmail.com

*Se me escapa la vida
No es flujo turbulento, incluso parece
que avanza lento
A tal ritmo que por un instante siento
que puedo detenerla a contento
Corre viscosa como la miel, dejando
un rastro pegajoso de lo que fue
Bien mirada, resulta tesoro escondido
Dulzura desbordante
Placeres mortales
Contenerla con aliento
Es un sinsentido esperpento
La mecánica de su flujo puede ser
estudiada,
A veces retrasada o acelerada
Sin embargo, es finita e irrefrenable
La reología de la vida es la más compleja
que la humanidad se ha dado
la tarea de estudiar.*

“No se puede entrar dos veces en el mismo río” fue una frase célebre del filósofo Heráclito [1], quien retrataba con ella la idea de que la vida es un flujo constante que siempre está cambiando, paralelismo con el río, cuyas aguas jamás serán las mismas como consecuencia de su propio flujo. Si nos sumergiéramos en un río en dos periodos distintos, nada sería lo mismo. Cambiarían sus aguas, sus lodos y su fauna, de la mis-

ma forma en la que dos instantes de la vida nunca serán iguales —incluso siendo la misma persona, haciendo la misma acción en el mismo lugar— por la naturaleza del flujo del tiempo y de la vida misma.

La reología estudia la continuidad y deformación de cuerpos aparentemente continuos y coherentes. Clásicamente, es una herramienta esencial para el estudio de los fluidos con sus diversas clasificaciones (según compresibilidad, complejidad, viscosidad, etc.). Un fluido se define como una sustancia que se deforma continuamente —fluye— bajo la fuerza de una tensión tangencial, por ejemplo, principalmente (no únicamente) un líquido o un gas.



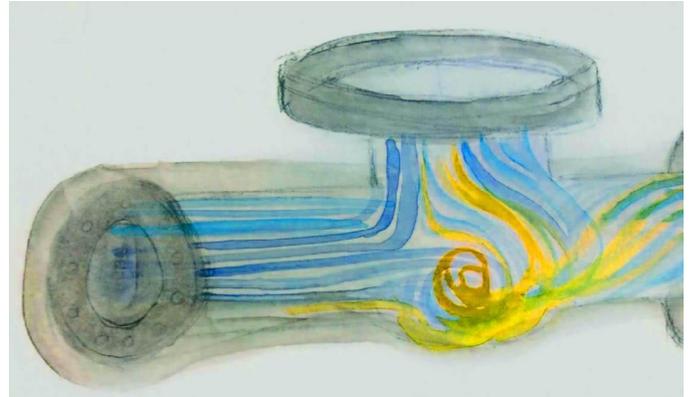
El comportamiento reológico de los materiales nos regala información sobre su estructura y control de procesos mediante relaciones matemáticas. Se vuelve una obviedad que esta característica pertenezca a materiales físicos, por lo que su aplicación en algo tan abstracto como la vida tiene un carácter más bien metafórico, sin embargo, nos funciona para rescatar algunas cualidades de esta propiedad y aprender de ellas.

¿Qué querrá decir que la vida sea (o no) un flujo turbulento? Los flujos pueden ser de tipo laminar o turbulento, siendo el primero de carácter regular, con partículas de trayectoria uniforme y predecible que avanzan a baja velocidad. Por otro lado, el segundo tiende a la irregularidad y el caos, los fluidos se mezclan y las partículas avanzan a alta velocidad. Regresando a la analogía, la vida seguiría la continuidad y estabilidad del tiempo mismo y aunque a primera instancia pudiese parecer caótica, realmente tiene un carácter regular con etapas básicas constantes y uniformes.



Por otro lado, los fluidos, al contrario de la vida, sí pueden ser contenidos y algunos de ellos incluso compresibles. Una característica esencial de los fluidos es su capacidad de adaptarse a la forma del recipiente que los contenga, y en el caso de los gases, incluso

a su volumen. Cuál es la forma óptima de contener y transportar a un fluido dependerá del mismo.



Cuando un fluido se encuentra en movimiento presenta cierta resistencia al mismo, y a dicha resistencia le llamamos viscosidad. Un fluido con alta resistencia tendrá entonces una alta viscosidad y lo podemos imaginar perfectamente con el ejemplo de la miel que nos da el poema. Comparemos, por ejemplo, qué tan rápido escurre la miel contra qué tan rápido podemos verter el agua. Estos dos fluidos son una comparación casi ideal para el tema, por su cualidad de fluidos



Newtonianos (es decir, cumplen con la ley de Newton, que relaciona el esfuerzo de corte que hay que realizar y la velocidad de corte del fluido). De la ley de Newton podemos extraer que la viscosidad en estos fluidos es constante e independiente de la velocidad del fluido.

Para los ansiosos y nostálgicos como yo —con tendencia

a obsesionarse con el pasado o el futuro—, el tener a la vitalidad “bajo control” resulta sumamente atractivo. No es por nada que, desde hace siglos, nos apasionan las incógnitas que yacen en ella. ¿De dónde viene la vida? ¿Cómo crearla, qué la destruye? ¿Es posible la vida eterna? Preguntas que han despertado la curiosidad científica dando lugar a sinfín de investigaciones a lo largo de los siglos.

Cómo quisiéramos los científicos y soñadores que este complejo objeto de estudio se atuviera a las reglas de los fluidos o a algún otro fenómeno físico (que tal vez no sea fácil de investigar, pero sin duda más sencillo de lo que parece ser actualmente).

La retórica de pensar a la vida como un asunto del cual pueda estudiarse su reología podría distar de la realidad, pero deriva del interesante ejercicio de comprender algunos conceptos básicos de los fluidos y de su estudio. De cualquier forma, en el terreno de lo metafórico hay una gran belleza en observar a la vitalidad como un fluido Newtoniano.

Referencias

1. Aponte, C. (2006). El tiempo, los genes y la historia Parte I. *Revista del Instituto Nacional de Higiene Rafael Rangel. Consultado 11/04/2024. Recuperado de El tiempo, los genes y la historia Parte I (scielo.org)
2. CRUMA. (s.f.). Flujo Laminar o Turbulento. Recuperado de <https://cruma.es/flujo-laminar-o-turbulento/#:~:text=Diferencias%20clave%20entre%20Flujo%20Laminar%20y%20Turbulento&text=Tra yectorias%20de%20part%C3%ADculas%3A%20En%20un,de%20manera%20aleatoria %20e%20impredecible.>
3. Malagón, C. (s.f.). Fluidos. Universidad Nebrija. Recuperado de https://www.nebrija.es/~cmalagon/Fisica_Aplicada/transparencias/03-Fluidos/11_-_fluidos.pdf
4. Méndez, Montealvo, María Guadalupe del Carmen, et al. (2010). *Introducción a la reología*. Instituto Politécnico Nacional. ProQuest Ebook Central. Recuperado de <https://ebookcentral.proquest.com/lib/bibliodgbsp/detail.action?docID=3187897>

Estudio *in situ* de la evolución del comportamiento reológico de una espuma modelo para la estimulación hidráulica de yacimientos

Germania Guadalupe Mancheno-Padilla, Esteban Francisco Medina-Bañuelos, Benjamín Marcos Marín-Santibáñez

Escuela Superior de Ingeniería Química e Industrias Extractivas, Instituto Politécnico Nacional, Av. Instituto Politécnico Nacional, Lindavista, Gustavo A. Madero, 07700 Ciudad de México, CDMX
bmarin@ipn.mx

Resumen

Las espumas son sistemas multifásicos compuestos de una fase gaseosa (entre 55 y 95 %) dispersa en dominios discretos (burbujas) a través de una fase continua acuosa. Estos sistemas aparecen tanto en la vida cotidiana como en procesos industriales. Nos encontramos con espumas al lavar nuestros trastes y ropas, cuando nos duchamos y también aparecen como fijadores para el cabello o productos de afeitar. También se usan en la extinción de incendios. Recientemente, las espumas se están utilizando como fluidos de estimulación hidráulica de yacimientos, debido principalmente a dos atractivas ventajas: son amigables con el medio ambiente, ya que reducen enormemente el consumo de agua durante el proceso de recuperación de hidrocarburos, y poseen un comportamiento reológico favorable, es decir que tienen esfuerzo de cedencia, conocido en la industria como

“*yield point*”, y viscosidades relativamente altas. Estas características reológicas resultan en el transporte óptimo del apuntalante que permite mantener abierta la fractura o red de fracturas creada a través de la formación productora, el apuntalante impide el colapso de las fracturas, favoreciendo la recuperación de los hidrocarburos. Sin embargo, el comportamiento reológico de las espumas (gas-líquido), incluidas las de fractura, es complejo y evoluciona en el tiempo debido a la coalescencia de las burbujas inducida por el drenado de la fase líquida. Esto dificulta su caracterización reológica y el entendimiento de su comportamiento durante el flujo. Por lo anterior, en este trabajo se estudió el comportamiento reológico de una espuma modelo como fluido de estimulación hidráulica y se presenta una metodología confiable para investigar su comportamiento reológico *in situ* como función del tiempo.

Palabras clave

Reometría, espumas de estimulación hidráulica, fluidos viscoplásticos, geometrías de flujo fractales

Introducción

El fracturamiento hidráulico, conocido también como estimulación hidráulica, es un proceso que involucra la inyección presurizada de un fluido con el fin de crear una red de fracturas entre el pozo y la formación productora, a través de la cual se movilizan los fluidos de la formación (crudo y/o gas) al pozo, para de esta manera aumentar o mantener su índice de productividad. Desde 1949, aproximadamente 2.5 millones de yacimientos de hidrocarburos con porosidad y permeabilidad baja, es decir, yacimientos no convencionales, se han fracturado hidráulicamente a nivel mundial para la recuperación de gas y crudo. En el 2011, la empresa Petróleos Mexicanos comenzó esta labor fracturando el yacimiento Eagle Ford en la frontera México-Estados Unidos [1-4], específicamente al sur del estado de Texas. El Eagle Ford es un yacimiento no convencional activo considerado uno de los más productivos del mundo, el cual coloca a México entre los 10 países a nivel mundial con reservas que pueden ser recuperadas [1]. Hasta el año 2020, en México se registraron 27 perforaciones por fracturamiento hidráulico para la producción de crudo y gas presentes en yacimientos no convencionales [1].

Dadas las necesidades energéticas y los diferentes tipos de yacimientos existentes, se han desarrollado diferentes fluidos fracturantes para la extracción o producción de hidrocarburos. Los fluidos que se han formulado se clasifican en sistemas base agua, base ácida y base alcohol, así

como emulsiones y espumas. Los fluidos de fractura base agua, específicamente geles poliméricos, son de los más utilizados. No obstante, la aplicación de este tipo de fluidos conduce al hinchamiento de las arcillas y al entrapamiento de agua causado por las fuerzas capilares, lo cual afecta o incluso llega a impedir la producción. Además, la estimulación hidráulica realizada con fluidos base agua requiere de grandes cantidades de agua y de procesos de tratamiento costosos del agua recuperada [5]. En este sentido, las espumas de estimulación hidráulica ofrecen algunas ventajas sobre los fluidos base agua, son amigables con el medio ambiente, debido a que el consumo de agua se reduce hasta en un 80 % en comparación con los fluidos base agua y poseen un comportamiento reológico apropiado, es decir, tienen un esfuerzo de cedencia o *yield point* y viscosidades relativamente altas [6], lo cual es deseable para el transporte efectivo del apuntalante dentro de la red de fracturas. Más aún, el uso de las espumas de fractura puede resultar en una rápida limpieza del pozo y en un mejor control de goteo. Por estas razones, las espumas de fractura son consideradas como fluidos potenciales para la extracción de recursos localizados en yacimientos no convencionales. Por lo tanto, el estudio del comportamiento reológico de las espumas para fracturamiento es relevante para el diseño del proceso de estimulación hidráulica, puesto que variables de proceso como caídas de presión en tuberías, presión de bombeo y cantidad de apuntalante transportado efectivamente son influidas por su viscosidad. No obstante, el comportamiento reológico de las espumas es complejo y cambia con el tiempo [7], debido a la coalescencia de las burbujas causada por el drenado constante de la fase líquida, dificultando su caracterización reo-

lógica y el entendimiento de su comportamiento durante el flujo. Aunado a lo anterior, se ha reportado que en flujo cortante, este tipo de fluidos exhiben deslizamiento [8-10], lo cual también influye en la determinación del esfuerzo de cedencia y su viscosidad. Así, en este trabajo se estudia el comportamiento en flujo de una espuma modelo como fluido de estimulación hidráulica y se describe una metodología confiable para estimar sus propiedades reológicas en el tiempo mediante mediciones reológicas *in situ*, usando una geometría de propela de sección transversal fractal recientemente propuesta por Owens *et al.* [11] y validada por Medina-Bañuelos *et al.* [10] para el estudio de fluidos cuya estructura es sensible a la inserción de geometrías de flujo estándar, como las geometrías de flujo de cilindros concéntricos o de Couette.

Metodología

En este trabajo se generó una espuma modelo al 80 % de calidad usando aire comprimido seco y limpio (filtro de 0.01 μm , BEKO Technologies) como la fase gaseosa y agua desionizada grado reactivo (MEYER) como la fase acuosa. El tensoactivo aniónico alfa olefina sulfonato de sodio, AOS (HJB Química Internacional S.A. de C.V.) se utilizó

como agente espumante, mientras que la oleil (OL-30) betaína (Lubrizol) se usó como agente estabilizante. Se prepararon 200 ml de una solución acuosa de AOS con OL-30 betaína, ambos al 2 % p/p. La generación de la espuma al 80 % de calidad, etiquetada como AOS-OL30b, se llevó a cabo en una columna de vidrio de borosilicato con altura de 61 cm y un diámetro interno de 34 mm, dispuesta con un plato difusor de vidrio de porosidad media (10-20 μm) en la base (ver figura 1a). Se colocaron 63 ml de la solución en la columna y se inyectó aire con un gasto de 0.05 l/min a una presión de 1 bar. El gasto volumétrico y la presión se controlaron usando un medidor de flujo y un manómetro (ver figura 1a). El análisis de estabilidad de la espuma, es decir, el monitoreo de la altura de la espuma y del líquido de drenado en el tiempo, se realizó mediante la captura de imágenes usando una cámara CMOS de 10 megapíxeles (Net GmbH) y su posterior análisis con un algoritmo de MatLab. Por otro lado, el estudio de la reología de la espuma modelo se llevó a cabo empleando un reómetro rotacional (MCR302, Anton-Paar), al cual se acoplaron una geometría de propela fractal y una copa ranurada (ver figura 1b), ambas impresas en 3D mediante estereolitografía láser en el

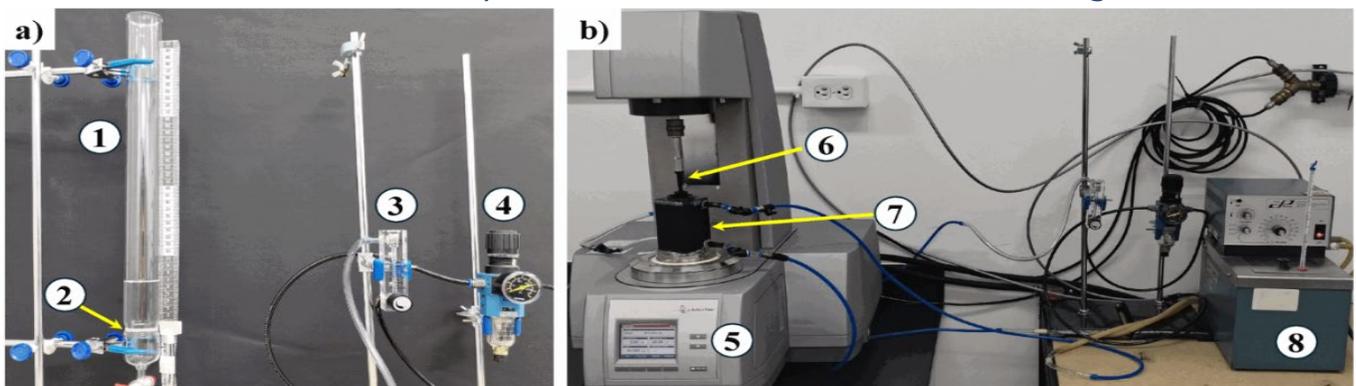


Figura 1. a) Sistema de espumado y b) su acoplamiento a una copa ranurada y al reómetro para caracterización reológica *in situ* de espumas. 1- columna de vidrio, 2- plato difusor de porosidad media, 3- medidor de flujo, 4- manómetro, 5- reómetro rotacional de esfuerzo y rapidez de corte controlados, 6- geometría de propela fractal, 7- copa ranurada y 8- recirculador para control de temperatura.

Laboratorio de Reología de la ESIQIE-IPN. La generación de la espuma en la copa ranurada se llevó a cabo a las mismas condiciones que el espumado en la columna de vidrio, con la geometría fractal ya localizada en la posición de medición para realizar pruebas reológicas *in situ* (figura 1b). Así, se construyeron siete curvas de flujo controlando la rapidez de corte de 0.1 a 50 s⁻¹ para cada muestra. Una vez terminada la primera curva de flujo, la muestra se dejaba en reposo por 1 min dentro de la copa sin retirar la geometría fractal, enseguida se iniciaba la rampa de rapidez de corte para obtener una segunda curva de flujo, y así sucesivamente hasta completar las siete curvas para estudiar el comportamiento reológico de la espuma con el tiempo. Todos los experimentos se realizaron con muestras frescas a una temperatura de 25±1 °C, la cual se controló utilizando un recirculador de agua (ver figura 1b).

Teoría del flujo de geometrías fractales en copa

Owens *et al.* [11] propusieron una ecuación para el cálculo del esfuerzo de corte alrededor de una propela fractal, σ_w , con base en estudios previos de Sheerwood y Meeten [12] y de Atkinson y Sherwood [13], quienes a su vez analizaron la influencia del número de brazos N en la precisión del cálculo de σ_w , a partir de la torca M, mediante análisis teóricos en 2D y simulaciones en 3D. Las ecuaciones propuestas por Sherwood y Meeten [12] y Atkinson y Sherwood [13] fueron combinadas y optimizadas por Owens *et al.* [11] usando datos reométricos obtenidos con siliconas oleosas y un fluido con esfuerzo de cedencia simple, para construir la siguiente expresión y convertir datos de torca a esfuerzo de corte en la pared:

$$\sigma_w = \frac{M}{2\pi R_v^2 L \left[\left(1 - \frac{1.113}{N} \right) + \frac{R_v}{4L} \left(2.75 - \frac{3}{\sqrt{N}} \right) \right]}$$

Para el cálculo de la rapidez de corte, $\dot{\gamma}$, de la espuma en el borde de la propela fractal, se usó la expresión desarrollada por Nguyen y Boger [14], la cual está dada por la siguiente expresión:

$$\dot{\gamma} = \frac{2\Omega}{(d \log M / d \log \Omega)}$$

En la ecuación anterior, Ω representa la velocidad angular de la propela fractal.

Resultados

Las alturas normalizadas de la espuma, H_e/H_{oe} , y del líquido de drenado, H_l/H_{ol} , se muestran en las figuras 2a-b como función del tiempo, respectivamente. En la figura 2a se observa que la altura de la espuma AOS-OL30b cae el 40 % de la inicial a los 20 min, en tal período se drena más del 97 % del líquido (ver figura 2b). De acuerdo con lo reportado por Lunkenheimer y Malysa [15] estos resultados indican que la espuma es estable, ya que su altura se mantiene por arriba del 50 % de altura inicial de la espuma, incluso después de que la etapa de drenado severo cesa, aproximadamente a los 20 min de vida de la espuma (ver figura 2b). Por otra parte, a los 30 minutos la altura de dicha espuma disminuye hasta el 60 %, lo cual podría considerarse como el término de la vida útil de la espuma [15]. Lo anterior sugiere que la presencia de la OL-30 betaína resulta en dominios resistentes al proceso de drenado, ralentizando la coalescencia de las burbujas e incrementando su estabilidad. Así, estos resultados indican que la espuma AOS-OL30b se puede usar como un fluido modelo de estimulación hidráulica para estudiar su comportamien-

to reológico en el tiempo y describir una metodología confiable para tal propósito, lo cual se presenta a continuación.

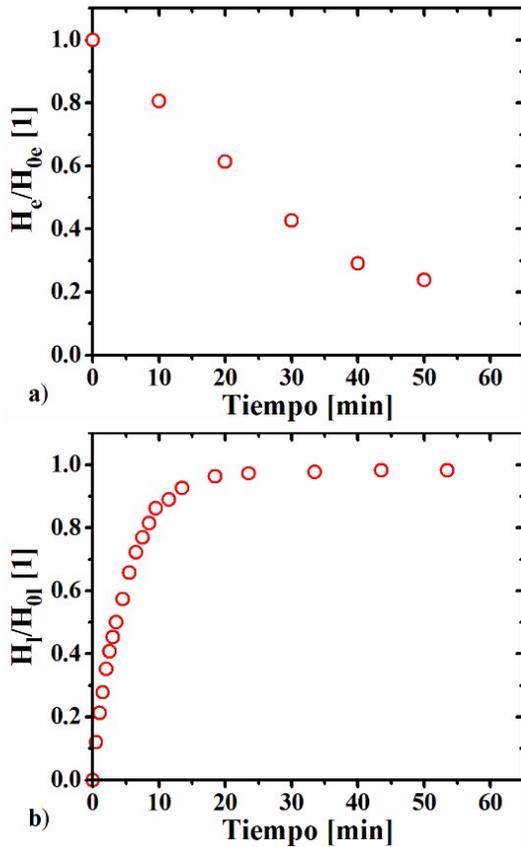


Figura 2. Alturas normalizadas de la espuma, H_e/H_{0e} , y del líquido de drenado, H_l/H_{0l} , como función del tiempo.

Las curvas de torca como función de la velocidad angular de la espuma AOS-OL30b se muestran en la figura 3a construidas a diferentes tiempos. Las barras de error representan la desviación estándar de 5 repeticiones. Es importante mencionar que al tiempo $t=1380$ s la altura de la espuma aún se mantiene por encima de la parte superior de la geometría fractal, de acuerdo con cálculos realizados a partir de los datos de la figura 1a. En general, puede verse que la torca decrece a medida que transcurre el tiempo, lo cual sugiere que las propiedades reológicas de la espuma evolucionan. Nótese que las curvas a los di-

ferentes tiempos tienen la misma forma, en otras palabras, cuando Ω tiende a 0, todas las curvas extrapolan a un valor crítico de la torca, $M_y > 0$, con M_y disminuyendo con el tiempo. Además, la razón de cambio de M con respecto a Ω es aproximadamente igual para cada curva, indicando que el comportamiento reológico de la espuma puede ser descrito por la misma ecuación constitutiva, cuyos parámetros son función del tiempo.

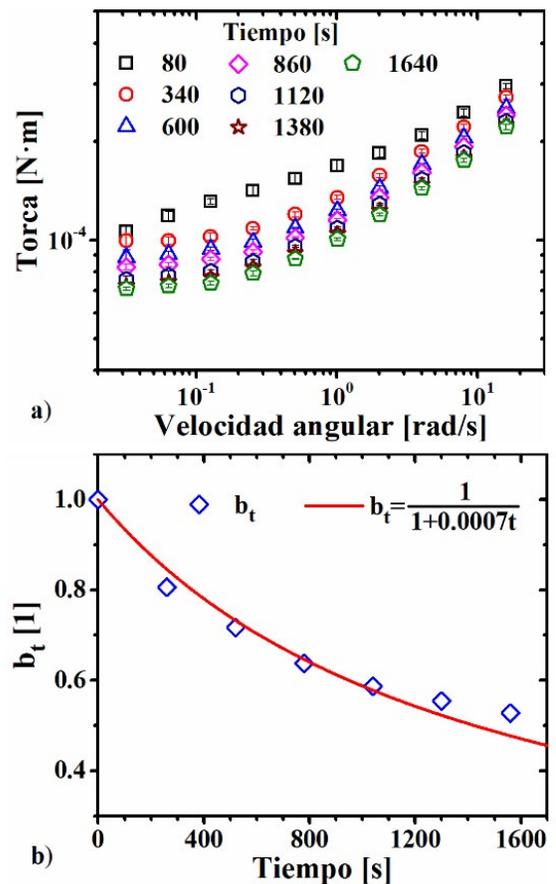


Figura 3. a) Datos de torca vs. velocidad angular como función del tiempo de la espuma AOS-OL30b al 80 % de calidad, y b) evolución del factor de desplazamiento b_t .

Por lo anterior, es posible representar la relación entre el esfuerzo y la rapidez de corte usando un factor de desplazamiento que depende del tiempo, b_t , tal que, al dividir cada variable de las curvas de flujo por dicho factor, las curvas se superpongan en una

sola, la curva maestra. La determinación del factor b_t para cada tiempo se realizó usando regresión no lineal. Para ello, simplemente se compararon los datos experimentales de M vs. Ω obtenidos para cada tiempo con un modelo tipo Herschel-Bulkley de la forma $M=M_y+k\Omega^n$, el cual se ajustó a la curva construida en $t=80$ s (cuadros vacíos en la Figura 3a), o curva de referencia, el valor de b_t óptimo se encuentra cuando la diferencia entre la curva deseada M/b_t vs. Ω/b_t y el modelo $M=M_y+k\Omega^n$ es mínima. En la figura 3b se encuentran los valores de b_t contra el tiempo, y se observa que b_t disminuye hiperbólicamente con la forma:

$$b_t = \frac{1}{1+ct}$$

En la ecuación (3) t es el tiempo y c es una constante de ajuste, cuyo valor resultó de 0.0007 s^{-1} para la espuma AOS-OL30b, el valor de c determinado en este trabajo se encuentra dentro del intervalo reportado para espumas semejantes [7]. Una vez determinados los valores de b_t , se utilizaron para construir la curva maestra de variables reducidas, M/b_t vs. Ω/b_t , la cual se presenta en la figura 4a. Rápidamente se observa que los valores de b_t calculados hacen que todas las curvas se superpongan en una sola, lo cual demuestra que el comportamiento reológico de la espuma AOS-OL30b puede ser descrito por una sola ecuación constitutiva con parámetros dependientes del tiempo. Sin embargo, se encontró que el factor b_t al tiempo $t=1640$ s se desvía de la ecuación (3), para dicho tiempo la altura de la espuma es menor al 50 % de la inicial, indicando el colapso de los dominios de la espuma. Con base en los resultados de la figura 4a, las ecuaciones (1) y (2) se usaron para convertir los datos de M/b_t vs. Ω/b_t en la curva de flujo maestra σ/b_t vs. $\dot{\gamma}/b_t$ de

la espuma, la cual es bien descrita por el modelo de Herschel-Bulkley en términos del esfuerzo de corte y rapidez de corte reducidos (línea continua en la figura 4b).

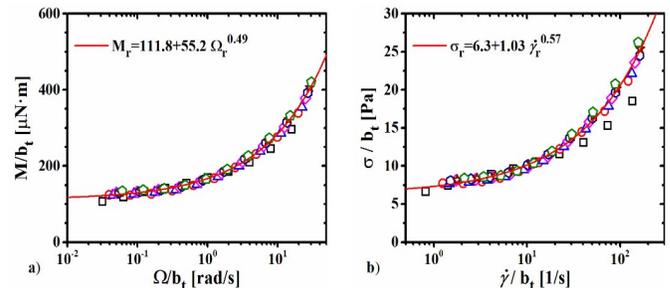


Figura 4. a) Curva maestra construida con las variables reducidas M/b_t vs. Ω/b_t . b) Curva de flujo maestra σ/b_t vs. $\dot{\gamma}/b_t$.

Finalmente, la figura 5 muestra las curvas de flujo de la espuma AOS-OL30b al 80 % de calidad y su evolución. Cabe mencionar que estas curvas de flujo se obtuvieron a partir de la curva de flujo maestra de la figura 4b. Puede verse claramente que el comportamiento reológico de la espuma a los diferentes tiempos es siempre bien descrito por el modelo de Herschel Bulkley (véanse las líneas continuas para algunas de las curvas). Así, los resultados presentes en este trabajo demuestran que la espuma mantiene su comportamiento como el de un fluido con esfuerzo de cedencia, lo cual es relevante para el diseño del proceso de estimulación hidráulica de yacimientos.

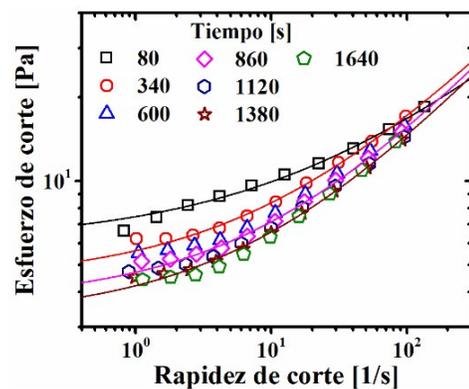


Figura 5. Curvas de flujo de la espuma AOS-OL30b al 80 % de calidad como función del tiempo

Conclusiones

En este trabajo se estudió *in situ* el comportamiento reológico en el tiempo de una espuma modelo como fluido de estimulación hidráulica formulada con el tensioactivo AOS y con la betaína OL-30 como agente estabilizante y se presentó una metodología confiable para tal efecto. Se mostró que la espuma generada con AOS-OL30b es estable con dominios resistentes al proceso de drenado severo, ya que a los 20 minutos la altura de la espuma se mantiene por arriba del 60 % de su altura inicial. Finalmente, en este trabajo se describió una metodología confiable para la caracterización reológica *in situ* de espumas de estimulación hidráulica y se demostró que la espuma modelo formulada con 2 % AOS + 2 % OL-30 betaína al 80 % de calidad exhibe un comportamiento viscoplástico descrito por el modelo de Herschel-Bulkley, donde sus parámetros dependen del tiempo.

Apoyo financiero:

Esta investigación fue apoyada por la Secretaría de Investigación y Posgrado del Instituto Politécnico Nacional (20240882).

Agradecimientos:

G. G. M.-P. es becaria CONAHCYT y E. F. M.-B. es beneficiario de una Beca Posdoctoral del CONAHCYT.

Referencias

1. C. de J. Galicia-Buenrostro, C. Villegas-Capistrán, J. Salgado Valdés, M. Pimentel-Montiel, J. A. García-Estrada, H. E. Gallardo-Ferrera, F. Castellanos Paez, y C. U. Moya-García. "Retos y Oportunidades de la Producción de Petróleo y Gas Natural de Yacimientos No Convencionales en México" Comisión Nacional de Hidrocarburos (2022).
2. P. A. Parra, N. Rubio, C. Ramirez, B. D. Guerra, V. A. Exler, I. R. Campos, M. D. Trejo, J. Olguin, C. H. Vargas, R. Valbuena, D. F. Soler, M. I. Weimann, V. Lujan, P. Bonningue, P. G. Reyes, R. Martinez, R. Muñoz, E. Rodríguez, and M. García. "Unconventional Reservoir Development in Mexico: Lessons Learned from the First Exploratory Wells" Society of

Petroleum Engineers, SPE 164545 (2013), pp. 1-14. Presented at the SPE Unconventional Resources Conference-USA held at The Woodlands, Texas, USA.

3. S. H. Steven, and K. D. Moodhe. "Evaluation of Mexico's Shale Oil and Gas Potential" Society of Petroleum Engineers, SPE 177139-MS (2015), pp. 1-15. Presented at the SPE Latin America and Caribbean Petroleum Engineering Conference held in Quito, Ecuador.

4. J. C. Granados-Hernandez, R. Muñoz-Cisneros, L. R. Caraveo-Miranda, M. M. Guerrero-Tristán, M. García-Ortega, and R. Padilla-Bastida. "The Emerging Unconventional Upper Jurassic Oil Play in Mexico" Society of Petroleum Engineers, SPE-185024-MS (2017), pp. 1-15. Presented at the SPE Unconventional Resources Conference held in Calgary, Alberta, Canada.

5. C. E. Clark, R. M. Horner, and C. B. Harto. "Life Cycle Water Consumption for Shale Gas and Conventional Natural Gas", Environmental Science and Technology, vol. 47 (2013), pp. 11829-11836.

6. L. L. Schramm. Emulsions, Foams and Suspensions: Fundamentals and Applications, WILEY-VCH (1ra. ed.), Alemania, 2005.

7. I. M. Carraretto, C. E. Owens, and G. H. McKinley. "Time-resolved rheometry of coarsening foams using three dimensionally printed fractal vanes" Physics of Fluids, vol 34 (2022), pp. 113-108.

8. E. F. Medina-Bañuelos, B. M. Marín-Santibáñez, J. Pérez-González, M. Malik, and D. M. Kalyon. "Tangential annular (Couette) flow of a viscoplastic microgel with wall slip" Journal of Rheology, vol 61 (2017), pp. 1007-1022.

9. E. F. Medina-Bañuelos, B. M. Marín-Santibáñez, J. Pérez-González, and D. M. Kalyon. "Rheo-PIV analysis of the vane in cup flow of a viscoplastic microgel" Journal of Rheology, vol 63 (2019), pp. 905-915.

10. E. F. Medina-Bañuelos, B. M. Marín-Santibáñez, E. Charparian, C. E. Owens, G. H. McKinley, and J. Pérez-González. "Rheo-PIV of yield stress fluids in a 3D-printed fractal vane-in-cup geometry" Journal of Rheology, vol 67 (2023), pp. 891-908.

11. C. E. Owens, A. J. Hart, and G. H. McKinley. "Improved rheometry of yield stress fluids using bespoke fractal 3D printed vanes" Journal of Rheology, vol. 64 (2020), 643-662.

12. J. D. Sherwood, and G. H. Meeten. "The use of the vane to measure the shear modulus of linear elastic solids" Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, vol. 41 (1991), pp. 101-118.

13. C. Atkinson, and J. D. Sherwood. "The torque on a rotating n-bladed vane in a Newtonian fluid or linear elastic medium" Proceedings: Mathematical and Physical Sciences, vol. 438 (1992), pp. 183-196.

14. Q. D. Nguyen, and D. V. Boger. "Characterization of yield stress fluids with concentric cylinder viscometers," Rheologica Acta, vol. 26 (1987), pp. 508-515.

15. K. Lunkenheimer, and K. Malysa. "Simple and Generally Applicable Method of Determination and Evaluation of Foam Properties" Journal of Surfactants and Detergents, vol. 6 (2003), pp. 69-74.

Almacenamiento de hidrógeno en materiales sólidos

Karina Suárez Alcántara

Unidad Morelia del Instituto de Investigaciones en Materiales de la UNAM
Antigua Carretera a Pátzcuaro No. 8701 Col. Ex-Hacienda de San José de la Huerta. C.P. 58190
Morelia, Michoacán. México
karina_suarez@iim.unam.mx

Resumen

Se presenta de forma breve la importancia del almacenamiento de hidrógeno. Se hace un resumen de los tipos de almacenamiento de hidrógeno, así como de las principales familias de materiales almacenadores de hidrógeno. También, se explica a las aleaciones de alta entropía como nuevos materiales de almacenamiento de hidrógeno, con capacidad de ajustar las propiedades de almacenamiento de hidrógeno en comparación con otro tipo de aleaciones.

Palabras clave:

Almacenamiento de hidrógeno, energía.

Introducción

En una serie de artículos de divulgación se ha establecido la importancia del hidrógeno como combustible sustentable [1, 2]. En esta ocasión se abordan los diferentes materiales de almacenamiento “sólido” de hidrógeno. La razón de esto es simple, al hidrógeno como combustible hay que producirlo y después almacenarlo, con la premisa de que:

Almacenar hidrógeno = Almacenar energía

El almacenamiento de hidrógeno es un proceso complejo, limitado por la química, cinética y termodinámica de los materiales, por eso, aquí se explica en español para un público no especializado.

El paso previo

El hidrógeno molecular (H_2) producido por cualquier método debe ser primero purificado. El tipo y modo de purificación es específico, de acuerdo al método de producción. Por ejemplo la producción de H_2 por electrólisis de agua deja rastros de humedad, mientras que la producción de H_2 por reformado catalítico deja rastros de metano (CH_4). Esos compuestos pueden oxidar, desactivar o envenenar* a los materiales almacenadores de hidrógeno, por lo que es de suma importancia eliminarlos. * El envenenamiento de materiales es el bloqueo de los sitios activos (el punto exacto) donde suceden las reacciones químicas.

El almacenamiento de hidrógeno

Existen tres modos de almacenamiento de hidrógeno: I) gas, II) líquido III) o (en materiales) en estado sólido. El almacenamiento de

hidrógeno en forma de gas es poco eficiente debido a que el hidrógeno es un gas poco denso que requiere una gran presión de compresión para aumentar su densidad hasta un valor aceptablemente alto. Sin embargo, esta forma de almacenamiento se considera como una tecnología madura y es usada de forma industrial. La presión de compresión del hidrógeno varía de acuerdo a la aplicación; por ejemplo, en los tanques usados en el laboratorio es de aproximadamente 100-150 atmósferas. Mientras que para los automóviles a hidrógeno con almacenamiento gaseoso se requieren presiones del orden de 700-800 atmósferas. Aunque ya existen automóviles a hidrógeno (<https://www.toyota.com/mirai/>, <https://www.bmwusa.com/ix5-hydrogen.html>) que usan este tipo de almacenamiento a bordo, el uso de altas presiones puede ser peligroso por las posibles fugas durante el uso cotidiano y en caso de colisiones.

En el almacenamiento líquido es necesario enfriar y comprimir al hidrógeno. El principal problema de este método de almacenamiento es que todo el tiempo se debe mantener frío (a 20 K o -253 °C). Esto requiere de mucha energía. Este tipo de almacenamiento es adecuado para grandes sistemas de almacenamiento, por ejemplo, para depósitos industriales o la NASA, pero no es adecuado para usuarios finales o a escala pequeña.

Una alternativa en el almacenamiento líquido es el almacenamiento en líquidos orgánicos. En este caso, los líquidos orgánicos con presencia de dobles enlaces pueden hidrogenarse para formar enlaces sencillos y almacenar hidrógeno. La posterior deshidrogenación lleva a la formación de los dobles enlaces iniciales y la liberación de hidrógeno. Sin embargo, esta aproxi-

mación de almacenamiento de hidrógeno tiene la desventaja de que se deben usar catalizadores adecuados, así como altas temperaturas para realizar dichos procesos. Este tipo de almacenamiento está en fase de investigación básica y la idea es interesante, pero requiere más investigación.

La tercera opción es el almacenamiento de hidrógeno en estado sólido. Aquí, el término "sólido" se refiere al uso de materiales sólidos en los cuales el hidrógeno se adsorbe (se pega) en la superficie de un material (fisisorción) o bien como forma un compuesto por medio de nuevos enlaces químicos (quimisorción). Existen diversos materiales (Fig. 1), aunque a la fecha ninguno de estos representa una solución completa.

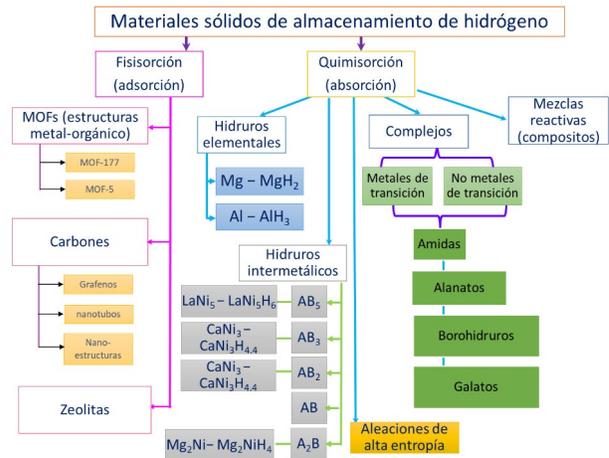


Figura 1. Diferentes tipos de materiales sólidos de almacenamiento de hidrógeno. En hidruros metálicos: A metales que forman fácilmente hidruros y B metales que no forman fácilmente hidruros

Los materiales de almacenamiento de hidrógeno deben cumplir con ciertos requisitos de capacidad de almacenamiento, reversibilidad**, ciclabilidad*** y costo. Sin embargo, ninguno de los materiales cumple con todos los requisitos, falta realizar más investigación básica y aplicada para desarrollar nuevos materiales u optimizar los ya existentes. Otro factor a considerar es la escala necesaria para el

almacenamiento de hidrógeno y la aplicación *per se*. Es decir, se debe responder a las preguntas básicas ¿Cuánto hidrógeno se necesita almacenar?, y ¿Cuáles son las condiciones de operación presión, temperatura, densidad, peso, etc.? Las condicionadas mencionadas están regidas por el tipo de aplicación. Una de las clasificaciones más generales del tipo de aplicaciones se refiere a aplicaciones estacionarias versus aplicaciones móviles. Las aplicaciones estacionarias están más enfocadas a aplicaciones industriales, donde se pueden tener menos restricciones con respecto a las condiciones de operación. El caso opuesto es el almacenamiento de hidrógeno para automóviles, donde las condiciones de operación y desempeño de los materiales son sumamente rigurosas. La agencia de energía de los Estados Unidos (DOE, por sus siglas en inglés) publica y actualiza los requisitos técnicos de materiales y sistemas de almacenamiento de hidrógeno para automóviles (Tabla 1). Entre los requisitos técnicos se incluyen tener una alta capacidad de almacenamiento mínima de 6.5 % peso****, ser reversibles en los procesos de captura/ liberación de hidrógeno; operar a temperaturas y presiones compatibles con la pila de combustible (de temperatura ambiente a aproximadamente 80 °C y entre 2-5 atmósferas para la liberación de hidrógeno); almacenar hidrógeno a presiones menores de 100 atmósferas.

** La reversibilidad se refiere a que los materiales sean capaces de almacenar y liberar hidrógeno en forma de ciclos, por la misma ruta pero inversa.

*** La ciclabilidad se refiere a que los materiales puedan realizar muchos ciclos (idealmente 1500 ciclos) sin degradarse.

**** De cada 100 gramos de material hidrogenado, se debe poder liberar 6.5 gramos de hidrógeno.

Tabla 1. Algunos requisitos de la DOE para el almacenamiento de hidrógeno para aplicaciones móviles

Parámetro de almacenamiento	Unidades	2020	2025	Final
Capacidad gravimétrica usable o neta (incluye el material de almacenamiento, contenedor, accesorios y periféricos)	kWh/kg (kg H ₂ /kg sistema)	1.5 (0.045)	1.8 (0.055)	2.2 (0.065)
Capacidad volumétrica usable o neta (incluye el material de almacenamiento, contenedor, accesorios y periféricos)	kWh/L (kg H ₂ /L sistema)	1.0 (0.030)	1.3 (0.040)	1.7 (0.050)
Costo neto	\$/kWh (\$/kg H ₂)	10 (333)	9 (300)	8 (266)
Temperatura de operación (ambiente)	°C	-40/60	-40/60	-40/60
Máxima temperatura de operación	°C	-40/85	-40/85	-40/85
Número de ciclos de operación	-	1500	1500	1500
Presión mínima de liberación	bar (abs)	5	5	5
Presión máxima de liberación	bar (abs)	12	12	12
Eficiencia	%	90	90	90
Eficiencia global	%	60	60	60
Flujo mínimo (para una pila de combustible de kW)	(g/s)/kW	0.02	0.02	0.02
Flujo promedio	(g/s)/kW	0.004	0.004	0.004
Tiempo de arranque de flujo (20 °C)	s	5	5	5
Tiempo de arranque de flujo (-20 °C)	s	15	15	15

Adsorción y Absorción de hidrógeno en materiales sólidos

La adsorción o fisisorción de hidrógeno molecular (H₂) en materiales sólidos se da a nivel superficial y normalmente ocurre mejor a bajas temperaturas y altas presiones (-196 °C, 100 bar). No implica la formación o rotura de enlaces hidrógeno-hidrógeno (H-H). En cambio la absorción o quimisorción de hidrógeno se da a nivel estructural de los materiales, es decir existe la formación y rotura de enlaces durante la hidruración y la deshidruración. Los materiales de absorción operan a altas temperaturas y presiones moderadas a altas (150-400 °C, 10-50 bar).

Los procesos de hidruración y deshidruración son complicados y dependen del material almacenador en particular. Los procesos más sencillos ocurren en los hidruros metálicos, frecuentemente, su racionalización o entendimiento se extrapola a materiales más complicados. El proceso de hidruración (a una temperatura dada) inicia en un metal con la adsorción de hidrógeno molecular (H₂) en la superficie de dicho metal, la cantidad de hidrógeno almacenado es sumamente baja. Si el sitio de adsorción contiene

un catalizador, un defecto cristalino u otra situación energética y geoméricamente favorable, el hidrógeno molecular (H_2) se disocia para tener átomos de hidrógeno (H). Los átomos de hidrógeno difunden (se mueven) a través del metal. En este punto existe una solución de átomos de H en el metal. Si la cantidad de H en solución con el metal aumenta progresivamente por efecto de aumentar la presión de hidrógeno se alcanzara una situación donde los átomos de H formen enlaces con el metal, se forma (nuclea) el hidruro del metal (MH_x , x: número de oxidación). A partir de este punto, la cantidad de hidrógeno almacenado crece notablemente: se tiene la fase de crecimiento de la fase hidruro a una presión y temperatura dadas. Si la presión de hidrógeno sigue aumentando, se produce una solución de H en la fase hidruro. La cantidad de hidrógeno disuelto en la fase hidruro es mínima. El proceso de deshidruración se entiende como el inverso de la hidruración.

Materiales de absorción de hidrógeno

Los materiales de almacenamiento de hidrógeno por absorción son variados, en general se pueden clasificar en hidruros elementales, hidruros intermetálicos, complejos, aleaciones de alta entropía y compositos.

Muchos de los elementos de la tabla periódica forman compuestos con el hidrógeno, formando así los llamados **hidruros elementales**. Algunos de ellos son metálicos (conservan algunas características metálicas), iónicos, y algunos otros son moleculares covalentes (principalmente aquellos del bloque p de la tabla periódica). La estabilidad de cada compuesto formado puede variar. En este tipo de hidruros, destaca el MgH_2 como posible material almacenador de hi-

drógeno. El MgH_2 tiene una capacidad de almacenamiento de hidrógeno del 7.6 % peso. Aunque la presión y temperatura necesaria para la hidruración de Mg para formar MgH_2 de forma directa no es muy alta (10-25 atmósferas), la desventaja principal del MgH_2 es la alta temperatura de deshidruración: 300-350 °C. Esta temperatura es incompatible con las aplicaciones de automóviles a hidrógeno a pilas de combustible. Sin embargo, otras aplicaciones industriales o de almacenamiento de calor pueden beneficiarse del uso de Mg como material almacenador de hidrógeno.

Los hidruros intermetálicos son formados a partir de aleaciones de elementos que fácilmente forman hidruros y de los que no. Los metales que forman fácilmente hidruros (llamémosles A) generan materiales estables que necesitan mucha energía (generalmente térmica) para liberar el hidrógeno. Los metales que no forman fácilmente hidruros (llamémosles B) generan (en su caso) materiales inestables o metaestables que se descomponen fácilmente a baja temperatura o con bajas energías de activación. En principio, una combinación adecuada de elementos podría modificar las condiciones de hidruración/deshidruración del material típico MgH_2 . Algunos materiales intermetálicos de interés son el $LaNi_5/LaNi_5H_6$ y el Mg_2Ni/Mg_2NiH_4 .

Las aleaciones de alta entropía están conformadas por 5 o más elementos en relaciones estequiométricas equimolares (o cercanas a la equimolar). En las aleaciones de alta entropía (AAE o HEAs por sus siglas en inglés), no hay una diferencia clara entre el soluto y el solvente. Las AAEs, en contraposición con las aleaciones convencionales, forman una sola fase cristalina con todos los componentes.

En principio, cualquier metal de la tabla periódica puede formar parte de una AAE. Sin embargo, la selección indiscriminada de elementos no es recomendable ni factible. Para aplicaciones de almacenamiento de hidrógeno, se recurre a la combinación de elementos que no forman hidruros y elementos que sí forman hidruros para lograr un balance.

Por otro lado, las posibles combinaciones de AAEs son casi infinitas. Aquí se presenta un análisis matemático (combinaciones y permutaciones):

- Si se seleccionan al azar 5 elementos químicos de 100 elementos de la tabla periódica (exceptuando al H), se tienen 75 287 520 posibles combinaciones de AAEs.
- Si se restringe la selección a 5 elementos químicos de 32 elementos que experimentalmente han formado parte de materiales de almacenamiento de hidrógeno, se tienen 201 376 posibilidades.
- Si se fija un metal (por ejemplo V o Mg) y se restringe la selección de los 4 elementos químicos (E1, E2, E3 y E4) restantes de entre 13 elementos químicos que frecuentemente han formado parte de materiales almacenamiento de hidrógeno, han funcionado como catalizadores, o bien se han propuesto con base en cálculos teóricos (Ni, Co, Fe, Cr, Sc, Ti, Mn, Ga, Y, Al, Zn, Nb, Zr), se tienen 715 posibles tipos de aleaciones para el V y otras 715 para el Mg. El V es conocido por su facilidad de formar hidruros a baja temperatura, sin embargo, esto lo hace lentamente (días), es dependiente de las condiciones de procesamiento del metal y de la formación de aleaciones. El Mg es un material típico de almacenamiento de hidrógeno. Si se aumenta el número de elementos químicos a seleccionar, se aumenta el número de posibles aleaciones.
- Adicionalmente, cada una de esas 715 posibles AAEs de V y de Mg tiene un número muy grande combinaciones estequiométricas posibles, $V_v E1_w E2_x E3_y E4_z$ o $Mg_v E1_w E2_x E3_y E4_z$. Para determinar las posibles combinaciones estequiométricas se debe recurrir a programas de cómputo especializados. Por ejemplo, si los números v, w, x, y & z varían de 0 a 1, con un paso de 0.1 en la variación de los números estequiométricos, se tienen 161 051 combinaciones. Con un paso menor, por ejemplo 0.01, el número de posibles AAEs se incrementa exponencialmente. Para disminuir el tiempo de cálculo se restringen los valores estequiométricos de acuerdo a la experiencia o información ya reportada.

El gran volumen de datos de posibles aleaciones de alta entropía se debe analizar de acuerdo a diferentes factores e indicadores sobre la formación de la aleación, en una primera instancia, y después sobre el almacenamiento de hidrógeno per se. Es decir que la aleación calculada se puede en efecto formar, pero puede o no almacenar hidrógeno. Las AAEs son interesantes porque pueden ser materiales producidos por diseño, y se podría modular la capacidad de almacenamiento de hidrógeno y las condiciones de operación. Dentro de las AAEs de reciente estudio, destacan materiales que pueden almacenar hidrógeno sin necesidad de activación y que operan a baja temperatura (incluso a temperatura ambiente). Sin embargo, en la mayoría de los casos la capacidad de hidrógeno reportada está en el rango de 1-4 % peso.

Los hidruros complejos son una familia muy importante de materiales almacenadores de hidrógeno: los materiales más interesan-

tes incluyen a los alanos $M(\text{AlH}_4)_x$ ó $M(\text{AlH}_6)_y$, borohidruros $M(\text{BH}_4)_x$, o aminas $R-(\text{NH}_2)_x$. Se les dio su nombre gracias a que combinan diferentes tipos de enlaces (iónicos y covalentes) en un mismo material. Tienen en común la formación de iones complejos de Al, B o N con H que pueden formar tetraedros, octaedros, u otras estructuras que pueden compartir los átomos de las esquinas de los octaedros, por lo que con anterioridad a la popularización de la difracción de rayos X, su estequiometría no era directamente ligada a la estructura. Los hidruros complejos pueden ser de un solo metal o de varios metales (2 o hasta 3). Los hidruros complejos, en general, tienen altas capacidades de almacenamiento, por ejemplo el LiBH_4 tiene un contenido de hidrógeno del 18.51 % peso. Sin embargo, la reversibilidad de los hidruros complejos está muy limitada, ya que se necesitan grandes presiones y temperaturas para lograr la rehidrogenación en estado sólido. En la práctica, solo el NaAlH_4 ha demostrado reversibilidad con el uso de catalizadores de Ti adecuados. Aun así, se requieren presiones del orden del 100 bar para lograr la rehidrogenación.

Mezclas, compósitos y confinamiento

Dado que ningún material de almacenamiento de hidrógeno cumple por sí solo con los requerimientos del DOE (Tabla 1), recientemente se han empleado la formación de mezclas reactivas, compósitos y el confinamiento. En las mezclas reactivas, dos materiales de almacenamiento de hidrógeno reaccionan entre sí durante las reacciones de hidruración/deshidruración. Las mezclas reactivas tienen características cinéticas y termodinámicas diferentes a los materiales originales. En los compósitos, se usa un material, que puede ser per se un material de almace-

namiento de hidrógeno o no, como soporte para un material de quimisorción de almacenamiento. En este caso, las propiedades cinéticas son modificadas. Un ejemplo típico es el uso de carbones como parte del compósito. En relación cercana con los compósitos está el confinamiento. Aquí, el material de soporte debe contener poros micro o nanométricos donde el material de quimisorción queda confinado. En teoría, la disminución del tamaño de poro hasta el reino nano, es decir de tamaño de la partícula confinada, puede llevar a modificar la cinética y la termodinámica de la hidruración/deshidruración.

Conclusiones

Se presentaron distintas alternativas de almacenamiento de hidrógeno. Se presentaron en forma general las tres formas de almacenamiento de hidrógeno, haciendo hincapié en los materiales sólidos de almacenamiento de hidrógeno. Entre estos últimos se destacaron a las aleaciones de alta entropía. Sin embargo, a pesar de todas las posibilidades de materiales de almacenamiento de hidrógeno, ningún material cumple con los requisitos de la DOE. Se debe realizar más investigación básica y aplicada de los materiales y sistemas de almacenamiento de hidrógeno. El presente manuscrito ayuda a la divulgación y difusión de la importancia del almacenamiento de hidrógeno y de los diferentes tipos de materiales almacenadores.

Agradecimientos

CONAHCYT-CIENCIA DE FRONTERA CF-2023-I-394 Aleaciones de alta entropía con V o Mg para el almacenamiento de hidrógeno.

Referencias

- [1] K. Suárez-Alcántara. Un poco de todo sobre el hidrógeno. Ciencia, revista de la academia mexicana de ciencias 70 (2019) 72-80.
- [2] K. Suárez-Alcántara. Celdas de Combustible a hidrógeno. Revista Materiales Avanzados, Número 32, (2020) 56-61.

Funcionalización de moléculas orgánicas: la versatilidad de obtener nuevos materiales semiconductores

G. A. Vázquez-Hernández¹, M.E. Sánchez-Vergara², L. Fomina¹, R. Salcedo¹

¹ Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, circuito exterior s/n. Ciudad Universitaria, Coyoacán 04510, Ciudad de México

² Departamento de Ingeniería, Universidad Anáhuac México, Avenida Universidad Anáhuac 46, Col. Lomas Anáhuac, Huixquilucan, Estado de México 52786, México

lioudmilafomina@gmail.com, ing.giovannavhz@gmail.com

Resumen

El desarrollo en la investigación de materiales orgánicos con propiedades optoelectrónicas atractivas ha generado gran interés y avances en el campo de los semiconductores orgánicos debido a sus potenciales aplicaciones en diferentes campos, especialmente en el de los dispositivos optoelectrónicos. Actualmente es posible diseñar materiales semiconductores orgánicos ajustando los niveles de los orbitales moleculares HOMO-LUMO para controlar las propiedades electrónicas del material y su potencial aplicación mediante la introducción de grupos atractores de electrones en su estructura. Esta estrategia ha sido utilizada para la fabricación de polímeros derivados del pirrol y se han reportado muy buenos resultados en cuanto a la disminución de las energías HOMO-LUMO comparadas con el polímero sin sustituyentes. En el presente artículo se describe brevemente la síntesis y caracterización de un nuevo material semiconductor

orgánico, funcionalizando la molécula de 1-(*p*-amino-fenil)-2,5-difenilpirrol con fule-reno. Esta síntesis se realizó a partir de una reacción con sales de diazonio. El producto obtenido se caracterizó mediante espectroscopía de Infrarrojo por transformada de Fourier (FT-IR) y Resonancia Magnética Nuclear en estado sólido para corroborar la formación del compuesto y su estructura, así como la realización de análisis térmicos para comprobar su estabilidad térmica. Posteriormente, se determinó de forma teórica y experimental el valor de su energía de banda prohibida (E_g) utilizando los métodos DFT y Kubelka-Munk, respectivamente, mostrando que el compuesto sintetizado presenta un comportamiento como material semiconductor.

Palabras claves:

semiconductores orgánicos, band gap, pirroles sustituidos, síntesis orgánica.

Introducción

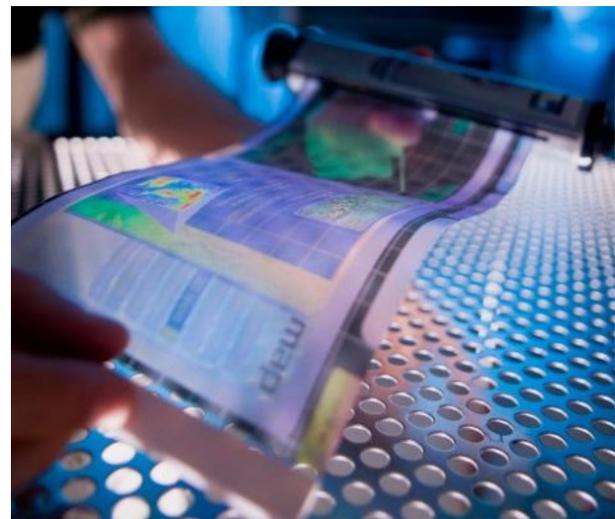
El interés en el desarrollo de los materiales semiconductores orgánicos inició su crecimiento en la década de 1970, cuando se realizaron importantes hallazgos relacionados con la conductividad eléctrica en materiales poliméricos. Entre ellos, la síntesis de nitruro de azufre polimérico, primer material con propiedades superconductoras a temperaturas bajas que podía incrementar su conductividad eléctrica al ser dopado con átomos de yodo [1,2]. Por otro lado, Alan G. MacDiarmid, Alan J. Heeger y Hideki Shirikawa [3,4] estudiaron y llevaron a cabo la polimerización del acetileno, convirtiéndolo en poliacetileno utilizando un catalizador de Ziegler-Natta. De esta reacción se obtuvieron dos isómeros del polímero: la forma cis, y la forma trans. Se descubrió que el trans-poliacetileno, al ser expuesto a vapores de yodo, presentaba propiedades de conductividad eléctrica. En el año 2000 Shirikawa, MacDiarmid y Heeger fueron galardonados con el Premio Nobel de Química por el descubrimiento y desarrollo de polímeros conductores. A partir de estos hallazgos fue posible el inicio de la era de la electrónica orgánica aplicada a los dispositivos electrónicos y al área energética.

El enorme progreso en el desarrollo de aplicaciones en este campo ha llegado a la construcción de diversos dispositivos (Ver Figura 1) tales como circuitos con transistores orgánicos de tipo efecto-campo integrados y de bajo costo (OFETs, abreviación del idioma inglés de *Organic Field-Effect Transistors*) y los diodos orgánicos de emisión de luz (OLEDs, abreviación del idioma inglés de *Organic Light-Emitting Diodes*) los cuales ya se han comercializado en aplicaciones como pantallas de televisión de alta definición. Por último, se encuentran las celdas

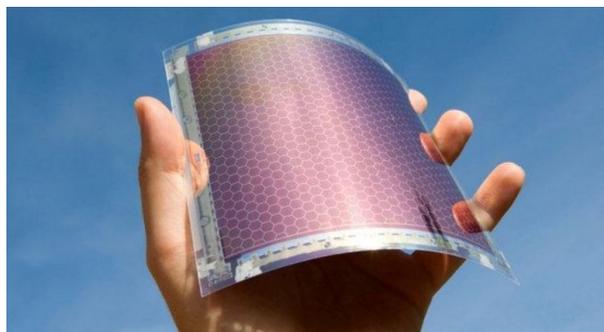
orgánicas fotovoltaicas (OPVs, abreviación del idioma inglés de *Organic Photovoltaic Cells*) las cuales se han fabricado con grandes áreas superficiales y también se han utilizado en ellas sustratos con materiales plásticos. La incorporación de los materiales semiconductores orgánicos al estudio y construcción de dispositivos “flexibles” ha abierto las puertas hacia la investigación de un nuevo campo de aplicación conocido como *electrónica flexible*. En este nuevo campo de investigación se pretende aprovechar la flexibilidad de películas delgadas elaboradas a partir de diversos compuestos orgánicos, con la finalidad de crear dispositivos que puedan almacenar y transmitir información y al mismo tiempo que puedan ser transportados con facilidad al tener la capacidad de doblarse sin que se dañe su estructura electrónica [5-7].



(a)



(b)



(c)

Figura 1. Aplicaciones en dispositivos optoelectrónicos de semiconductores orgánicos: (a) OLEDs, (b) OFETs y (c) OPVs

Dentro de la clasificación de los semiconductores orgánicos existen dos grandes grupos de compuestos: los materiales de bajo peso molecular, conocidos como moléculas pequeñas y los materiales poliméricos (Ver Figura 2). Una de las características más importantes de estos compuestos es que poseen sistemas conjugados de electrones π , en donde la distribución de las cargas juega un papel importante al momento de transferir los electrones. Se ha observado que las excitaciones electrónicas más bajas ocurren en las moléculas que tienen enlaces conjugados donde se llevan a cabo transiciones de tipo $\pi \rightarrow \pi^*$ con una energía de banda prohibida, mejor conocida como band gap (E_g), observada entre 1.5 y 3.0 eV, lo que provoca fenómenos ópticos como absorción y emisión en el rango de la luz visible. Esto representa una gran ventaja en la construcción de diversos dispositivos optoelectrónicos como los antes mencionados, debido a la facilidad del uso de la radiación solar como fuente de activación de estos materiales.

La energía de banda prohibida en los materiales semiconductores orgánicos se define como la diferencia energética entre dos orbitales moleculares llamados HOMO (abreviación del idioma inglés de *Highest Occupied Molecular Orbital*) y LUMO (abvia-

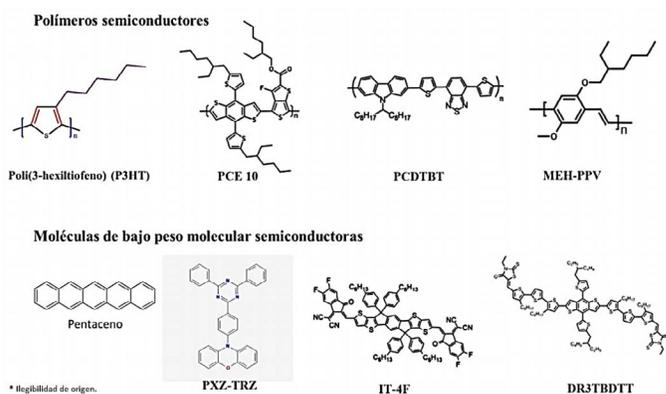


Figura 2. Estructuras químicas de semiconductores orgánicos: moléculas pequeñas y polímeros comúnmente utilizados [8]

ción del idioma inglés de *Lowest Unoccupied Molecular Orbital*), los cuales podrían compararse con el modelo de bandas de los semiconductores inorgánicos. De acuerdo con la teoría de orbitales frontera, en el orbital HOMO se encuentran los electrones de la última capa de valencia, por lo que la suma de todos los orbitales HOMO en un sistema π -conjugado forma la banda de valencia. Por otro lado, el orbital LUMO se encuentra vacío y podrá alojar electrones, por lo que se puede decir que la suma de todos los orbitales LUMO forma la banda de conducción. A medida que se incrementa el número de enlaces π -conjugados en una molécula, también aumenta el número de orbitales moleculares, los cuales reducen la energía del band gap, como se muestra en la Figura 3 [9].

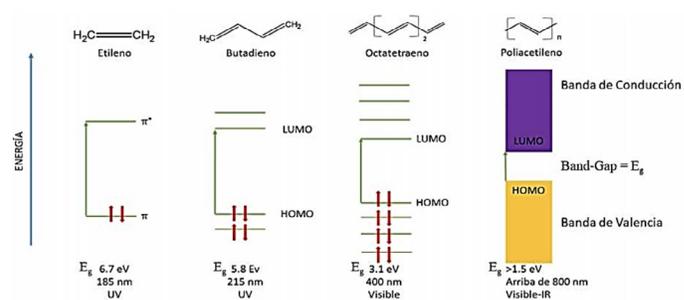


Figura 3. Niveles de energía y formación de bandas en moléculas conjugadas

Como resultado de cálculos computacionales de simulación molecular y experimentos de síntesis orgánica previamente realizados, se ha observado que la funcionalización de moléculas orgánicas (añadiendo a su estructura diferentes sustituyentes con propiedades específicas) modifica de manera importante la distribución de cargas de electrones y al mismo tiempo sus propiedades electrónicas [10,11]. Debido a estas observaciones, la funcionalización de moléculas orgánicas se ha utilizado como una estrategia eficaz en síntesis química para disminuir los valores del *band gap* en materiales orgánicos. Los principales sustituyentes utilizados son los llamados grupos atractores de electrones que, al sustituirse en una molécula orgánica, como en el caso de los anillos de pirrol (Ver Figura 4), en conjunto, forman lo que se conoce como conjunto donador-aceptador de electrones, técnica con la que se mejora el transporte de estos a través de la molécula [12].

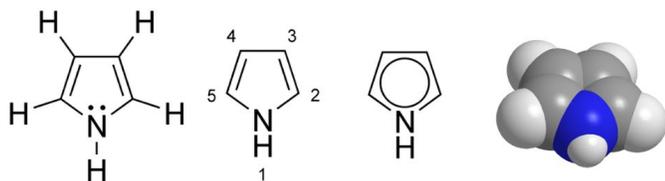


Figura 4. Diferentes representaciones de la estructura de un anillo de pirrol

Los complejos orgánicos conocidos como conjunto donador-aceptador (D-A) son una clase única y emergente de materiales electrónicos de naturaleza orgánica de moléculas pequeñas. Los donadores de electrones (D) son moléculas conjugadas con altos niveles de energía HOMO, mientras que los aceptadores de electrones (A) son moléculas conjugadas con bajos niveles de energía LUMO. Cuando las unidades D-A se unen covalentemente para formar moléculas D-A conjugadas, las energías HOMO y LUMO, así

como los espectros de absorción y las energías de banda prohibida se pueden ajustar debido a las interacciones D-A, confiriendo propiedades semiconductoras de tipo *p* y *n* al nuevo compuesto [13,14]. En la Figura 5 se muestra la formación de un complejo D-A en un soporte mesoporoso, en donde el tiofeno fungen como donador de electrones π y el dinitro-9-fluoreno es el aceptador de electrones π . La aplicación reportada de este complejo, junto con el soporte mesoporoso, es la remoción de compuestos azufrados derivados del Diesel [15].

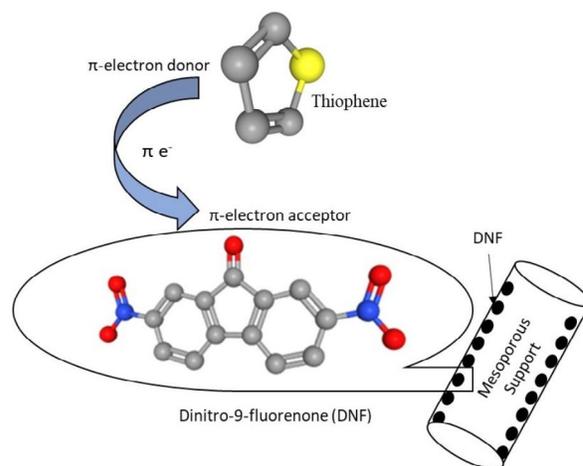


Figura 5. Mecanismo de formación de un complejo D-A en un adsorbente mesoporoso [15]

Anteriormente, en nuestro grupo de trabajo se han sintetizado compuestos orgánicos a partir de moléculas con anillos de pirrol trisustituidos, funcionalizándolas con diferentes grupos electroattractores y electrodonadores de electrones como el $-\text{NO}_2$ y $-\text{NH}_2$, respectivamente, con la finalidad de observar su comportamiento y propiedades. Los resultados de los estudios de sus propiedades electrónicas han sido interesantes, ya que para el caso de los valores de *band gap* obtenidos se encuentran en el rango de 2.27 a 3.19 eV. [16,17]. Retomando estos resultados, nuestro interés se enfoca en plantear un nuevo estudio de rutas de síntesis para

obtener nuevos compuestos semiconductores orgánicos con el objetivo de evaluar sus propiedades electrónicas, en particular, su energía de *band gap*.

Nuestro enfoque está dirigido al estudio de compuestos conocidos como organo-fulerenos a los que anteriormente se han evaluado sus propiedades electrónicas a partir de cálculos teóricos y que cuyos resultados han sido interesantes en cuanto al efecto que tiene la adición de anillos de pirrol en el fullereno. La reacción propuesta para realizar esta funcionalización se basa en utilizar sales de diazonio, cuyo método más utilizado para su preparación es el tratamiento de aminas aromáticas con ácido nitroso a temperaturas por debajo de 5 °C. El ácido nitroso es generado a partir de una solución de nitrito de sodio (NaNO_2) o un nitrito orgánico y un ácido como el clorhídrico (HCl) o el sulfúrico (H_2SO_4) (Ver Figura 6).

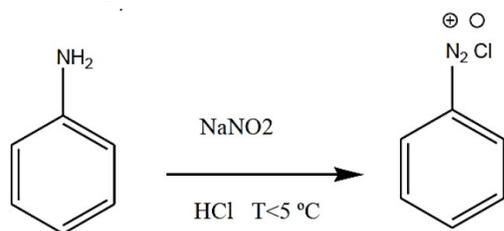


Figura 6. Reacción de formación de sales de diazonio

Síntesis y caracterización del compuesto 1-(p-fulereno-fenil)-2,5-difenilpirrol (III)

Aplicado a nuestro trabajo, el compuesto con el grupo $-\text{NH}_2$ que utilizamos es el 1-(p-amino-fenil)-2,5-difenilpirrol (II) y HCl concentrado, los cuales se colocaron en un matraz de bola en agitación magnética constante durante 2 h con la finalidad de disolver la mayor parte del compuesto amina. Posteriormente, se preparó una solución de NaNO_2 en agua. Tanto la solución del compuesto amina como la de NaNO_2 se en-

friaron a 0 °C. Al alcanzar esta temperatura se añadió el fullereno y al mismo tiempo se adicionó la solución de NaNO_2 , dejando la solución en agitación magnética constante durante 15 días. El producto de la reacción fue lavado en repetidas ocasiones con agua desionizada y secado al vacío, obteniéndose un polvo de color café oscuro. La estructura del compuesto obtenido fue caracterizada por diferentes técnicas espectroscópicas, como Infrarrojo por transformada de Fourier (FT-IR, abreviación del idioma inglés de *Fourier Transform Infrared Spectroscopy*) y Resonancia Magnética Nuclear en sólido (RMN) (debido a su insolubilidad en diferentes disolventes polares y no polares), corroborando de esta manera la presencia del compuesto funcionalizado. También se determinó su estabilidad térmica a través de técnicas como Termogravimetría (TGA, abreviación del idioma inglés de *Thermogravimetric Analysis*) y Calorimetría Diferencial de Barrido (DSC, abreviación del idioma inglés de *Differential Scanning Calorimetry*), obteniéndose un punto de fusión de 205.23 °C. En la Figura 7 se muestra el esquema de reacción de esta funcionalización.

Posteriormente, se determinó el valor de la energía de *band gap* del compuesto obtenido. Para ello, se realizaron las optimizaciones de geometría usando el método DFT (abreviación del idioma inglés de *Density Functional Theory*) empleando la paquetería del programa GAUSSIAN 16 con el fun-

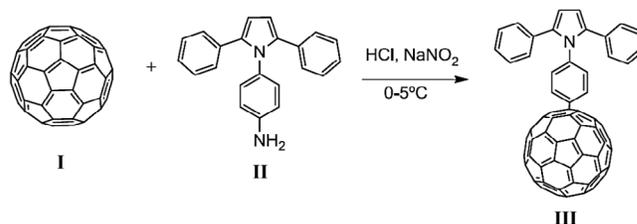


Figura 7. Reacción de funcionalización de fullereno a partir de las sales de diazonio

cional B3PW91 y la función base 6-31G** que son adecuados para modelar moléculas orgánicas con una buena aproximación, reportando un error estándar del 10% [18] (Ver Figura 8). El valor obtenido de band gap fue de 2.160 eV. Como se había comentado anteriormente, se realizaron análisis para determinar los efectos de introducir en la molécula de pirrol trisustituido grupos electroattractores como el $-\text{NO}_2$ (Ver Tabla 1a).

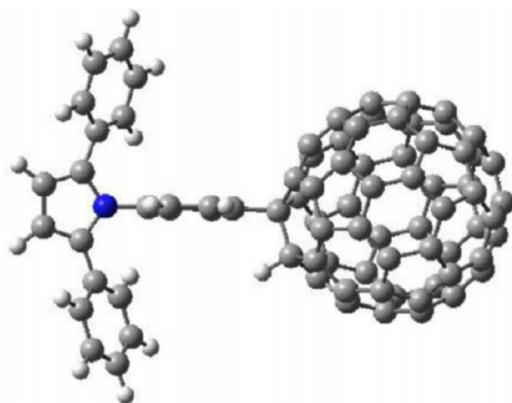


Figura 8. Geometría optimizada del compuesto derivado de fulereno (III)

Se observó que el efecto de este grupo en la molécula es tan fuerte que generó un dipolo, promoviendo la corriente de cargas a lo largo de toda la estructura y evidenciando un comportamiento semiconductor con un valor de E_g de 2.884 eV. Por otro lado, la presencia de un grupo amino $-\text{NH}_2$ en la estructura (Ver Tabla 1b), incrementó considerablemente el valor de band gap, posiblemente por la naturaleza donadora de electrones de este grupo, lo cual provoca un efecto neto de incrementar la densidad de carga en una molécula a través del átomo de carbono al que está unido. Como resultado se obtuvo un valor de E_g de 4.463 eV. Los valores de HOMO-LUMO de cada uno de estos compuestos, así como las imágenes de su geometría optimizada, se muestran en la Tabla 1.

Tabla 1. Valores de energía HOMO-LUMO y energía de banda prohibida de los compuestos (a) derivado de pirrol con el grupo $-\text{NO}_2$, (b) II y (c) III

Compuesto	HOMO (eV)	LUMO (eV)	E_g (eV)
(a)	-5.496	-2.612	2.884
(b)	-5.034	-0.571	4.463
(c)	-5.450	-3.290	2.160

Por otro lado, para obtener el valor de E_g de forma experimental se utilizó el método de Kubelka-Munk, que utiliza la espectroscopia de absorción UV-Vis, en donde el valor de E_g se atribuye a la transición de energía más baja que tiene lugar por la absorción de un fotón. Para determinar este valor, el método consiste en construir un gráfico de la función de Reemisión $(F(R_\infty) \cdot hv)^2$ con respecto a la energía (hv), realizando una extrapolación de la pendiente de la curva con el eje x para obtener el punto de intersección y con ello el valor de *band gap*. Para el caso de nuestro compuesto, se obtuvo un valor de 1.86 eV, como se muestra en la Figura 9. Ahí se observa la presencia de dos posibles transiciones: la primera en 1.75 eV, la cual puede ser asociada a lo que se conoce como umbral de la absorción óptica y la segunda transición en 1.86 eV, que es la que corresponde al valor del *band gap*.

Estos resultados evidencian que este derivado es un buen candidato para utilizarse en dispositivos fotovoltaicos, debido a la

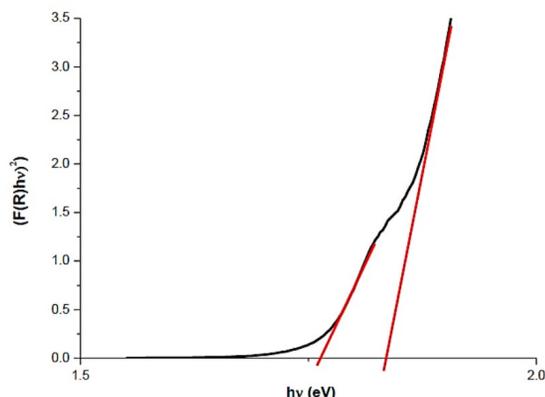


Figura 9. Energía de banda prohibida (E_g) para el compuesto derivado de fulereno: método de Kubelka-Munk absorción de la luz causada por su simetría reducida, lo que da como resultado las transiciones de menor energía del derivado de fulereno. Para ello es importante realizar películas delgadas, con la finalidad de evaluar propiedades eléctricas de la película formada.

Conclusiones

Los semiconductores orgánicos son una clase muy importante de materiales. Se pueden modificar sus propiedades químicas y su energía de banda prohibida cambiando los grupos funcionales en su estructura.

El método de síntesis con sales de diazonio se aplicó exitosamente para funcionalizar la molécula de pirrol 2,5-disustituido con una molécula de fulereno.

El análisis con el método de Kubelka-Munk y el estudio teórico DFT muestran que el nuevo compuesto sintetizado presenta un comportamiento semiconductor, abriendo la posibilidad de fabricar películas delgadas y ser utilizado como dispositivo optoelectrónico.

Agradecimientos

Giovanna Angélica Vázquez Hernández desea agradecer a CONACyT por la beca

de doctorado otorgada (No. De referencia 486055) y al IIM-UNAM por todas las facilidades y apoyo brindado para esta investigación. También se agradece a Gerardo Cedillo Valverde, Miguel Ángel Canseco Martínez y Eriseth Reyes Morales, por su asistencia técnica al realizar los análisis en espectroscopía de RMN, FT-IR y análisis térmicos, respectivamente.

Referencias

- [1] Baughman, R. H., Apgar, P. A., Chance, R. R., MacDiarmid, A. G., & Garito, A. F. Shear transformation to produce a new phase of polymeric sulfur nitride (SN) x. *The Journal of Chemical Physics*, 66(2), (1977), 401-409.
- [2] Greene, R. L., Street, G. B., & Suter, L. J. Superconductivity in polysulfur nitride (SN)X. *Physical Review Letters*, 34(10), (1975). 577-579.
- [3] Shirakawa, H., Ito, T., & Ikeda, S. Raman scattering and electronic spectra of poly(acetylene). *Polymer Journal*, 4(4), (1973). 460-462.
- [4] Shirakawa, H., Louis, E. J., MacDiarmid, A. G., Chiang, C. K., & Heeger, A. J. Synthesis of electrically conducting organic polymers: Halogen derivatives of polyacetylene, (CH)x. *Journal of the Chemical Society, Chemical Communications*, 16, (1977), 578-580.
- [5] Tang, C.W., Two-layer organic photovoltaic cell, *Appl. Phys. Lett.*, 48, (1986), 183-185.
- [6] Silinsh, E.A., *Organic Molecular Crystals: Their electronic states*, Springer, Berlin, (1980).
- [7] Pope, M. and Swenberg, C.E., *Electronic Processes in Organic Crystals and Polymers*. Clarendon Press, Oxford, (1982).
- [8] Burroughes, J.H., Bradley, D.D.C., Brown, A.R., Marks, R.N., Mackay, K., Friend R.H., Burn, P.L., Holmes, A.B., Light-emitting diodes based on conjugated polymers, *Nature*, 347, (1990), 539-541.
- [9] Estrada Flores, S. L., Garcias-Morales, C., Mirón Velázquez, R. S., Pérez Berumen, C. M. y de la Cruz Duran, F. N.. Una introducción a la Electrónica Orgánica. *Educación Química*, 33(2), (2022).
- [10] Souto M., R.M., Hinkelman, K., Eckert, H., Wudl, F., Synthesis and characterization of two regiochemically defined poly (dialkylbiothiophenes): a comparative study, *Macromol.*, 23, (1990), 1268-1279.
- [11] Fomina L., Zaragoza, G., Bizarro, M., Godínez J., Zaragoza, I. P, Salcedo, R., Semiconductor behavior of 2,5-aromatic disubstituted pyrroles, viewed from an experimental and theoretical perspective, *Materials Chemistry and Physics*, 124, (2010), 257-263.
- [12] Ruiz-Espinoza, A., Ramos, E., Salcedo, R., Theoretical description of benzene-fullerene and its organometallic derivative, *Computational and Theoretical Chemistry*, 1016, (2013), 36-41.
- [13] Park, S. K., Kim, J. H. & Park, S. Y. Organic 2D optoelec-

tronic crystals: charge transport, emerging functions, and their design perspective. *Adv. Mater.* 30, 1704759 (2018).

[14] Zhang, D., & Heeney, M. (2020). Organic Donor-Acceptor Systems. *Asian Journal of Organic Chemistry*, 9(9), 1251-1251.

[15] Cruz, A., Boahene, P. & Vedachalam, S., & Dalai, A... Mesoporous Adsorbents for Desulfurization of Model Diesel Fuel: Optimization, Kinetic, and Thermodynamic Studies. *Fuels*, 1, (2020), 47-58.

[16]. Almaraz-Girón M. A., Aguilar-Lugo C., Vázquez-Hernández G. A., Fomine S., Salcedo R., Alexandrova L., Fomina L., Synthesis of 1,2,5-substituted pyrrole derivatives by a modification of the Reisch-Schulte reaction, *J. Mol. Struct.*, 1300, (2024), 137232-

[17] Monroy, O., Fomina L., Sánchez-Vergara, M. E., Gaviño R., Acosta, A., Álvarez Bada, J. R., Salcedo R., Synthesis, characterization and semiconducting behavior of N,2,5-tri-substituted pyrroles, *J. Mol. Struct.*, 1171, (2018), 45-53.

[18] Ari, H., Büyükmumcu, Z., Comparison of DFT functionals for prediction of band gap of conjugated polymers and effect of HF exchange term percentage and basis set on the performance., *Comput. Mater. Sci.*, 138, (2017), 70-76.

Cuando la física y la inteligencia artificial se unen para modelar fluidos

Zoila Sánchez López, Gabriela Berenice Díaz Cortés, Galileo Domínguez Zacarías

Instituto Mexicano del Petróleo, Eje Central Lázaro Cárdenas Norte 152, Col. San Bartolo Atepehuacán, Gustavo A. Madero, C.P. 07730, Ciudad de México
poszsanchez@imp.mx, gbdiaz@imp.mx, gdzacari@imp.mx

Resumen

Este artículo explora la convergencia entre la física y la inteligencia artificial en el modelado de fluidos, centrándose en el uso de redes neuronales artificiales (RNA) para resolver problemas de dinámica de fluidos. Se analizan los beneficios de emplear redes neuronales en este contexto, se ofrece una introducción concisa a este tipo de redes y se explican algunos términos básicos de su funcionamiento. Se aborda, tanto el enfoque tradicional en el modelado de fluidos, como las aplicaciones de las redes neuronales en este campo, concluyendo con una breve reflexión sobre el potencial de esta metodología emergente.

Palabras clave:

RNA, métodos numéricos, dinámica de fluidos

Introducción

Los métodos numéricos tradicionales para el análisis de dinámica de fluidos, como la Dinámica de Fluidos Computacional (CFD, por sus siglas en inglés), han sido comunes debido a su simplicidad y capacidad para proporcionar detalles del flujo. Sin embargo,

tienen limitaciones, especialmente en sistemas complejos o que requieren modelado preciso. Ejemplos de esto incluyen la simulación de la dinámica del flujo sanguíneo y su interacción con la pared arterial, que requiere el desarrollo de modelos capaces de capturar las variaciones durante el ciclo cardíaco (Caballero, 2013). Otro ejemplo es el modelado de la dispersión de contaminación atmosférica urbana, donde existen desafíos para capturar completamente todos los aspectos físicos relevantes para el modelado en entornos urbanos realista (Pantusheva, 2022).

Para el modelado de estos fenómenos, algunos métodos requieren la generación de una malla, que es una estructura de puntos que cubre y divide la región en donde se modelan los fenómenos en elementos más pequeños. La generación de la malla provoca limitaciones a la simulación que incluyen el tiempo y los recursos computacionales requeridos. Estas limitaciones, sumadas al crecimiento exponencial de la Inteligencia Artificial (IA) en los últimos años junto con la introducción de técnicas de Aprendizaje Profundo (AP), han llevado a que cada vez

más autores utilicen métodos basados en datos y recientemente basados en modelos físicos, para la resolución de problemas de dinámica de fluidos en lugar de los métodos tradicionales basados en mallas.

Las Redes Neuronales Artificiales (RNA) se han utilizado para predecir características del flujo alrededor de geometrías simples de manera precisa y rápida, este enfoque tiene el potencial de reducir significativamente el tiempo computacional en comparación con los métodos de CFD (Guo, 2016). También han demostrado ser eficaces en la predicción de flujos tridimensionales (Mohan, 2019), así como en la predicción de flujos no estacionarios bajo distintas dinámicas de flujo, mostrando concordancia entre los resultados obtenidos con las RNA y los datos de CFD reales (Han R. W., 2019). Estudios adicionales han explorado su utilidad en la predicción de flujos no estacionarios (Portal-Porras K. F.-G.-F., 2023) y en la predicción de flujos no estacionarios con geometrías móviles (Han R. K., 2021). Las RNA son poderosas herramientas computacionales que destacan por su capacidad para aprender, generalizar y adaptarse. La capacidad de generalización permite que la red neuronal produzca resultados aceptables para entradas no vistas durante el entrenamiento, lo que posibilita la resolución de problemas complejos a gran escala que de otra manera serían difíciles de abordar, como la predicción del clima utilizando análisis de datos masivos (Reddy, 2017) y la predicción en tiempo real de sistemas (Fayaz, 2023).

Su capacidad de adaptabilidad les permite ajustar sus parámetros para enfrentar cambios en el entorno circundante, garantizando su efectividad incluso en entornos

no estacionarios, es decir, en donde las variables cambian con el tiempo. Además, su naturaleza no lineal les permite capturar relaciones complejas entre las entradas y las salidas, lo que resulta fundamental en campos con fenómenos no lineales (Haykin, 1998). Por ejemplo, el flujo multifásico en medios porosos heterogéneos (Yan, 2022) y flujos a alta velocidad (Mao, 2020).

Las RNA ofrecen una ventaja significativa en la resolución de ecuaciones diferenciales, ya que su complejidad computacional no aumenta rápidamente con el incremento de puntos de muestreo, a diferencia de los métodos numéricos convencionales. La complejidad computacional se refiere a la cantidad de recursos computacionales necesarios para resolver una tarea dada, incluyendo tanto el tiempo de cómputo (cuántas operaciones debe realizar la computadora) como la memoria requerida (cuánta información debe almacenar la computadora durante el proceso de resolución). Este enfoque de RNA es además versátil y puede aplicarse a sistemas definidos en límites de formas arbitrarias (Yadav, 2015).

¿Qué son las RNA y cómo funcionan?

En el contexto del sistema nervioso, las neuronas son las unidades fundamentales, básicas y esenciales del cerebro, cada una compuesta por un cuerpo celular, dendritas y un axón (ver Figura 1).

El cuerpo celular contiene el núcleo y es donde se lleva a cabo la síntesis de proteínas. Las dendritas reciben señales de otras neuronas, mientras que el axón conduce las señales eléctricas, conocidas como potenciales de acción, hasta las terminales presinápticas. Estas señales son uniformes, y el

cerebro las interpreta según los patrones de señales recibidas, determinando así el tipo de información transmitida.

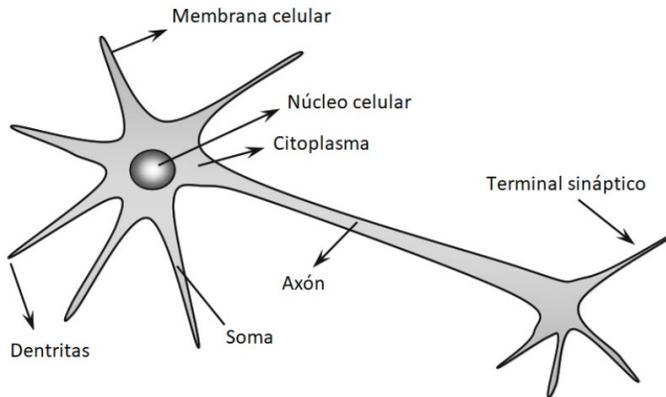


Figura 1. Partes que conforman una neurona biológica. Imagen editada de (Silva, 2016)

Análogamente, las RNA, inspiradas en las redes neuronales biológicas del cerebro humano, se componen de elementos que imitan las funciones básicas de las neuronas biológicas.

En los años formativos de las RNA (1943-1958), varios investigadores destacan por sus contribuciones pioneras, entre ellos McCulloch y Pitts (1943) por crear el primer modelo matemático inspirado en las neuronas biológicas, iniciando así el desarrollo de la neurona artificial. Esta introducción condujo al surgimiento de las RNA, utilizando neuronas simplificadas modeladas según estructuras biológicas para realizar tareas computacionales.

Otro de los pioneros y considerado el fundador de la neurocomputación fue Rosenblatt, quien propuso en 1958 el perceptrón, que es la forma más simple de una red neuronal utilizada para el reconocimiento de patrones. Básicamente, consiste en una sola neurona con pesos sinápticos y sesgo ajustables.

Las RNA se pueden utilizar como predictores. A partir de datos de entrada producen una salida que se ajusta iterativamente comparándola con valores conocidos, hasta que la predicción se aproxima considerablemente al valor esperado. A continuación, se ofrecen más detalles sobre el funcionamiento de las RNA.

Una neurona es una unidad de procesamiento de información fundamental para el funcionamiento de una red neuronal, como se muestra en la Figura 2. Consiste en una combinación lineal de las entradas ($x_1; x_2; \dots; x_m$). Cada entrada está asociada con un peso ($w_{k1}; w_{k2}; \dots; w_{km}$), que son valores desconocidos que determinan la importancia de los valores iniciales en el cálculo. Durante el entrenamiento de la neurona, estos pesos se modifican para minimizar el error. Los pesos se multiplican por las entradas y se les suma un sesgo (b_k). Este sesgo permite a la neurona realizar un desplazamiento o ajuste.

Después de combinar las entradas ponderadas y el sesgo, se aplica una función de activación ($\varphi(\cdot)$). Esta función cambia dependiendo del tipo de problema que se tiene, para que la neurona prediga correctamente las salidas esperadas. La salida resultante \hat{y}_k de la función de activación representa la predicción o resultado final de la neurona.

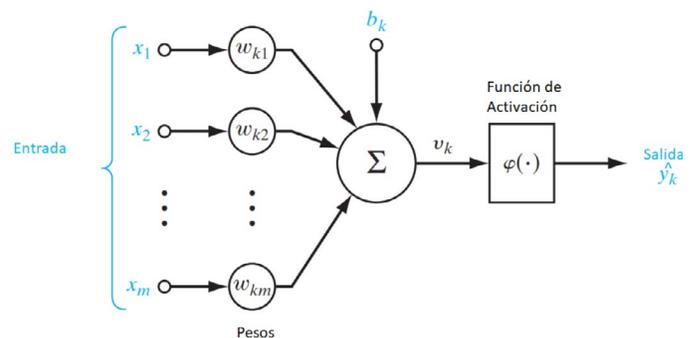


Figura 2. Esquema de la unidad fundamental de las RNA la Neurona. Imagen modificada de (Simon, 2009)

En términos matemáticos podemos describir la salida de la neurona con la siguiente ecuación:

$$\hat{y}_k = \varphi(\omega_{k1}x_1 + \omega_{k2}x_2 + \dots + \omega_{kn}x_m + b_k). \quad (1)$$

Cada neurona realiza las operaciones matemáticas descritas anteriormente, generando una salida como se muestra en la ecuación (1). Esta salida se convierte entonces en la entrada para cada neurona de la capa siguiente, y así sucesivamente hasta alcanzar la capa de salida.

Con esta unidad básica se puede construir diferentes arquitecturas de RNA. Un ejemplo es la red perceptrón multicapa (ver Figura 3), que consta de una capa de entrada, dos o más capas ocultas y una capa de salida. Cada capa está constituida por varias neuronas, y la red está completamente conectada, es decir, cada neurona en cualquier capa de la red está conectada a todas las neuronas en la capa anterior. El flujo de señal a través de la red avanza en dirección hacia adelante, de izquierda a derecha.

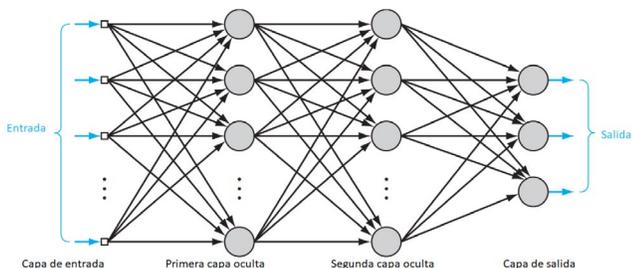


Figura 3. Arquitectura de un perceptrón multicapa con dos capas ocultas. Imagen modificada de (Simon, 2009)

Las RNA tienen la capacidad de aprender de la experiencia, generalizar conocimientos de ejemplos anteriores a nuevos ejemplos y abstraer las características principales de conjuntos de datos.

La función de costo se utiliza para medir el rendimiento del modelo, comúnmente es el error cuadrático medio (MSE, por sus siglas

en inglés). Para todo el conjunto de datos de entrada etiquetado, el conjunto de datos comprende un vector con una etiqueta para cada ejemplo $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^m$ se calcula el promedio del MSE de todos los m ejemplos de la siguiente manera:

$$MSE = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (y_i - \hat{y}_i)^2. \quad (2)$$

Cuanto más se acerque la predicción \hat{y}_i al valor de y_i , menor será el error y se espera que el modelo funcione mejor.

Ahora la pregunta es cómo encontrar los parámetros óptimos ω y b que produzcan una buena predicción. Esta tarea puede interpretarse como un problema de optimización con el objetivo de minimizar la función de costo $L_{\omega, b}$. Sustituyendo (1) en (2) se obtiene la función de costo $L_{\omega, b}$ en función de los parámetros ω y b .

$$L(\omega, b) = MSE = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (y_i - \varphi(\omega_{k1}x_1 + \omega_{k2}x_2 + \dots + \omega_{kn}x_m + b_k))^2. \quad (3)$$

Encontrar los parámetros óptimos de la RNA puede realizarse mediante cualquier técnica de optimización. Una opción popular es el algoritmo iterativo de descenso de gradiente, el cual encuentra un mínimo local de una función tomando pasos proporcionales al negativo del gradiente de la función en un punto dado. El gradiente apunta en la dirección del ascenso más pronunciado, por lo tanto, un pequeño paso en la dirección opuesta conduce a una minimización de la función.

Es decir, los pesos y los sesgos se actualizan de la siguiente manera:

$$\omega_{n+1} = \omega_n - \eta \nabla_{\omega} L(\omega, b), \quad (4a)$$

$$b_{n+1} = b_n - \eta \nabla_b L(\omega, b). \quad (4b)$$

Donde η es la tasa de aprendizaje o tamaño de paso, los términos $\nabla_{\omega} L_{\omega, b}$ y $\nabla_b L_{\omega, b}$ son las derivadas de la función de costo respecto

a los pesos y a los sesgos respectivamente. Esta actualización de pesos y sesgos se lleva a cabo hasta que la función de pérdida sea tan cercana a cero como queramos.

La diferencia clave entre el aprendizaje automático y la resolución de un problema de optimización es que el primero adopta un modelo utilizando los ejemplos de entrenamiento y luego lo evalúa en el conjunto de prueba para hacer predicciones sobre datos previamente no vistos.

La mayoría de los algoritmos de aprendizaje automático se pueden descomponer en las siguientes características: un conjunto de datos, una función de costo, un procedimiento de optimización y un modelo parametrizado. Generalmente, la función de costo define un criterio de optimización relacionando los datos etiquetados con los parámetros del modelo. Además, el procedimiento de optimización busca los parámetros del modelo que representen mejor los datos proporcionados.

Modelado tradicional de fluidos

La Dinámica de Fluidos Computacional (CFD, por sus siglas en inglés *Computational Fluid Dynamics*) es un campo que se enfoca en la simulación numérica de flujos de fluido, transferencia de calor y fenómenos relacionados, como reacciones químicas y aeroacústica. Surge de la combinación de la mecánica de fluidos y el cálculo numérico, utilizando ecuaciones derivadas de la mecánica de fluidos y resolviéndolas con métodos numéricos.

En los últimos años, el CFD ha ganado importancia como herramienta para analizar sistemas que involucran fenómenos físicos y químicos asociados al movimiento de

fluidos. Estos fenómenos pueden incluir la transferencia de masa, cantidad de movimiento, energía y especies químicas, ya sea reactivas o no, entre diferentes regiones o intervalos de tiempo. Este auge es debido, en parte, a que cada día se tienen mejores equipos de cómputo, con más capacidad (memoria y rapidez) y con menor costo, así como algoritmos y modelos que pueden representar de manera confiable los fenómenos presentes en el flujo de fluidos del sistema a analizar. Además, el análisis con esta herramienta puede ser más económico que el trabajo experimental, tanto en tiempo como en recursos económicos. Sin embargo, su uso sigue siendo mayoritariamente complementario, ya que, en determinado momento, se tienen que validar las predicciones con datos experimentales o hacer una verificación con datos de correlaciones, en los que no siempre se puede tener mediciones detalladas de parámetros físicos y químicos del sistema.

Para el modelado de los fluidos se han desarrollado diversos métodos, entre los que tenemos los métodos de discretización como el método de las diferencias finitas, el método de los elementos finitos y el método de los volúmenes finitos, siendo este último el más utilizado en CFD. Con estos métodos, se intercambia el dominio continuo por un dominio discreto, donde un conjunto de volúmenes de control es utilizado para representar el dominio original.

El método de volúmenes finitos propone una forma de llevar a cabo esa discretización. En particular, establece que los valores discretos de φ quedarán descritos por un conjunto de ecuaciones algebraicas que relacionan el valor de la variable en un punto con el valor en los puntos vecinos. La

forma en que se transmite la información entre esos nodos requiere de algún tipo de aproximación, que en el caso de volúmenes finitos es mediante esquemas conservativos que evalúan los flujos a través de superficies de control.

Las RNA han surgido para complementar a los métodos clásicos. En años recientes, junto con numerosas aplicaciones prácticas en diferentes áreas del conocimiento, nuevas y diferentes investigaciones han permitido avances teóricos en RNA. Algunas aplicaciones se muestran en la siguiente sección.

Modelado y aplicaciones de fluidos mediante RNA en distintas áreas

Las RNA han comenzado a utilizarse para resolver ecuaciones diferenciales parciales (Raissi, 2019), como la ecuación de Reynolds estacionaria unidimensional (Almqvist, 2021). Esta ecuación describe el flujo de un fluido con viscosidad y densidad constantes en una película delgada, típicamente entre dos superficies en movimiento relativo. La ecuación modela cómo la presión del fluido varía a lo largo del espesor de la película lubricante, proporcionando la distribución de presión en la interfaz entre las superficies.

La solución de esta ecuación puede aplicarse en sistemas mecánicos con movimiento relativo entre dos partes, como en el cálculo de la distribución de presión en cojinetes deslizantes lineales lubricados (ver Figura 4, izquierda). Estos lubricantes se utilizan para reducir la fricción y el desgaste, prolongando así la vida útil de los componentes mecánicos.

La solución proporcionada por la RNA muestra la distribución de presión en el eje y (ver Figura 4, derecha), mientras que en el eje

x se representa la posición adimensional. Esta solución se compara con la solución analítica (Almqvist, 2021).

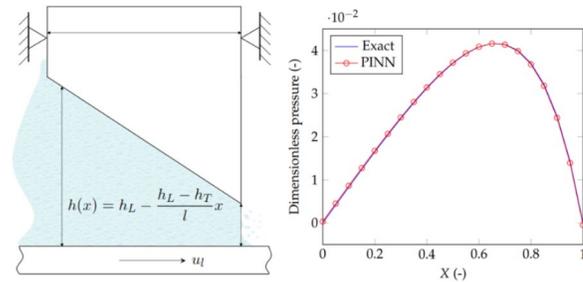


Figura 4. (Izquierda) geometría del cojinete deslizante lineal tiene una longitud l y se mueve con una velocidad u_l . La función de espesor de película h describe la geometría del cojinete deslizante lineal. (Derecha) comparación entre la solución obtenida por la RNA (línea roja con marcadores circulares) y la solución exacta obtenida por integración (línea continua azul). Imagen tomada de (Almqvist, 2021)

También se han utilizado las RNA en diversos campos, uno de ellos es el de la medicina (Ver Figura 5) se utiliza para ayudar a evaluar y guiar la terapia a pacientes con fibrilación auricular, una arritmia cardíaca común y un importante problema de salud, cuyos mecanismos no se comprenden completamente y cuyas terapias clínicas tienen resultados insatisfactorios a largo plazo (Roy, 2020).

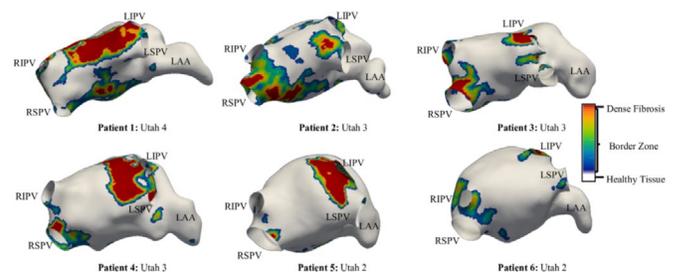


Figura 5. Distribución de fibrosis específica del paciente, en 6 pacientes con fibrilación auricular (FA) con puntajes de Utah de 2 a 4. Las regiones fibrosas están codificadas por colores para mostrar tejido fibroso denso (rojo) rodeado por una Zona de Transición (BZ) de propiedades intermedias. El atrio sano se muestra en blanco. LIPV: vena pulmonar inferior izquierda, RIPV: vena pulmonar inferior derecha, LSPV: vena pulmonar superior izquierda, RSPV: vena pulmonar superior derecha y LAA: Apéndice Auricular Izquierdo. Imagen tomada de (Roy, 2020)

Otro de los campos donde se han utilizado las RNA es en la simulación, desarrollando un solucionador de fluidos (Takahashi, 2019) para simular materiales viscosos y sus interacciones con objetos sólidos (ver Figura 6). Estos autores verificaron la precisión del método comparando los resultados con soluciones analíticas y demostrando la efectividad en diversos escenarios desafiantes.



Figura 6. Tres engranajes interactuando con fluidos viscosos de diferentes valores de viscosidad, el modelo tiene en cuenta los efectos de arrastre, que pueden acelerar y desacelerar las velocidades angulares de los engranajes. Imagen tomada de (Takahashi, 2019)

Otro ejemplo, en el mismo campo de simulación, es el desarrollo de una RNA diseñada para aprender a simular sistemas complejos a partir de datos. Esta RNA puede aprender a simular una amplia variedad de dominios físicos desafiantes que involucran fluidos, sólidos rígidos y materiales deformables interactuando entre sí (Sanchez-Gonzalez, 2020).

El estudio exploró cómo la RNA aprende a simular utilizando conjuntos de datos que incluyen tres materiales físicos diversos y complejos: agua, arena y un fluido viscoso deformable (ver Figura 7). Los resultados se validaron comparando la solución obtenida con datos medidos que representan la respuesta real de los materiales, utilizaron el error cuadrático medio (MSE) como su métrica principal, entre otras métricas. Además, se realizó una comparación cuantitativa con otro modelo utilizado también para simular la dinámica de fluidos, y se

encontró que el modelo propuesto es más simple, más preciso y tiene una mejor capacidad de generalización.

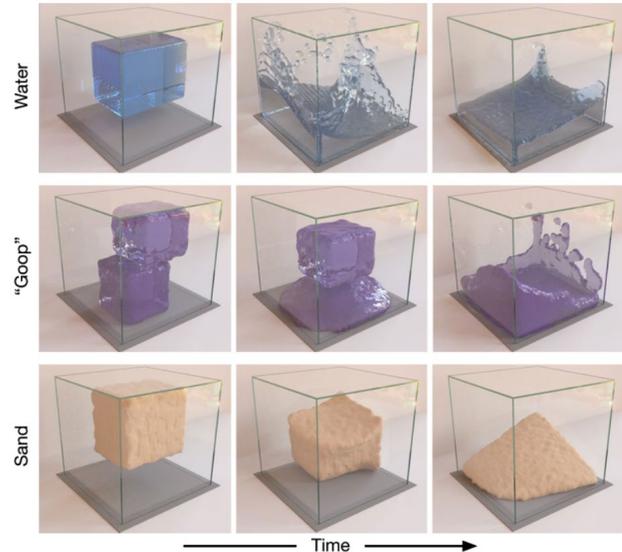


Figura 7. Simulación de materiales (Agua (WATER), fluido viscoso (GOOP) y arena (SAND)) eje y a resoluciones suficientes para la generación de imágenes de alta calidad, eje x tiempo. Imagen tomada de (Sanchez-Gonzalez, 2020)

Conclusiones

La Inteligencia Artificial (y especialmente el uso de RNA en la dinámica de fluidos) representa un avance significativo en la resolución de problemas complejos y promete mejorar la eficiencia y precisión en la simulación y análisis de estos sistemas. A pesar de que los primeros artículos sobre RNA fueron publicados hace más de 50 años, este campo ha sido objeto de investigación en profundidad desde principios de los años 90, y aún conserva un enorme potencial de investigación.

Mientras que el modelado tradicional de fluidos a través del CFD sigue siendo una herramienta fundamental en la ingeniería y la investigación, las RNA ofrecen una oportunidad emocionante para mejorar y complementar los enfoques existentes. Esto abre nuevas posibilidades en el análisis

de sistemas fluidodinámicos y proporciona una alternativa prometedora para abordar problemas complejos.

Las aplicaciones de las RNA para predecir características del flujo alrededor de geometrías simples de manera precisa y rápida tienen el potencial de reducir significativamente el tiempo computacional en comparación con los métodos de CFD (Guo, 2016). También han demostrado ser eficaces en la predicción de flujos tridimensionales (Mohan, 2019) y flujos no estacionarios bajo distintas dinámicas de flujo, mostrando concordancia entre los resultados obtenidos con las RNA y los datos de CFD reales (Han R. W., 2019). Estudios adicionales han explorado su utilidad en la predicción de flujos no estacionarios (Portal-Porras, 2023) incluyendo aquellos con geometrías móviles (Han R. K., 2021), en la resolución de ecuaciones diferenciales parciales (Almqvist, 2021) y en la simulación de fluidos (Takahashi, 2019), (Sanchez-Gonzalez, 2020), lo que refleja la amplia aplicabilidad potencial de las redes neuronales para resolver problemas en dinámica de fluidos, así como en diversas áreas de las ciencias y la ingeniería.

Referencias

- Almqvist, A. (2021). Fundamentals of physics-informed neural networks applied to solve the Reynolds boundary value problem. *Lubricants*.
- Anowar, F. &. (2020). Incremental neural-network learning for big fraud data. . *IEEE international conference on systems, man, and cybernetics (SMC)*.
- Caballero, A. D. (2013). A review on computational fluid dynamics modelling in human thoracic aorta. *Cardiovascular Engineering and Technology*.
- Fayaz, J. &. (2023). A deep neural network framework for real-time on-site estimation of acceleration response spectra of seismic ground motions. *Computer-Aided Civil and Infrastructure Engineering*.
- Guo, X. L. (2016). Convolutional neural networks for steady flow approximation. In *Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD international conference on knowledge discovery and data mining*, pp. 481-490.
- Han, R. K. (2021). Hybrid deep neural network based prediction method for unsteady flows with moving boundary. *Acta Mechanica Sinica*, 1557-1566.
- Han, R. W. (2019). A novel spatial-temporal prediction method for unsteady wake flows based on hybrid deep neural network. *Physics of Fluids*, 31(12).
- Haykin, S. (1998). *Neural networks: a comprehensive foundation*. Prentice Hall PTR.
- Kollmannsberger, S. D. (2021). *Deep learning in computational mechanics*. Springer International Publishing.
- Mao, Z. J. (2020). Physics-informed neural networks for high-speed flows. . *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*.
- Mohan, A. D. (2019). Compressed convolutional LSTM: An efficient deep learning framework to model high fidelity 3D turbulence. *arXiv preprint*.
- Pantusheva, M. M.-A. (2022). Air pollution dispersion modelling in urban environment using CFD: a systematic review. *Atmosphere*.
- Portal-Porras, K. F.-G.-A. (2021). Alternative artificial neural network structures for turbulent flow velocity field prediction. *Mathematics*.
- Portal-Porras, K. F.-G.-F. (2023). Hybrid LSTM+ CNN architecture for unsteady flow prediction. *Materials Today Communications*.
- Raissi, M. P. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational physics*.
- Reddy, P. C. (2017). Survey on weather prediction using big data analytics.
- Roy, A. V. (2020). Identifying locations of re-entrant drivers from patient-specific distribution of fibrosis in the left atrium. *PLoS computational biology*.
- Sanchez-Gonzalez, A. G. (2020). Learning to simulate complex physics with graph networks. In *International conference on machine learning*, pp. 8459-8468.
- Silva, I. N. (2016). *Artificial neural networks: a practical course*. Springer.
- Simon, H. (2009). *Neural networks and learning machines*.
- Takahashi, T. &. (2019). A Geometrically Consistent Viscous Fluid Solver with Two-Way Fluid-Solid Coupling. In *Computer Graphics Forum*, pp. 49-58.
- Tinoco, E. N. (2005). Progress toward CFD for full flight envelope. *The Aeronautical Journal*.
- Yadav, N. Y. (2015). *An introduction to neural network methods for differential equations*. Berlin: Springer.
- Yan, B. H. (2022). A gradient-based deep neural network model for simulating multiphase flow in porous media. *Journal of Computational Physics*.
- Zerdoumi, S. S. (2018). Image pattern recognition in big data: taxonomy and open challenges: survey. *Multimedia Tools and Applications*.

Hablemos de... LUBRICACIÓN

Los lubricantes son una de las herramientas que (dada su consistencia) nos lleva a relaciones sexuales más resbaladizas, placenteras y divertidas.

EL USO DEL LUBRICANTE SE EXTIENDE A:



SEXO ORAL: añadiendo un lubricante de sabor en el sexo oral lo hace más agradable y húmedo (Philpott, Knerr y Boydell, 2006).

PENETRACIÓN: colocar lubricante en la parte externa del condón al momento de la penetración evita que el condón sufra una ruptura y evita desgarros que puedan representar un riesgo en la transmisión de infecciones (Philpott, Knerr y Boydell, 2006). Su recomendación en la penetración anal es alta pues, el ano no tiene lubricación propia (amfAR, AVAC e IRMA, 2015).

COMO OBJETO DE AUTOEXPLORACIÓN: aplicando sobre diferentes partes del cuerpo (Martínez, 2021).



FROTAMIENTO ENTRE VULVAS: aplicando sobre la vulva para un mejor deslizamiento.



AUXILIAR PARA LA SEQUEDAD VAGINAL: mejora las experiencias sexuales de quienes tengan sequedad vaginal o que necesite lubricación vaginal extra (Estupinyá, 2013).

EXISTEN UNA GRAN CANTIDAD DE LUBRICANTES:

- **Base agua:** es el lubricante que va mejor con el látex (Philpott, Knerr y Boydell, 2006).
- **De silicona:** que a diferencia de los de base de agua, tardan más tiempo en absorberse, por lo que la sensación dura más (Estupinyá, 2013).
- **Otros:** como retardantes y estimulantes de clítoris (Estruga, 2020).



- **Oleosos:** no recomendados, pues deterioran el látex y facilitan su ruptura (Philpott, Knerr y Boydell, 2006).
- **De efecto térmico:** dan sensación de frío o calor.
- **De sabores:** se les añaden colorantes, saborizantes y endulzantes.



Los lubricantes más comunes en el mercado con los de agua, pues por su precio suelen ser más accesibles al público.

Se recomienda no hacer uso de aceites (no aptos para el uso sexual), como vaselina, crema corporal o aceite de bebé, pues además de no ser productos diseñados y aptos para esos actos, el potencial de ruptura del preservativo incrementa, además de que puede ocasionar infecciones en los órganos sexuales.

Fluidos corporales como la saliva y el fluido pre seminal tampoco son lubricantes efectivos, pues además de no ser higiénicos, se evaporan con rapidez (amfAR, AVAC e IRMA, 2015).

REFERENCIAS

American Foundation for AIDS Research, AIDS Vaccine Advocacy Coalition & International Rectal Microbicide Advocates. (2015). Guía de Activismo para mejorar el acceso a lubricantes seguros y compatibles con preservativos en América Latina y el Caribe.

Estruga, N. (2020). Todo lo que debes saber sobre los lubricantes sexuales. La Poma d'Eva. <https://lapomadeva.com/blogs/news/todo-lo-que-debes-saber-sobre-los-lubricantes-sexuales>

Estupinyá, P. (2013). S= EX2 La ciencia del sexo

Martínez, E. (2021, agosto 27). ¿Qué beneficios tienen los lubricantes para la salud sexual?. Cuidate Plus. <https://cuidateplus.marca.com/sexualidad/pareja/2021/08/27/beneficios-lubricantes-salud-sexual-179035.html>

Philpott A., Knerr, W., & Boydell, V. (2006). El placer y la prevención: cuando el buen sexo es un sexo más seguro. Reproductive health matters. UPCH. Reproductive Health Matters. All rights reserved. Reproductive Health Matters, 14(28), 23-31.

Elaboró: Tania Chirinos Hernández, estudiante de psicología, UNAM y prestadora de servicio social en DiVU A.C.

¿Cápsulas con virus? Una nueva forma de combatir a *Pseudomonas aeruginosa* en la fibrosis quística pulmonar

Gerardo García-González¹, Patricia Martínez-Flores², Joselyn García², David Armando Encinas-Basurto², Josué Juárez², Gerardo Erbey Rodea-Montealegre³, Luis Quihui-Cota⁴, Marco Antonio López-Mata²

1 Departamento de Microbiología, Facultad de Medicina, Universidad Autónoma de Nuevo León, Monterrey, Nuevo León, México.

2 Posgrado en Nanotecnología, Departamento de Física, Universidad de Sonora, Unidad Centro, Hermosillo, Sonora, México.

3 Hospital Infantil de México Federico Gómez, Ciudad de México, México

4 Departamento de Nutrición Pública y Salud, Coordinación de Nutrición, Centro de Investigación en Alimentación y Desarrollo, A.C., Hermosillo, Sonora, México.

marco.lopezmata@unison.mx

Resumen

La Fibrosis Quística Pulmonar (FQP) es una enfermedad que se caracteriza por la producción excesiva de moco, el cual suele obstruir y dificultar el proceso respiratorio. Lo anterior crea un nicho propicio para el desarrollo de infecciones bacterianas, que junto con la respuesta inflamatoria provoca una pérdida progresiva de la función pulmonar. Aunque la antibioticoterapia es el tratamiento recomendado para la FQP, la acción bactericida de estos compuestos se ve limitada debido a la matriz moco-bio-película generada por el hospedero y el patógeno, respectivamente. Si a lo anterior se le suma la resistencia de las bacterias a los antibióticos, nos encontramos con una suma de factores que no abonan en la recuperación de los pacientes con FQP. Por

lo anterior, el presente artículo aborda la situación de la FQP y algunas perspectivas sobre los posibles tratamientos basados en el uso de biomateriales, con propiedades mucolíticas (alginato) y mucoadhesivas (quitosano), como matriz de soporte, transporte y liberación de bacteriófagos viables-específicos contra *Pseudomonas aeruginosa*.

Palabras claves:

fibrosis quística pulmonar, biomateriales, *Pseudomonas aeruginosa*

Fibrosis Quística (FQ)

Durante el medievo se creía que, si un niño tenía sabor salado al momento de besarlo, significaba que ese niño estaba hechizado y que era inminente su muerte. Posteriormente, durante los siglos XIX y XX, pasamos

de niños hechizados a las razones que establecía la evidencia científica. Las primeras asociaciones a la FQ se relacionaron con un problema pancreático y posteriormente a problemas de tipo intestinal, debido a que el cuadro clínico era similar al que se presentaba en la enfermedad celíaca. Sin embargo, estas asociaciones exclusivas terminaron cuando Fanconi, en 1936, describió por primera vez la FQ (bronquiectasia) diferenciándola de la enfermedad celíaca. Posteriormente, Anderson, en 1938, usó el término “fibrosis quística del páncreas” para referirse al estado de mucosidad espesa generalizada [44]. En México, según datos de la Asociación Mexicana de FQ, anualmente nacen en promedio 400 niños con esta enfermedad, de los cuales el 15 % tiene la oportunidad de ser diagnosticado a tiempo; el resto fallece antes de cumplir los 4 años de edad, debido a complicaciones respiratorias o nutricionales [2]. Se ha estimado que cerca de 3000 individuos con FQ no cuentan con las opciones terapéuticas adecuadas y esto repercute en su calidad de vida. En los países desarrollados, el avance de la medicina en el contexto diagnóstico o terapéutico ha logrado incrementar la esperanza de vida promedio a 45.1 años [39]; sin embargo, en México se siguen buscando mejores alternativas de tratamiento para aumentar el pronóstico por arriba de los 40 años de edad.

Actualmente, se sabe que la FQ es una enfermedad congénita de carácter autosómico recesivo que se caracteriza por afectar diferentes sistemas del organismo y cuyo origen radica en la mutación del gen regulador de la conductancia transmembranal de la fibrosis quística (*CFTR*, por sus siglas en inglés) [18, 37]. En consecuencia, esto induce modificaciones en el canal *CFTR*, que

alteran su función en el control del transporte de iones cloruro (Cl^-) y bicarbonato (HCO_3^-), lo que favorece la deshidratación del tejido y, con ello, la acumulación excesiva de moco y el engrosamiento de los tejidos, alterando de esta forma el espacio físico de los conductos del organismo [3, 51]. La FQ es considerada una enfermedad multisistémica en la que los defectos en la proteína *CFTR* repercuten principalmente en el inadecuado funcionamiento de los pulmones, páncreas, vesícula biliar, testículos y glándulas sudoríparas [22]. Por lo tanto, esto trae consigo un espectro amplio de manifestaciones clínicas entre las que se encuentran la esterilidad en varones, la desnutrición o los problemas respiratorios, en donde estos últimos representan la principal causa de morbimortalidad en los pacientes [13, 56].

Fibrosis Quística Pulmonar y *Pseudomonas aeruginosa*

La fibrosis quística pulmonar (FQP) es la entidad clínica más estudiada dentro de la FQ, debido a que la producción excesiva de moco obstruye y dificulta el proceso respiratorio, produciendo bronquiectasias y la disminución de la actividad de las células ciliadas [8, 52] [Figura 1]. Este exceso de moco promueve el desarrollo de infecciones, ya sean bacterianas, virales o fúngicas, que junto con la respuesta inmunológica intrínseca contribuyen a la exacerbación del problema respiratorio, provocando la pérdida progresiva de la función pulmonar [53].

La mayoría de las infecciones que padecen los pacientes con FQP suelen ser ocasionadas por bacterias [23], las cuales encuentran en la mucosidad desregulada de las vías respiratorias inferiores, un entorno rico en nutrientes y las condiciones microambien-

tales que permiten su establecimiento, desarrollo y colonización del tejido afectado [19, 35]. Dentro de los principales patógenos bacterianos asociados a FQ se encuentran *Staphylococcus aureus*, seguido por *Pseudomonas aeruginosa* y *Haemophilus influenzae* y, en menor grado, algunos miembros del complejo *Burkholderia cepacia*, *Stenotrophomonas maltophilia*, *Achromobacter xylosoxidans* y micobacterias no tuberculosas, las cuales recientemente se han aislado de pacientes con FQP [36].

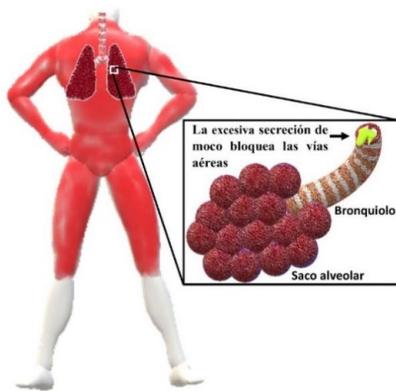


Figura 1. Esquema de la obstrucción de las vías respiratorias provocada por el exceso de secreción de moco en la FQP

Hablando puntualmente de *P. aeruginosa*, se trata de una bacteria en forma de bacilo Gram negativo que es reconocida por sus características bioquímicas distintivas que resaltan durante su cultivo, como lo son la liberación de pigmentos difusibles como la pioverdina y la piocianina, así como por la producción de alginato (exopolisacárido) [Figura 2A]. Si bien es cierto que *P. aeruginosa* es un microorganismo distribuido de manera natural en el medio ambiente, al mismo tiempo es considerado como un importante patógeno oportunista, que en el caso de FQP, la hipermucosidad favorece la proliferación de esta bacteria [47]. Además, se ha evidenciado que las cepas de *P. aeruginosa* aisladas de pacientes con FQ son altamente virulentas, caracterizadas

por formación de biopelícula (polisacáridos, DNA extracelular y proteínas), sistema de comunicación de *quórum sensing*, flagelinas, piocianina, pioverdina, proteasas, lipasas, elastasas, exotoxinas, lipopolisacáridos, sistema de secreción tipo 3, fimbrias, entre otros factores moleculares de virulencia [27]. Estos factores, en conjunto, forman la matriz en la que la bacteria queda embebida y dificulta la eliminación del patógeno con los tratamientos convencionales [Figura 2B] [49]. A pesar de que *P. aeruginosa* no está asociada con infecciones bacterianas en los primeros estadios de la FQP, la infección por *P. aeruginosa* cuenta con la mayor tasa de morbimortalidad y con mayor número de ingresos hospitalarios debido a la disfunción que ocasiona con su invasión y colonización [Figura 2C] [16]. Se ha observado que las infecciones por *P. aeruginosa* presentan una mayor incidencia sobre los grupos de jóvenes y adultos, a diferencia de los grupos pediátricos, indicando que la FQP se desarrolla como un proceso de infección crónica, afectando la calidad de vida de los pacientes [17].

Actualmente, los esquemas terapéuticos contra *P. aeruginosa* se basan en el uso de antibióticos como la tobramicina, colistina, levofloxacino, ciprofloxacino y aztreonam, en primer lugar [15, 36], acompañados de agentes mucolíticos como la DNAsa y N-acetilcisteína, para mejorar la eficacia terapéutica de los antibióticos [14]. Sin embargo, la eficacia del tratamiento con antibiótico usado contra *P. aeruginosa* puede tener una acción limitada debido a la presencia de biopelícula, la cual impide la penetración del antibiótico que, en conjunto con la hipersecreción de moco, forman una barrera física que limita el tratamiento antibacteriano. Por lo anterior, algunas estrategias de tratamiento

se han enfocado en el rompimiento de la biopelícula y del moco, para facilitar su expectoración y con ello, procurar la oportuna recuperación de los pacientes [11, 36].

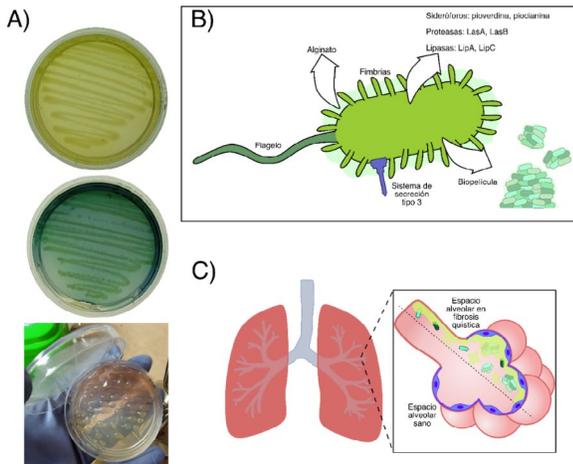


Figura 2. (A) Características del cultivo de *P. aeruginosa*, (B) esquematización de la bacteria embebida en la biopelícula y (C) representación del establecimiento de la bacteria en el espacio alveolar

Los bacteriófagos contra *P. aeruginosa*

La fagoterapia es el concepto que se ha designado para referirse al uso de estas partículas virales con un propósito terapéutico la cual, a su vez, puede utilizarse en combinación con antibioticoterapia convencional e incluso algunos estudios *in vitro* e *in vivo* han demostrado efectos sinérgicos [9, 34]. En este sentido, el uso de bacteriófagos (BACs) es una alternativa terapéutica que ha llamado la atención debido a que son virus que infectan de manera específica a las bacterias y tienen la capacidad de destruirlas [25, 36]. En el caso particular, para el tratamiento de FQP se ha explorado el uso de BACs específicos para *P. aeruginosa* (Figura 3A), ya que su efecto antibacteriano ha sido demostrado *in vitro* e *in vivo* en modelos animales, e inclusive su potencial capacidad de penetración en la biopelícula (Figura 3B) [10]. Debido a la usual coexistencia de diferentes bacterias en un individuo

con FQ, una forma de aumentar la eficacia de la fagoterapia ha sido mediante la utilización de “cócteles” de BACs que consisten en la combinación de diferentes virus que puedan eliminar distintas especies o cepas bacterianas en un mismo sitio de infección (Figura 3C) [9, 35].

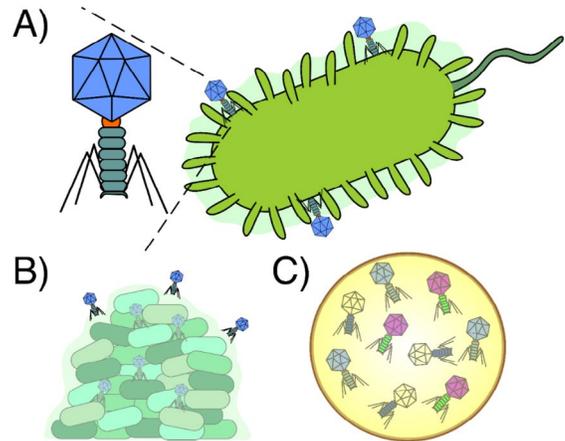


Figura 3. Representación gráfica de bacteriófagos y su mecanismo de infección sobre una bacteria. (A) Esquematización de la fijación específica, (B) penetración sobre la biopelícula y (C) formación de un cóctel de BACs para el incremento de la eficacia fagoterapéutica

La administración de BACs en los pacientes con FQ es un tópico que continúa en desarrollo y que busca aprovechar las principales ventajas de la fagoterapia, tales como su abundancia, omnipresencia en la naturaleza, el efecto nulo sobre las células del hospedero y su capacidad de eliminar de manera específica células bacterianas. Particularmente, dirigiendo el efecto bactericida hacia patógenos resistentes a múltiples antibióticos. A pesar de ello, la eficacia de la fagoterapia usada contra infecciones bacterianas presentes en la FQP también pudiera tener algunas limitaciones terapéuticas debido a: *i*) las características intrínsecas de esta enfermedad, en donde la hiperproducción de moco representa una barrera física y química que podría impedir la acción de los BACs [40], *ii*) las características intrínsecas

de las partículas virales, las cuales son de gran tamaño y pueden ser eliminadas por el sistema inmunológico primario [28] y *iii*) los métodos de manejo y administración de los BACs (nebulización, inhalación de polvos y vaporización) pueden afectar la viabilidad de las partículas virales. Con base en lo anterior, la nanotecnología ofrece alternativas para superar estos inconvenientes mediante el diseño y fabricación nanopartículas basadas en biopolímeros, los cuales pueden funcionar como matrices de soporte con la finalidad de atrapar las partículas virales protegiéndolas de factores físicos y fisiológicos, conservando su viabilidad y su potencial terapéutico. Además, estos bionanomateriales particulados podrían tener la propiedad para transportar y liberar a los BACs en un sitio de interés determinado y mejorar así la acción de la fagoterapia [40].

Biomateriales anti-*P. aeruginosa* enfocados hacia el tratamiento de la FQP

Algunos biomateriales funcionales (quitosano, alginato y algunos lípidos), se han elaborado con el fin de ofrecer nuevas alternativas de tratamiento para pacientes con FQP infectados con *P. aeruginosa*. En esta estrategia se busca modular las condiciones de la producción anormal de moco y la respuesta inmune del organismo, para evitar generar un nicho propicio para el establecimiento, colonización y persistencia de la bacteria [55]. Con estas estrategias, es posible afectar los factores moleculares de virulencia del microorganismo y reducir la capacidad intrínseca de la bacteria para resistir la acción de los antibióticos [7]. La Secretaría de Salud de México [50] recomienda que las infecciones por *P. aeruginosa* se combatan con antibióticos, independientemente de la presencia o ausencia de síntomas, muy

a pesar de la ya conocida resistencia bacteriana a los fármacos [50]. Incluso, si después de dos intentos de erradicación no se ha logrado la descolonización de *P. aeruginosa*, se recomienda el uso de tobramicina en solución como una terapia crónica pulmonar (TCP). Otras TCPs recomendadas son el uso de α -dornasa (DNasa), solución salina hipertónica 7.0 % y esteroides inhalados. Sin embargo, se ha evidenciado que los antibióticos anti-*Pseudomonas* inhalados muestran poca penetración, focalización y generalmente es inactivada su acción debido a su retención en el esputo, lo que limita su acción en el tejido pulmonar [5].

Estas limitaciones han motivado la búsqueda de nuevos biomateriales que ayuden en el esquema del TCP de pacientes con FQ. Siendo los sistemas de liposomas, así como los sistemas micro y nanoparticulados, los más utilizados para la encapsulación y liberación de compuestos bioactivos *in situ*. La idea de generar sistemas liposomales con antibióticos encapsulados han surgido con el objetivo de prolongar su vida media y realizar una liberación controlada y sostenida en el sitio de acción y, a la vez, reducir la concentración del fármaco utilizado. Los liposomas son estructuras de moléculas anfipáticas que se autoensamblan en forma de bicapa esférica, que se conserva por la organización que mantienen los grupos hidrofílicos hacia el ambiente acuoso exterior y otros grupos que se disponen hacia el interior (hidrófobos). La organización de los liposomas es muy similar a las membranas celulares y es por eso que son considerados muy efectivos para transportar y administrar antimicrobianos con buen índice terapéutico y con efectos adversos mínimos [21, 33]. Además, su naturaleza anfifílica se ha aprovechado en la industria farmacéutica

para encapsular y transportar moléculas de diferentes polaridades. Los tratamientos basados en liposomas con antibióticos han demostrado ser muy efectivos para reducir el crecimiento bacteriano de *P. aeruginosa in vitro*, así como la disminución de la formación de biopelícula [20]. Sin embargo, en los ensayos *in vivo* no se han encontrado diferencias significativas entre liposomas con amikacina vs. tratamiento convencional con tobramicina, que han sido aplicados por inhalación con el objetivo de atender infecciones pulmonares graves [5]. Por otro lado, también se han elaborado nanopartículas cargadas con antibiótico como una alternativa de uso en la TCP, entre ellas se encuentran las nanopartículas de cristal líquido de lípidos de monoacilglicerol y diestearato de glicerilo-ploxámero 188-miglyol812, las cuales han sido usadas para encapsular tobramicina [38]. Otros sistemas nanoparticulados con tobramicina junto con N-acetilcisteína también han mostrado efecto inhibitorio de la formación de la biopelícula de *P. aeruginosa* y se ha observado una disminución significativa en la viscosidad del moco en pacientes con FQ [43]. Aunque se han obtenido avances importantes en la elaboración de materiales sintéticos con antibióticos, la recomendación general de los estudios es reducir la toxicidad que presentan estas nanopartículas sobre las células de mamíferos.

Por otra parte, los biopolímeros son considerados como buenos candidatos para la elaboración de biomateriales dirigidos a tratar las infecciones ocasionadas por *P. aeruginosa* en los pacientes con FQP. Entre las mejores opciones se encuentran los polisacáridos como el alginato (ALG) y quitosano (QS), ya que su naturaleza hidrofílica, los hace plausibles de ser nebulizados

o maleables en varias formas que pueden ser usadas para la TCP. El ALG es un polisacárido que se encuentra naturalmente en la pared celular de algas marrón y bacterias como *Azotobacter sp.* y *Pseudomonas sp.* Químicamente, el ALG está compuesto por residuos de ácido β -D-manurónico y α -L-gulurónico, unidos por enlaces glucosídicos 1,4 [46]. Por sus características químicas y disponibilidad, ha sido muy utilizado para la generación de diversos materiales asociados con aplicaciones clínicas y biomédicas, ya que es un biopolímero no tóxico, biocompatible, biodegradable, bioestable y de naturaleza hidrofílica. Adicionalmente, se ha demostrado que el ALG puede funcionar como una biomolécula con capacidad de encapsular, transportar y donar sustancias bioactivas hacia el tejido pulmonar [58]. Por lo anterior, algunos estudios se han enfocado en las propiedades que contienen los oligómeros ricos en ácido gulurónico (G < 85 %), el cual ha demostrado que puede alterar las propiedades viscoelásticas del esputo y mejorar el tratamiento con antibióticos contra *P. aeruginosa* [31]. Los grupos funcionales que posee la estructura del ALG también le permite mezclarse fácilmente con otros biopolímeros, pudiendo llegar a formar una red de entrecruzamiento que le permite mejorar sus propiedades, en especial, cuando se une con el QS [54]. Por otro lado, el QS es un polisacárido derivado de la quitina, el cual ha sido utilizado para la elaboración de biomateriales transportadores de fármacos dirigidos a atender las enfermedades infecciosas pulmonares [57]. Este biopolímero se elige principalmente por su naturaleza polianiónica, biodegradable, biocompatible y por sus propiedades antibacterianas, anticancerígenas y mucoadhesivas, lo que le permite tener una afinidad alta por las cargas negativas de la interfaz

de la mucosa, generalmente ricas en ácidos siálicos [42]. Además, la estructura química del QS posee grupos funcionales que le funcionan para enlazar químicamente a otras moléculas, generando nuevos derivados de quitosano con propiedades fisicoquímicas y biológicas específicas, como el O-palmitoil QS, el O-acil QS, o la N-carboxymetil QS, entre otros [4, 59]. Kolonko *et. al.*, [30] desarrollaron nanocápsulas de QS cargadas con capsaicina y ARNm en la superficie que fueron dirigidas hacia líneas celulares con mutación en el gen CFTR, lo anterior con el objetivo de corregir los canales alterados de cloruro epitelial que son los responsables de provocar el desequilibrio osmótico. Otros biomateriales elaborados con QS han seguido la ruta de encapsulación de antibióticos, y han demostrado que dosis orales de QS administradas a ratas inducidas con fibrosis pulmonar idiopática fueron capaces de atenuar la fibrosis pulmonar y el grado de inflamación sobre el tejido en un modelo animal [29]. En este mismo sentido, Ortiz *et. al.*, [41] desarrollaron microcápsulas de QS como un sistema de transporte y entrega de la dapsona, la cual presentó un adecuado depósito en las partes más profundas del pulmón y mostró baja toxicidad *in vivo*. Patel *et. al.*, [42] desarrollaron nanopartículas híbridas de QS uniendo químicamente la enzima ALGiasa en su superficie. Lo que permitió, la internalización de la nanopartícula a través de moco y la liberación del fármaco de manera controlada y sostenida, disminuyendo la proliferación de la *P. aeruginosa*. Por otro lado, si se mezcla ALG con QS es posible obtener una nanopartícula que, según el protocolo de fabricación puede tratarse de un sistema particulado híbrido de carga aniónica o catiónica con la capacidad de cargar y transportar agentes bactericidas (fármacos o BACs) [1, 24, 32].

La Figura 4 muestra una estrategia general adaptada para fabricación de nanopartículas compuestas de ALG-QS en las cuales es posible encapsular un antibiótico o BACs. En este caso particular, los agentes bactericidas se mezclan previamente con la disolución de QS, con la finalidad de que estos agentes queden atrapados en la red polimérica de QS y posteriormente se adicionan, gota a gota, a una disolución de ALG, bajo sonicación constante. Durante este proceso se realiza un entrecruzamiento iónico entre las moléculas de ALG y QS, promoviendo la formación de nanopartículas ALG-QS. Por ejemplo, Hills *et. al.*, desarrollaron un sistema de liberación de fármacos basado en ALG-QS cargado con tobramicina para inhibir el crecimiento de *P. aeruginosa* [24]. Por otra parte, Rotman *et. al.*, diseñaron un sistema particulado termorresponsivo basado en ALG-QS como matriz de carga, transporte y liberación de BACs. Con base a los resultados obtenidos, demostraron que la matriz biopolimérica liberó de manera continua partículas virales, conservando su viabilidad [48].

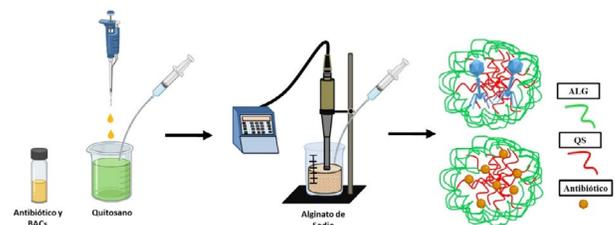


Figura 4. Representación esquemática del protocolo de fabricación de nanopartículas basadas en ALG-QS cargadas con antibióticos y/o BACs

Algunos tratamientos aplicados en modelos animales donde han usado BAC o cócteles de BACs encapsulados en QS y/o ALG, dirigido contra bacterias que ocasionan diarrea [12, 45] y otras afecciones [26], han mostrado buena eficacia. Pero son limitados los estudios clínicos asociados con esquemas del TCP de pacientes con FQ donde se usen bio-

materiales con BACs encapsulados en QS o ALG. Si bien es cierto que estas investigaciones abren una ventana novedosa sobre este conocimiento y el avance en el desarrollo de biomateriales, esto va acompañado con la exigencia social de demostrar que dichos biomateriales son eficaces contra bacterias patógenas, y de librar las barreras químicas y físicas que impone el entorno pulmonar y bacteriano. Por lo tanto, se requiere de una mayor atención tanto de la naturaleza de la matriz de cubierta como del o los BACs que se pretenden usar. Aunque algunas terapias con BAC aplicadas *in vivo* han demostrado eficacia, se ha observado que esta depende de factores asociados con la concentración de fagos y bacterias presentes en el sitio de la infección, evasión de la bacteria (resistencia) y la permanencia intracelular, e incluso se ha observado que los BACs pueden interactuar directamente con células de mamíferos [6], lo que representan retos importantes por atender y estudiar.

Conclusiones

Los estudios asociados con el desarrollo de diversos biomateriales con el objetivo de crear un tratamiento funcional contra la infección ocasionada por *P. aeruginosa* en pacientes FQP se han probado principalmente *in vitro* y la mayoría de estos biomateriales aún se basan en el uso de antibióticos, los cuales no aseguran la correcta eliminación de la infección bacteriana e incluso abonan a los problemas de resistencia a los antibióticos en pacientes con esta problemática. Aunado a lo anterior, los esquemas de tratamiento implementados sobre estos pacientes suelen ser largos y suelen generar efectos adversos debidos a que los tratamientos suelen llegar de manera subóptima. Otras barreras terapéuticas importantes, que son retos que se deben de

considerar al momento de crear biomateriales dirigidos para tratar la FQP, es lograr que dicho material tenga el tamaño adecuado y la capacidad de evadir la fagocitosis mediada por macrófagos. Asimismo, se debe considerar que los biomateriales tengan la capacidad de liberar, permear y eliminar el grosor de la capa de mucosa-biopelícula en el sitio de la infección pulmonar. En este sentido, la nanotecnología pudiera desempeñar un papel importante en el diseño y desarrollo de bionanomateriales (basados en ALG-QS) cargados con BACs específicos, con los cuales se pretende aumentar la eficiencia de los tratamientos anti-*P. aeruginosa* que suelen asociarse a los cuadros más severos de la FQP.

Agradecimientos

Los autores agradecen al CONAHCyT por el financiamiento al proyecto CF-2023-G-41.

Referencias

- [1] Abdallah S. Abdelsattar, Fatma Abdelrahman, Alyaa Dawoud, Ian F. Connerton, and Ayman El-Shibiny. 2019. Encapsulation of *E. coli* phage ZCEC5 in chitosan–alginate beads as a delivery system in phage therapy. *AMB Express* 9,1 (June 2019), 87. <https://doi.org/10.1186/s13568-019-0810-9>
- [2] AMFQ. 2017. Sobre Fibrosis Quística. Retrieved from <http://fibrosisquistica.org.mx/~h4u3f3d9/sobre-la-enfermedad/>
- [3] Dorothy H Andersen. 1938. Cystic fibrosis of the pancreas and its relation to celiac disease: a clinical and pathologic study. *American Journal of Diseases of Children* 56, 2 (August 1938), 344–399. <https://doi.org/10.1001/archpedi.1938.01980140114013>
- [4] Mohamed E.I. Badawy, Entsar I. Rabea, Tina M. Rogge, Christian V. Stevens, Walter Steurbaut, Monica Höfte, and Guy Smagghe. 2005. Fungicidal and Insecticidal Activity of O-Acyl Chitosan Derivatives. *Polym. Bull.* 54, 4 (July 2005), 279–289. <https://doi.org/10.1007/s00289-005-0396-z>
- [5] Diana Bilton, Tacjana Pressler, Isabelle Fajac, John Paul Clancy, Dorota Sands, Predrag Minic, Marco Cipolli, Ivanka Galeva, Amparo Solé, Alexandra L. Quittner, Keith Liu, John P. McGinnis, Gina Eagle, Renu Gupta, Michael W. Konstan, Sabine Renner, Christiane Knoop, Anne Malfroot, Lieven Dupont, Kristine Desager, Frans De Baets, Miroslava Bosheva, Vania Nedkova, Ivan Galabov, Ivanka Galeva, Andreas Freitag, Nancy Morrison, Pearce Wilcox, Tanja Pressler, Yves Martinet, Raphael Chiron, Isabelle Fajac, Stephan Dominique, Philippe Reix, Anne Prevotat,

- Isabelle Sermet, Isabelle Durieu, Rainald Fischer, Rudolf Huber, Doris Staab, Uwe Mellies, Wolfgang Sextro, Tobias Welte, Heinrike Wilkens, Urte Sommerwerk, Burkhard Bewig, Ilias Inglezos, Stavros-Elleftherios Doudounakis, Olga Bede, Ferenc Gönczi, Rita Újhelyi, Edward McKone, Paul McNally, Vincenzina Lucidi, Marco Cipolli, Mario La Rosa, Laura Minicucci, Rita Padoan, Giovanna Pisi, Rolando Gagliardini, Carla Colombo, Inez Bronsveld, Ewa Sapiejka, Henryk Mazurek, Dorota Sands, Grażyna Górnicka, Iwona Stelmach, Halina Batura-Gabryel, Marta Rachel, Predrag Minic, Jaroslava Orosova, Branko Takac, Anna Feketova, Carmen Martinez, Gloria Garcia Hernandez, Jose Ramon Villa-Asensi, Silvia Gartner, Amparo Sole, Anders Lindblad, Martin Ledson, Diana Bilton, Joanna Whitehouse, Alan Smyth, Ian Ketchell, Timothy Lee, and Gordon MacGregor. 2020. Amikacin liposome inhalation suspension for chronic *Pseudomonas aeruginosa* infection in cystic fibrosis. *Journal of Cystic Fibrosis* 19, 2 (2020), 284–291. <https://doi.org/10.1016/j.jcf.2019.08.001>
- [6] Katie Bodner, Arin L. Melkonian, and Markus W. Covert. 2021. The Enemy of My Enemy: New Insights Regarding Bacteriophage–Mammalian Cell Interactions. *Trends in Microbiology* 29, 6 (June 2021), 528–541. <https://doi.org/10.1016/j.tim.2020.10.014>
- [7] Kathirvel Brindhadevi, Felix LewisOscar, Eleftherios Mylonakis, Sabarathinam Shanmugam, Tikendra Nath Verma, and Arivalagan Pugazhendhi. 2020. Biofilm and Quorum sensing mediated pathogenicity in *Pseudomonas aeruginosa*. *Process Biochemistry* 96, (September 2020), 49–57. <https://doi.org/10.1016/j.procbio.2020.06.001>
- [8] Alan S. Brody. 2004. Early morphologic changes in the lungs of asymptomatic infants and young children with cystic fibrosis. *The Journal of Pediatrics* 144, 2 (February 2004), 145–146. <https://doi.org/10.1016/j.jpeds.2003.11.008>
- [9] Rachel Yoon Kyung Chang, Theerthankar Das, Jim Manos, Elizabeth Kutter, Sandra Morales, and Hak-Kim Chan. 2019. Bacteriophage PEV20 and Ciprofloxacin Combination Treatment Enhances Removal of *Pseudomonas aeruginosa* Biofilm Isolated from Cystic Fibrosis and Wound Patients. *AAPS J* 21, 3 (April 2019), 49. <https://doi.org/10.1208/s12248-019-0315-0>
- [10] Rachel Yoon Kyung Chang, Theerthankar Das, Jim Manos, Elizabeth Kutter, Sandra Morales, and Hak-Kim Chan. 2019. Bacteriophage PEV20 and Ciprofloxacin Combination Treatment Enhances Removal of *Pseudomonas aeruginosa* Biofilm Isolated from Cystic Fibrosis and Wound Patients. *AAPS J* 21, 3 (May 2019), 49. <https://doi.org/10.1208/s12248-019-0315-0>
- [11] Michael E. Chirgwin, Margaret R. Dedloff, Alina Maria Holban, and Monica C. Gestal. 2019. Novel Therapeutic Strategies Applied to *Pseudomonas aeruginosa* Infections in Cystic Fibrosis. *Materials* 12, 24 (January 2019), 4093. <https://doi.org/10.3390/ma12244093>
- [12] Joan Colom, Mary Cano-Sarabia, Jennifer Otero, Javier Arriñez-Soriano, Pilar Cortés, Daniel MasPOCH, and Montserrat Llagostera. 2017. Microencapsulation with alginate/CaCO₃: A strategy for improved phage therapy. *Sci Rep* 7, 1 (January 2017), 41441. <https://doi.org/10.1038/srep41441>
- [13] Kris De Boeck, Matijn Weren, Marijka Proesmans, and Eitan Kerem. 2005. Pancreatitis Among Patients With Cystic Fibrosis: Correlation With Pancreatic Status and Genotype. *Pediatrics* 115, 4 (April 2005), e463–e469. <https://doi.org/10.1542/peds.2004-1764>
- [14] Jill Deacon, Sharif M. Abdelghany, Derek J. Quinn, Daniela Schmid, Julianne Megaw, Ryan F. Donnelly, David S. Jones, Adrien Kissenpfennig, J. Stuart Elborn, Brendan F. Gilmore, Clifford C. Taggart, and Christopher J. Scott. 2015. Antimicrobial efficacy of tobramycin polymeric nanoparticles for *Pseudomonas aeruginosa* infections in cystic fibrosis: Formulation, characterisation and functionalisation with dornase alfa (DNase). *Journal of Controlled Release* 198, (January 2015), 55–61. <https://doi.org/10.1016/j.jconrel.2014.11.022>
- [15] Claire Edmondson and Jane C. Davies. 2016. Current and future treatment options for cystic fibrosis lung disease: latest evidence and clinical implications. *Therapeutic Advances in Chronic Disease* 7, 3 (May 2016), 170–183. <https://doi.org/10.1177/20406223166641352>
- [16] Julia Emerson, Margaret Rosenfeld, Sharon McNamara, Bonnie Ramsey, and Ronald L. Gibson. 2002. *Pseudomonas aeruginosa* and other predictors of mortality and morbidity in young children with cystic fibrosis. *Pediatric Pulmonology* 34, 2 (2002), 91–100. <https://doi.org/10.1002/ppul.10127>
- [17] Katherine B. Frayman, David S. Armstrong, Rosemary Carzino, Thomas W. Ferkol, Keith Grimwood, Gregory A. Storch, Shu Mei Teo, Kristine M. Wylie, and Sarath C. Ranganathan. 2017. The lower airway microbiota in early cystic fibrosis lung disease: a longitudinal analysis. *Thorax* 72, 12 (December 2017), 1104–1112. <https://doi.org/10.1136/thoraxjnl-2016-209279>
- [18] Laura de Castro e Garcia, Lucas Montiel Petry, Pedro Augusto Van Der Sand Germani, Luiza Fernandes Xavier, Paula Barros de Barros, Amanda da Silva Meneses, Laura Menestrino Prestes, Luana Braga Bittencourt, Marina Puerari Pieta, Frederico Friedrich, and Leonardo Araújo Pinto. 2022. Translational Research in Cystic Fibrosis: From Bench to Beside. *Front. Pediatr.* 10, (May 2022), 881470. <https://doi.org/10.3389/fped.2022.881470>
- [19] Anthony M. George, Peter M. Jones, and Peter G. Middleton. 2009. Cystic fibrosis infections: treatment strategies and prospects. *FEMS Microbiology Letters* 300, 2 (November 2009), 153–164. <https://doi.org/10.1111/j.1574-6968.2009.01704.x>
- [20] Vinod Ghodake, Jyoti Vishwakarma, Sirisha L. Vavilala, and Vandana Patravale. 2020. Cefoperazone sodium liposomal formulation to mitigate *P. aeruginosa* biofilm in Cystic fibrosis infection: A QbD approach. *International Journal of Pharmaceutics* 587, (2020), 119696. <https://doi.org/10.1016/j.ijpharm.2020.119696>
- [21] Azucena Gonzalez Gomez and Zeinab Hosseinidou. 2020. Liposomes for Antibiotic Encapsulation and Delivery. *ACS Infect. Dis.* 6, 5 (May 2020), 896–908. <https://doi.org/10.1021/acsinfecdis.9b00357>
- [22] Oussama Hallouch, John Marinos, Florence Thibault, Kim-Nhien Vu, Jean Chalaoui, Patrick Bourgouin, Laurence Péloquin, Véronique Freire, François Tremblay, and Carl Chartrand-Lefebvre. 2022. Cystic fibrosis in the 21st century: what every radiologist should know. *Clinical Imaging* 84, (April 2022), 118–129. <https://doi.org/10.1016/j.clinimag.2022.02.004>

- [23] Freya. Harrison. 2007. Microbial ecology of the cystic fibrosis lung. *Microbiology* 153, 4 (2007), 917–923. <https://doi.org/10.1099/mic.0.2006/004077-0>
- [24] Marcus Hill, Matthew Twigg, Emer A. Sheridan, John G. Hardy, J. Stuart Elborn, Clifford C. Taggart, Christopher J. Scott, and Marie E. Migaud. 2019. Alginate/Chitosan Particle-Based Drug Delivery Systems for Pulmonary Applications. *Pharmaceutics* 11, 8 (August 2019), 379. <https://doi.org/10.3390/pharmaceutics11080379>
- [25] Sami Hraiech, Fabienne Brégeon, and Jean-Marc Rolain. 2015. Bacteriophage-based therapy in cystic fibrosis-associated *Pseudomonas aeruginosa* infections: rationale and current status. *Drug Design, Development and Therapy* 9, (July 2015), 3653–3663. <https://doi.org/10.2147/DDDT.S53123>
- [26] Margaret O. ILOMUANYA, Nkechi V ENWURU, Emanuella ADENOKUN, ABIGAIL FATUNMBI, Adebowale ADELUOLA, and Cecilia I IGWILO. 2022. Chitosan-Based Microparticle Encapsulated *Acinetobacter baumannii* Phage Cocktail in Hydrogel Matrix for the Management of Multidrug Resistant Chronic Wound Infection. *Turk J Pharm Sci* 19, 2 (April 2022), 187–195. <https://doi.org/10.4274/tjps.galenos.2021.72547>
- [27] Irene Jurado-Martín, Maite Sainz-Mejías, and Siobhán McClean. 2021. *Pseudomonas aeruginosa*: An Audacious Pathogen with an Adaptable Arsenal of Virulence Factors. *International Journal of Molecular Sciences* 22, 6 (January 2021), 3128. <https://doi.org/10.3390/ijms22063128>
- [28] Sandeep Kaur, Anila Kumari, Anjana Kumari Negi, Vikas Galav, Shikha Thakur, Manish Agrawal, and Vandana Sharma. 2021. Nanotechnology Based Approaches in Phage Therapy: Overcoming the Pharmacological Barriers. *Frontiers in Pharmacology* 12, (2021). Retrieved February 13, 2024 from <https://www.frontiersin.org/journals/pharmacology/articles/10.3389/fphar.2021.699054>
- [29] You-Seok Kim, Qiang Li, Hwa-Young Youn, and Dae Young Kim. 2019. Oral Administration of Chitosan Attenuates Bleomycin-induced Pulmonary Fibrosis in Rats. *In Vivo* 33, 5 (September 2019), 1455–1461. <https://doi.org/10.21873/invivo.11624>
- [30] A. Katharina Kolonko, Janes Efung, Yadira González-Espinosa, Nadine Bangel-Ruland, Willy van Driessche, Francisco M. Goycoolea, and Wolf-Michael Weber. 2020. Capsaicin-Loaded Chitosan Nanocapsules for wtCFTR-mRNA Delivery to a Cystic Fibrosis Cell Line. *Biomedicines* 8, 9 (September 2020), 364. <https://doi.org/10.3390/biomedicines8090364>
- [31] Silke van Koningsbruggen-Rietschel, Jane C. Davies, Tacjana Pressler, Rainald Fischer, Gordon MacGregor, Scott H. Donaldson, Knut Smerud, Nils Meland, Jann Mortensen, Marie Ø Fosbøl, Damian G. Downey, Astrid H. Myrset, Hugo Flaten, and Philip D. Rye. 2020. Inhaled dry powder alginate oligosaccharide in cystic fibrosis: a randomised, double-blind, placebo-controlled, crossover phase 2b study. *ERJ Open Research* 6, 4 (October 2020). <https://doi.org/10.1183/23120541.00132-2020>
- [32] Jaya Lakkakula, Arpita Roy, Karan Krishnamoorthy, Saad Alghamdi, Mazen Almeahmadi, Pratik Gujarathi, Prachi Pansare, Mamdouh Allahyani, Osama Abdulaziz, Kamini Velhal, Most Chand Sultana Khatun, and Md Jamal Hosain. 2022. Alginate-Based Nanosystems for Therapeutic Applications. *Journal of Nanomaterials* 2022, (September 2022), e6182815. <https://doi.org/10.1155/2022/6182815>
- [33] Danielle E. Large, Rudolf G. Abdelmessih, Elizabeth A. Fink, and Debra T. Auguste. 2021. Liposome composition in drug delivery design, synthesis, characterization, and clinical application. *Advanced Drug Delivery Reviews* 176, (2021), 113851. <https://doi.org/10.1016/j.addr.2021.113851>
- [34] Yu Lin, Diana Quan, Rachel Yoon Kyung Chang, Michael Y.T. Chow, Yuncheng Wang, Mengyu Li, Sandra Morales, Warwick J. Britton, Elizabeth Kutter, Jian Li, and Hak-Kim Chan. 2021. Synergistic activity of phage PEV20-ciprofloxacin combination powder formulation—A proof-of-principle study in a *P. aeruginosa* lung infection model. *European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics* 158, (January 2021), 166–171. <https://doi.org/10.1016/j.ejpb.2020.11.019>
- [35] Jim Manos. 2021. Current and Emerging Therapies to Combat Cystic Fibrosis Lung Infections. *Microorganisms* 9, 9 (September 2021), 1874. <https://doi.org/10.3390/microorganisms9091874>
- [36] Jim Manos. 2021. Current and Emerging Therapies to Combat Cystic Fibrosis Lung Infections. *Microorganisms* 9, 9 (September 2021), 1874. <https://doi.org/10.3390/microorganisms9091874>
- [37] Kelly A. Mason and Alan D. Rogol. 2022. Trends in Growth and Maturation in Children with Cystic Fibrosis Throughout Nine Decades. *Front. Endocrinol.* 13, (July 2022), 935354. <https://doi.org/10.3389/fendo.2022.935354>
- [38] María Moreno-Sastre, Marta Pastor, Amaia Esquisabel, Eulàlia Sans, Miguel Viñas, Aarne Fleischer, Esther Palomino, Daniel Bachiller, and José Luis Pedraz. 2016. Pulmonary delivery of tobramycin-loaded nanostructured lipid carriers for *Pseudomonas aeruginosa* infections associated with cystic fibrosis. *International Journal of Pharmaceutics* 498, 1 (2016), 263–273. <https://doi.org/10.1016/j.ijpharm.2015.12.028>
- [39] National Guideline Alliance (UK). 2017. Cystic Fibrosis: Diagnosis and management. National Institute for Health and Care Excellence (NICE), London. Retrieved December 30, 2023 from <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/books/NBK464183/>
- [40] Renee N. Ng, Anna S. Tai, Barbara J. Chang, Stephen M. Stick, and Anthony Kicic. 2021. Overcoming Challenges to Make Bacteriophage Therapy Standard Clinical Treatment Practice for Cystic Fibrosis. *Frontiers in Microbiology* 11, (2021). Retrieved January 15, 2024 from <https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/fmicb.2020.593988>
- [41] Manoel Ortiz, Denise Soledade Jornada, Adriana Raffin Pohlmann, and Sílvia Stanisçuaski Guterres. 2015. Development of Novel Chitosan Microcapsules for Pulmonary Delivery of Dapsone: Characterization, Aerosol Performance, and In Vivo Toxicity Evaluation. *AAPS PharmSciTech* 16, 5 (October 2015), 1033–1040. <https://doi.org/10.1208/s12249-015-0283-3>
- [42] Krishna Kumar Patel, Muktanand Tripathi, Nidhi Pandey, Ashish Kumar Agrawal, Shilpkala Gade, Md Meraj Anjum, Ragini Tilak, and Sanjay Singh. 2019. Alginate lyase immobilized chitosan nanoparticles of ciprofloxacin for the improved antimicrobial activity against the biofilm associated mucoid *P. aeruginosa* infection in cystic fibrosis.

- International Journal of Pharmaceutics 563, (2019), 30–42. <https://doi.org/10.1016/j.ijpharm.2019.03.051>
- [43] Ewelina Piktel, Urszula Wnorowska, Joanna Depciuch, Dawid Łysik, Mateusz Cieśluk, Krzysztof Fiedoruk, Joanna Mystkowska, Magdalena Parlińska-Wojtan, Paul A Janmey, and Robert Bucki. 2022. N-Acetyl-Cysteine Increases Activity of Peanut-Shaped Gold Nanoparticles Against Biofilms Formed by Clinical Strains of *Pseudomonas aeruginosa* Isolated from Sputum of Cystic Fibrosis Patients. *Infect Drug Resist* 15, (March 2022), 851–871. <https://doi.org/10.2147/IDR.S348357>
- [44] Paul M. Quinton. 1999. Physiological Basis of Cystic Fibrosis: A Historical Perspective. *Physiological Reviews* 79, 1 (January 1999), S3–S22. <https://doi.org/10.1152/physrev.1999.79.1.S3>
- [45] Golnar Rahimzadeh, Majid Saeedi, Mahmood Moosazadeh, Seyyed Mohammad Hassan Hashemi, Amirhossein Babaei, Mohammad Sadegh Rezai, Kosar Kamel, Kofi Asare-Addo, and Ali Nokhodchi. 2021. Encapsulation of bacteriophage cocktail into chitosan for the treatment of bacterial diarrhea. *Sci Rep* 11, 1 (August 2021), 15603. <https://doi.org/10.1038/s41598-021-95132-1>
- [46] Raha Ahmad Raus, Wan Mohd Fazli Wan Nawawi, and Ricca Rahman Nasaruddin. 2021. Alginate and alginate composites for biomedical applications. *Asian Journal of Pharmaceutical Sciences* 16, 3 (2021), 280–306. <https://doi.org/10.1016/j.ajps.2020.10.001>
- [47] Nicole Reyne, Alexandra McCarron, Patricia Cmielewski, David Parsons, and Martin Donnelley. 2023. To bead or not to bead: A review of *Pseudomonas aeruginosa* lung infection models for cystic fibrosis. *Frontiers in Physiology* 14, (2023). Retrieved January 30, 2024 from <https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/fphys.2023.1104856>
- [48] S. G. Rotman, V. Post, A. L. Foster, R. Lavigne, J. Wage-mans, A. Trampuz, M Gonzalez Moreno, W. -J. Metsemakers, D. W. Grijpma, R. G. Richards, D. Eglin, and T. F. Moriarty. 2023. Alginate chitosan microbeads and thermos-responsive hyaluronic acid hydrogel for phage delivery. *Journal of Drug Delivery Science and Technology* 79, (January 2023), 103991. <https://doi.org/10.1016/j.jddst.2022.103991>
- [49] Don B. Sanders, Zhanhai Li, Anita Laxova, Michael J. Rock, Hara Levy, Jannette Collins, Claude Ferec, and Phillip M. Farrell. 2014. Risk Factors for the Progression of Cystic Fibrosis Lung Disease throughout Childhood. *Annals ATS* 11, 1 (January 2014), 63–72. <https://doi.org/10.1513/AnnalsATS.201309-303OC>
- [50] Secretaría de Salud. DETECCIÓN, DIAGNOSTICO Y TRATAMIENTO INTEGRAL DE FIBROSIS QUISTICA. gov. mx. Retrieved August 26, 2022 from <http://www.gob.mx/salud/cnegr/documentos/deteccion-diagnostico-y-tratamiento-integral-de-fibrosis-quistica>
- [51] Michal Shteinberg, Iram J. Haq, Deepika Polineni, and Jane C. Davies. 2021. Cystic fibrosis. *Lancet* 397, 10290 (June 2021), 2195–2211. [https://doi.org/10.1016/S0140-6736\(20\)32542-3](https://doi.org/10.1016/S0140-6736(20)32542-3)
- [52] Michal Shteinberg, Iram J. Haq, Deepika Polineni, and Jane C. Davies. 2021. Cystic fibrosis. *Lancet* 397, 10290 (June 2021), 2195–2211. [https://doi.org/10.1016/S0140-6736\(20\)32542-3](https://doi.org/10.1016/S0140-6736(20)32542-3)
- [53] Michal Shteinberg, Iram J. Haq, Deepika Polineni, and Jane C. Davies. 2021. Cystic fibrosis. *Lancet* 397, 10290 (June 2021), 2195–2211. [https://doi.org/10.1016/S0140-6736\(20\)32542-3](https://doi.org/10.1016/S0140-6736(20)32542-3)
- [54] Kokkarachedu Varaprasad, Tippabattini Jayaramudu, Vimala Kanikireddy, Claudio Toro, and Emmanuel Rotimi Sadiku. 2020. Alginate-based composite materials for wound dressing application: A mini review. *Carbohydrate Polymers* 236, (2020), 116025. <https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2020.116025>
- [55] Cecilia Velino, Francesca Carella, Alessio Adamiano, Maurizio Sanguinetti, Alberto Vitali, Daniele Catalucci, Francesca Bugli, and Michele Iafisco. 2019. Nanomedicine Approaches for the Pulmonary Treatment of Cystic Fibrosis. *Frontiers in Bioengineering and Biotechnology* 7, (2019). Retrieved August 26, 2022 from <https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/fbioe.2019.00406>
- [56] Michael Wilschanski and Peter R. Durie. 2007. Patterns of GI disease in adulthood associated with mutations in the CFTR gene. *Gut* 56, 8 (August 2007), 1153–1163. <https://doi.org/10.1136/gut.2004.062786>
- [57] Thiago Medeiros Zacaron, Mariana Leite Simões e Silva, Mirsiane Pascoal Costa, Dominique Mesquita e Silva, Allana Carvalho Silva, Ana Carolina Morais Apolônio, Rodrigo Luiz Fabri, Frederico Pittella, Helvécio Vinícius Antunes Rocha, and Guilherme Diniz Tavares. 2023. Advancements in Chitosan-Based Nanoparticles for Pulmonary Drug Delivery. *Polymers* 15, 18 (January 2023), 3849. <https://doi.org/10.3390/polym15183849>
- [58] A. Zahoor, Sadhna Sharma, and G. K. Khuller. 2005. Inhalable alginate nanoparticles as antitubercular drug carriers against experimental tuberculosis. *International Journal of Antimicrobial Agents* 26, 4 (October 2005), 298–303. <https://doi.org/10.1016/j.ijantimicag.2005.07.012>
- [59] M Gulrez Zariwala, Harshada Bendre, Anatoliy Markiv, Sebastien Farnaud, Derek Renshaw, Kevin MG Taylor, and Satyanarayana Somavarapu. 2018. Hydrophobically modified chitosan nanoliposomes for intestinal drug delivery. *Int J Nanomedicine* 13, (September 2018), 5837–5848. <https://doi.org/10.2147/IJN.S166901>

Los estados de la materia y el diagrama de fases

José Torres Arenas

División de Ciencias e Ingenierías, Campus León. Universidad de Guanajuato.
Loma del Bosque 103, Lomas del Campestre, 37150, León, Gto., México
jtorres@fisica.ugto.mx

Desde mis estudios de primaria, mis profesoras (todos mis profesores en la primaria fueron mujeres, y debo decir, todas ellas excelentes profesoras) me dijeron que la materia se podía encontrar en tres estados: sólido, líquido y gaseoso. Esto me hacía completo sentido, toda la materia a mi alrededor encajaba perfectamente en alguna de estas categorías. Podía ver, por ejemplo, las rocas, los platos y vasos de mi casa en un estado sólido; el agua y los refrescos que bebía en estado líquido, y el vapor de agua de las cazuelas humeantes de la cocina de mi casa en un estado gaseoso. ¡Todo encajaba perfectamente!

Cuando ingresé a la universidad a estudiar la licenciatura en Física, este esquema se mantuvo más o menos igual, pero empezó a flaquear. Empecé a escuchar que la materia podía estar en estados más exóticos, como el plasma o el condensado de Bose-Einstein. Para ser sincero, no entendía gran cosa sobre esos nuevos estados de la materia en aquellos tiempos. Muchos años después comprendí un poco más. La naturaleza es mucho más diversa de lo que pensaba en aquellos años, ¡y mucho más interesante!

No hablaré en este escrito sobre esos nuevos estados de la materia que van más allá del sólido, líquido y gaseoso, pues esa es otra historia (y muy interesante, por cierto). Me gustaría quedarme al nivel de lo que mis profesoras de primaria me enseñaron y aquello que la experiencia cotidiana reafirmaba de que en la naturaleza existen tres estados en los cuales la materia se manifiesta. Aun quedándonos a este nivel de descripción, la situación dista mucho de ser sencilla.

Si pensamos en un compuesto aparentemente simple, como el agua (una pequeña molécula formada por dos átomos de hidrógeno y uno de oxígeno) la cual, además, estamos cotidianamente acostumbrados a ver en sus tres estados (sólido, líquido y gaseoso; ver Figura 1), estaríamos tentados a pensar que la descripción de cómo se transforma de uno de estos estados a otro sería una cosa simple. Pero no lo es.

A los científicos nos gusta describir los estados de agregación de los materiales en gráficas específicas a las que llamamos diagrama de fases. A los estados de la materia



Figura 1. Agua en sus tres estados de la materia. Fuente: <https://pixabay.com/es/photos/iceberg-ant%C3%A1rtida-polar-hielo-mar-404966/>

nos gusta llamarles “fases de la materia”. Decimos entonces que la materia se presenta en tres “fases”: sólida, líquida y gaseosa. De allí viene el nombrecito de “diagrama de fases”, que no sería otra cosa más que un diagrama donde podemos visualizar los diferentes estados de la materia.

El diagrama de fases usual consiste en un plano, donde en uno de los ejes ponemos la presión a la cual se encuentra el material y en el otro la temperatura. Un diagrama de fases típico se muestra en la Figura 2.

Lo que nos dice este diagrama es que, para un cierto valor de presión y temperatura, un sistema determinado (como el agua) se encontrará en alguna de las tres fases mencionadas. Existen, sin embargo, algunos puntos especiales en esta representación gráfica. Si observamos cualquier punto que se encuentre sobre alguna de las curvas

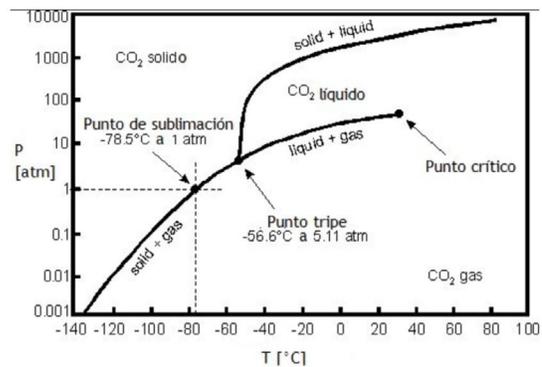


Figura 2. Diagrama de Fases del CO₂ Fuente: https://www.researchgate.net/figure/Figura-32-Diagrama-de-fase-del-Dioxido-de-carbono-CO-2-19_fig3_265842284

mostradas, a este punto le corresponderá un valor de presión y temperatura a los cuales el sistema no se encontrará en una sola fase, ¡sino en dos a la vez! En ese punto decimos que las dos fases coexisten. Incluso existe un punto especial (el único en la gráfica) en el cual las tres curvas coinciden, este punto es llamado el *punto triple*. En él, las tres fases (sólida, líquida y gaseosa) coexisten. Es decir que, para esos valores

particulares de la presión y la temperatura podemos encontrar a la sustancia ¡en las tres fases al mismo tiempo!

A cada una de las curvas que separan una fase de otra las llamamos curvas de coexistencia. En el diagrama mostrado tenemos tres de ellas, las curvas de coexistencia sólido-gas, sólido-líquido y líquido-gas. Existe otro punto especial en ese diagrama y es el punto donde finaliza la curva de coexistencia líquido-gas. Este punto es llamado el *punto crítico*. Es el último par de valores de presión y temperatura donde las fases líquida y gaseosa pueden coexistir. A esos valores les llamamos presión y temperatura críticas.

En el punto crítico de un material ocurren cosas bastante extrañas. Cantidades como la densidad de la sustancia tienen grandes fluctuaciones en su valor. Esto da lugar a un fenómeno conocido como *opalescencia crítica*, donde súbitamente el material se vuelve turbio, pues las grandes fluctuaciones en la densidad provocan una gran dispersión de la luz que llega a este material.

Para valores mayores de la presión y de la temperatura críticas debemos adentrarnos en un mundo diferente, el de los llamados *fluidos supercríticos*. Un mundo donde las propiedades del material no son ni las de un líquido ni tampoco las de un gas, sino algo intermedio entre ellas. Estas propiedades “híbridas” de los fluidos en esta región del diagrama de fases es utilizada para realizar, de manera más eficiente y limpia, varios tipos de procesos industriales.

La construcción del diagrama de fases de una sustancia nunca es una tarea sencilla. Ya sea que se utilicen herramientas teóricas,

experimentales o ambas, se requiere de un esfuerzo considerable. Si pensamos en el ejemplo del H_2O , del cual hablamos anteriormente, se ha determinado con el paso de los años que la complejidad del diagrama de fases del agua es vasta, en particular en la fase sólida. Se conocen 11 tipos de sólidos del agua, es decir “11 tipos de hielos”, cada uno con propiedades diferentes. ¡Un verdadero rompecabezas!. Ver figura 3.

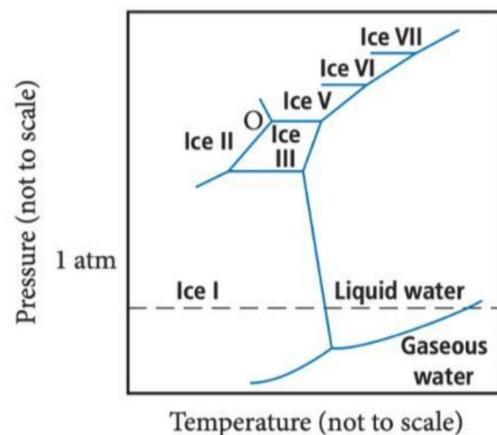


Figura 3. Diagrama de Fases del H_2O . Fuente: <https://www.chegg.com/homework-help/questions-and-answers/high-pressure-phase-diagram-ice-shown--notice-high-pressure-ice-exist-several-different-so-q91262448>

A pesar de las dificultades que se pueden enfrentar en la construcción de diagramas de fases para diversas sustancias, yo puedo asegurar que vale la pena el esfuerzo. El conocimiento de estos diagramas de fases permite diseñar metodologías prácticas de alta precisión y bajar costos de producción en una gran cantidad de procesos, como aquellos de la industria de los alimentos o de la farmacéutica, por mencionar algunos ejemplos. Una cuestión que toca muchos aspectos del día a día de todos nosotros, desde la producción del café soluble que tomamos en la mañana hasta muchos de los medicamentos que consumimos. Quizás la próxima vez que veamos un cubo de hielo derritiéndose podamos mirarlo con una perspectiva diferente.

¿Por qué estudiar la física de gotas?

Miguel Ángel Quetzeri Santiago

Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México,
Circuito Exterior S. N. Ciudad Universitaria, CP 04510, CDMX, México
mquetzeri@materiales.unam.mx

Resumen

En este artículo exploramos la intrigante ciencia detrás de las gotas de agua y otros líquidos. Desde Leonardo da Vinci, quien las estudiaba detenidamente y hacía bosquejos con papel y lápiz, hasta el desarrollo de cámaras de alta velocidad, exponemos cómo se ha estudiado la física de gotas a través de la historia. Además, mostramos cómo el estudio del impacto de gotas nos sirve para optimizar tecnologías como la impresión por inyección de tinta, la creación de ropa impermeable y el diseño de estrategias para prevenir salpicaduras no deseadas. Las gotas se encuentran a nuestro alrededor, en todo momento, y para estar presentes en todo momento sabemos poco de ellas. Espero que este artículo pueda clarificar algunos de los fenómenos y aplicaciones que tienen la basta y fascinante física de las gotas.

Palabras clave:

gotas, salpicaduras, impresión, ropa impermeable.

Cuando me encuentro en una reunión familiar o con amigos que no están en el ámbito científico y me preguntan acerca de mi investigación tiendo a responder que:

“Me dedico a estudiar gotas, física de gotas”. Su cara siempre es de sorpresa y me preguntan: ¿Cómo que gotas?, ¿de qué?, ¿por qué y para qué sirve eso? Este artículo está diseñado precisamente para responder a esas personas que se preguntan sobre la importancia de la física de gotas. Espero que, al finalizar su lectura, no solo comprendan mejor este fascinante mundo, sino que también compartan un poco de mi interés por las gotas y su interacción con distintas superficies.

Las gotas están presentes en nuestra vida diaria, prácticamente en todo momento. Cuando abrimos el grifo para lavarnos las manos o los trastes se genera un chorro de agua, mismo que a partir de cierta distancia se romperá en gotas (figura 1a). En la ducha vemos como las gotas caen al piso y salpican. Cuando llueve, múltiples gotas caen sobre nosotros, y si no tenemos la ropa adecuada acabaremos mojados. Además, el agua de lluvia puede erosionar el suelo y facilitar la transmisión de enfermedades entre las plantas. Igualmente, si ponemos atención podemos diferenciar el sonido de la lluvia: si impacta en una superficie sólida (“splash”) o en una líquida, como una alberca o un vaso con agua (“plop”). Pero, ¿por qué debería-

mos interesarnos en la física de las gotas? En este artículo empezaré con un poco de la historia de la física de gotas y desarrollaré hasta llegar a la época actual, centrándome en su impacto en diversas superficies y ejemplificando cómo estas interacciones se traducen en aplicaciones innovadoras.

Un poco de historia

Dado lo común que es para las personas interactuar con gotas de agua, estudiarlas con detenimiento se remonta hasta la época de Leonardo da Vinci, en el Códice de Leicester [1] (figura 1 b). Da Vinci estudió la “cohesión” de diferentes fluidos y su influencia en la generación de gotas. Lo que da Vinci describía como cohesión, hoy lo conocemos como tensión superficial, un concepto fundamental al hablar de gotas. La tensión superficial de un líquido se refiere a la fuerza por unidad de área que actúa en su superficie. Esta fuerza es la que permite a ciertos insectos mantenerse sobre el agua y a los gecos (un tipo de reptil) caminar sobre su superficie [2]. Lord Rayleigh, en el siglo XIX, demostró que entre mayor sea la tensión superficial de un líquido, es más fácil que un chorro se fragmente en gotas [3,4]. Lo anterior es porque la superficie que minimiza la energía de un líquido rodeado solo por aire es una esfera, es decir, una gota. Si un líquido se encuentra en cualquier otra configuración tratará de formar una esfera, haciéndolo más rápido entre más grande sea su tensión superficial. A finales del siglo XIX, Worthington, con la invención de la cámara fotográfica pudo estudiar con más detalle los impactos de gotas en diferentes superficies [5]. Sin embargo, estos fenómenos se desarrollan en un par de milésimas de segundo, más rápido que un parpadeo promedio (100 milésimas de segundo). Fue solo con el desarrollo de la fotografía de

alta velocidad cuando los más intrincados detalles pudieron ser capturados. Harold Edgerton, un pionero en esta técnica, creó imágenes que no solo son científicamente esclarecedoras sino también estéticamente placenteras, algunas de las cuales ahora se exhiben en galerías de arte (figura 1c).

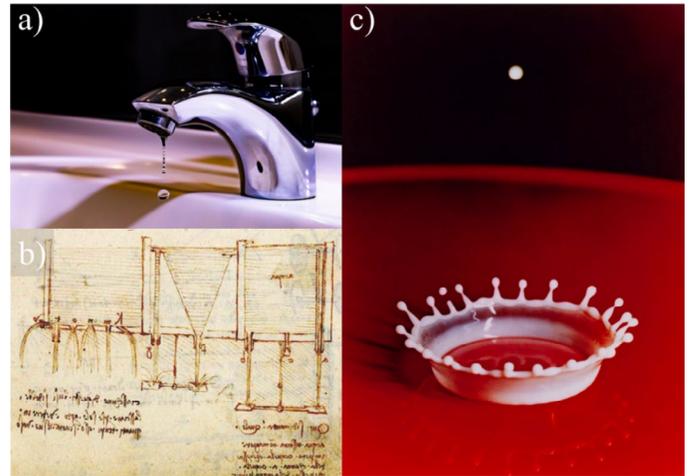


Figura 1. a) Chorro de agua saliendo de un grifo y rompiéndose en gotas (imagen tomada de Google). b) Dibujo de Leonardo Da Vinci del Código Leicester, en donde estudia la “cohesión” de líquidos (figura tomada del Códice de Leicester- Librería Nacional de España). c) Foto de Harold E. Edgerton de una gota de leche impactando un charco (Harold Eugene Edgerton, Milk Drop Coronet, 1957, dye transfer print, 50.5 cm x 40.64 cm (SFMOMA)).

Impacto de gotas en superficies sólidas

Actualmente, el impacto de gotas ha cobrado un papel esencial en el desarrollo de tecnologías. Desde la impresión por inyección de tinta e impresión 3D hasta el rocío de fertilizantes en las plantas, pasando por la soldadura de piezas electrónicas [6,7]. En todas las aplicaciones mencionadas es crucial comprender cómo se comportan las gotas al impactar superficies. Ya sea en la impresión por inyección, donde necesitamos que las gotas se esparzan controladamente y se adhieran a la superficie, o en situaciones como la lluvia, donde queremos que las gotas no se adhieran para mantenernos secos o evitar estancamientos.

Abordar estos fenómenos puede ser un desafío, ya que, como mencionaba anteriormente, el impacto de gotas dura unas cuantas milésimas de segundo. Afortunadamente, gracias a avances como las cámaras de alta velocidad que pueden grabar hasta un millón de cuadros por segundo (las cámaras convencionales graban a sesenta), hemos podido captar con detalle y precisión estos eventos fugaces. Gracias a estos avances se han encontrado diversos resultados, después del impacto de una gota en una superficie sólida. Dependiendo de factores como el tamaño de la gota, su tensión superficial y viscosidad, la gota puede esparcirse y depositarse en la superficie, rebotar o incluso fragmentarse en gotas secundarias, generando salpicaduras [7]. Sorprendentemente, la presión atmosférica es relevante para que una gota salpique o no [8]. Por ejemplo, si una gota salpicara en la base del monte Everest, no salpicaría en la punta, solo porque la presión atmosférica es menor.

Además, las propiedades de la superficie juegan un papel importante [9]. La humectabilidad, es decir, la capacidad de una superficie para atraer o repeler un líquido, desencadena una serie de comportamientos. Por ejemplo, una superficie hidrofóbica, como las hojas de loto (figura 2a), permite que las gotas se muevan con facilidad y sean fáciles de eliminar. Por otro lado, una superficie hidrofílica, como el vidrio, hace que el agua se adhiera a ella. El ángulo que forma la gota de agua con la superficie nos indica si es hidrofóbica o hidrofílica. Si el ángulo es mayor a 90 grados, la superficie es hidrofóbica y si es menor a 90 grados es hidrofílica (figura 2b).

Cuando una gota de agua impacta una superficie hidrofílica, la gota se esparcirá

y se depositará. En contraste, cuando una gota impacta una superficie hidrofóbica la gota se esparcirá, pero intentará regresar a su forma esférica y eventualmente rebotará de la superficie. Al aumentar la velocidad de impacto la gota puede incluso salpicar. Encontrar la velocidad crítica a la cual una gota salpica o rebota es esencial para diseñar estrategias que faciliten o eviten el rebote y salpicaduras (en aplicaciones para la industria de recubrimientos y la aviación, por ejemplo). En la primera, es crucial que las gotas de pintura o se depositen eficazmente sobre las superficies para evitar el desperdicio de material y prevenir que acabe en lugares no deseados. Del mismo modo, en el diseño de aviones, es fundamental que las gotas de lluvia no se acumulen en las superficies, ya que esto podría aumentar el peso de la aeronave, resultando en un mayor consumo de combustible.

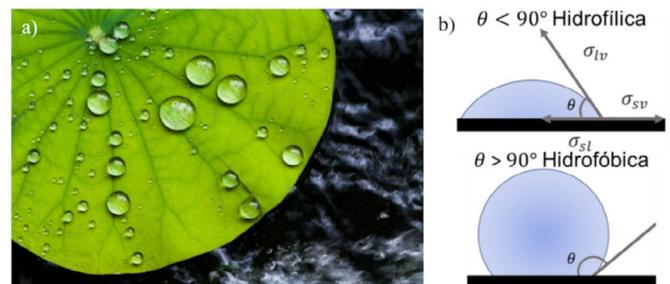


Figura 2. a) Hoja de loto con gotas en su superficie. Las gotas se mantienen considerablemente esféricas, ya que la superficie es hidrofóbica (imagen tomada de Google). b) Ángulo de contacto en una superficie hidrofílica (arriba) y una hidrofóbica (abajo).

En la búsqueda constante para fabricar superficies resistentes al agua se han desarrollado diversas estrategias innovadoras. Una de ellas es la incorporación de estructuras a nivel milimétrico, inspiradas en la evolución de las mariposas, que les permite mantenerse secas bajo la lluvia [10, 11] (figura 3d). Además, es posible modificar las superficies a nivel químico para lograr propiedades hidrofóbicas. Por otro lado, también se pue-

den alterar las propiedades de las gotas en sí mismas. Se han explorado enfoques como la adición de sustancias químicas, como sales o jabón, conocidas como surfactantes, que reducen la tensión superficial del líquido. Esta reducción en la tensión superficial conlleva a una disminución del ángulo de contacto de la gota con la superficie. Sin embargo, la eficacia de los surfactantes puede ser limitada en situaciones cuando la velocidad de impacto es muy alta [12, 13].

Para superar estas limitaciones se han desarrollado métodos más sofisticados que involucran campos eléctricos. Al aplicar un voltaje a la superficie se logra reducir el ángulo de contacto y, al retirar el voltaje, este regresa a su posición original. Estos sistemas eléctricos se han utilizado con éxito para controlar el movimiento de las gotas, desplazándolas de un lugar a otro, mezclándolas o incluso previniendo salpicaduras y rebotes no deseados [14] (figura 3 b).

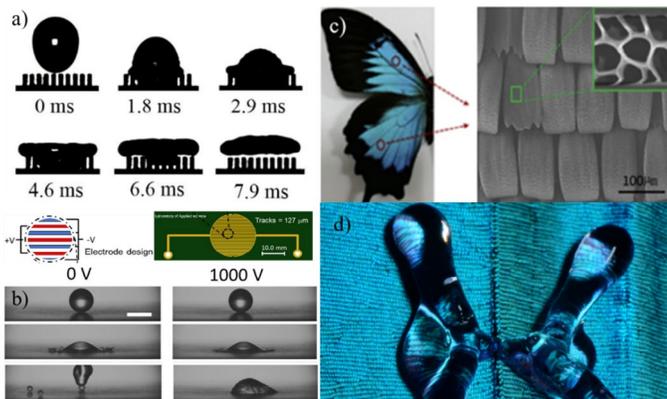


Figura 3. a) Postes micrométricos que facilitan que la gota rebote (Imagen adaptada de la referencia 8). b) Campos eléctricos en la superficie pueden controlar la adhesión de una gota. c) Microestructura en las alas de una mariposa (Imagen adaptada de la referencia 9). d) Impacto de una gota en las alas de una mariposa (Imagen tomada de <https://www.sciencenews.org/article/how-butterflies-stay-dry#:~:text=WATERPROOF%20As%20a%20water%20droplet,than%20a%20smooth%20surface%20would>).

Impacto de gotas en textiles

Otro aspecto fundamental de la investigación en la física de las gotas se centra en su interacción con materiales textiles. Más allá de lo que hemos explorado en términos de impacto en superficies sólidas, es crucial comprender cómo las gotas pueden interactuar con los textiles. Este tipo de investigación no solo es relevante para comprender la dinámica de las manchas en prendas, sino que también tiene aplicaciones en la reconstrucción de escenas forenses. En tales estudios, la forma de las manchas de líquidos en textiles puede proporcionar pistas sobre el momento y circunstancias en que ocurrieron ciertos eventos [15].

Además, se han desarrollado tejidos especiales que pueden capturar agua de la niebla y la humedad del ambiente. Esta tecnología tiene aplicaciones prácticas, especialmente en áreas donde la lluvia es escasa. Por ejemplo, estos tejidos pueden utilizarse para recolectar agua potable en regiones áridas [16].

La investigación de impacto de gotas en textiles también tiene un impacto directo en el desarrollo de ropa resistente al agua, así como en la prevención de la propagación de enfermedades respiratorias como el Covid-19, que se transmiten a través de las gotas [17, 18]. Estudios recientes han identificado dos modos de penetración cuando una gota impacta un material textil [19]. En la penetración parcial, la gota atraviesa el tejido, pero gran parte de su volumen es absorbido por la capa superior del material, quedando retenida por este. En el caso de la penetración completa, la gota penetra en el tejido y forma filamentos en la parte inferior, que eventualmente se rompen en



Figura 4. Ejemplos de gotas impactando textiles. a) Esquema del funcionamiento de una mascarilla (Imagen adaptada de la referencia 12). b) Gota impactando textiles, sin penetración (arriba), penetrando parcialmente (en medio) y totalmente (abajo). c) Disminución de la expulsión de gotas al estornudar mediante el uso de mascarillas (Imagen adaptada de <https://www.dailymail.co.uk/news/article-8553491/Video-reveals-homemade-masks-TWO-layers-fabric.html>).

gotas secundarias. Si una gota atraviesa (o no) completamente el tejido depende de varios factores, como la velocidad de impacto, el tamaño y la tensión superficial de la gota, el tamaño de la malla del tejido y su rigidez [19, 20]. En términos simples, es más probable que una gota atraviese un tejido estirado y rígido en comparación con uno que pueda deformarse, ya que la deformación dispersa la energía cinética del impacto de la gota. Los resultados sugieren que, para una típica gota de lluvia que impacta en un tejido rígido, se requeriría una trama de aproximadamente $100\ \mu\text{m}$ (similar al grosor de un cabello humano) para evitar la penetración.

Recapitulación

En resumen, la física de las gotas y su impacto en diversas superficies es un campo de investigación fascinante y relevante en nuestra vida cotidiana. Desde mentes curiosas como la de Leonardo da Vinci, hasta los avances tecnológicos de la fotografía de alta velocidad de Harold Edgerton, se ha contribuido a revelar los secretos de estas pequeñas maravillas. El estudio de cómo las gotas interactúan con superficies sólidas y textiles no solo nos ha permitido desarrollar tecnologías innovadoras, como la impresión por inyección de tinta y ropa

impermeable, sino también ha desempeñado un papel fundamental en la prevención de enfermedades y la optimización de sistemas agrícolas. En un mundo donde las gotas son tan omnipresentes, entender su comportamiento es clave para resolver desafíos y mejorar nuestra calidad de vida. Así que la próxima vez que veas una gota de lluvia caer o una impresora de inyección de tinta en acción, recuerda que detrás de ese simple acto hay un fascinante mundo de ciencia e innovación en constante evolución.

Agradecimientos

A la DGAPA por el apoyo a través del subprograma de Incorporación de Jóvenes Académicos de Carrera (SIJA).

Referencias

- [1] Da Vinci, L. (2012). The notebooks of Leonardo da Vinci (Vol. 1). Courier Corporation.
- [2] Nirody, Jasmine A., et al. "Geckos race across the water's surface using multiple mechanisms." *Current Biology* 28.24 (2018): 4046-4051.
- [3] Rayleigh, L. (1878). On the instability of jets. *Proceedings of the London mathematical society*, 1(1), 4-13.
- [4] Rayleigh, L. (1879). On the capillary phenomena of jets. *Proc. R. Soc. London*, 29(196-199), 71-97.
- [5] Worthington, A. M. (1881). On Impact with a Liquid Surface. *Proceedings of the Royal Society of London*, 33, 347-349.
- [6] Quetzeri-Santiago, M. A., Hedegaard, C. L., & Castrejón-Pita, J. R. (2019). Additive manufacturing with liquid latex and recycled end-of-life rubber. *3D Printing and Additive Manufacturing*, 6(3), 149-157.

- [7] Meza-Alarcon, K. L., Quetzeri-Santiago, M. A., Neri-Flores, M. A., del Río, J. A., & Castrejón-Pita, J. R. (2023). Splashing of Sn–Bi–Ag solder droplets. *Physics of Fluids*, 35(8).
- [7] Yarin, A. L. (2006). Drop impact dynamics: Splashing, spreading, receding, bouncing.... *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 38, 159-192.
- [8] Xu, L., Zhang, W. W., & Nagel, S. R. (2005). Drop splashing on a dry smooth surface. *Physical review letters*, 94(18), 184505.
- [9] Quetzeri-Santiago, M. A., Yokoi, K., Castrejón-Pita, A. A., & Castrejón-Pita, J. R. (2019). Role of the dynamic contact angle on splashing. *Physical review letters*, 122(22), 228001.
- [10] Liu, Y., Moevius, L., Xu, X., Qian, T., Yeomans, J. M., & Wang, Z. (2014). Pancake bouncing on superhydrophobic surfaces. *Nature physics*, 10(7), 515-519.
- [11] Bird, J. C., Dhiman, R., Kwon, H. M., & Varanasi, K. K. (2013). Reducing the contact time of a bouncing drop. *Nature*, 503(7476), 385-388.
- [12] Hoffman, H., Sijts, R., de Goede, T., & Bonn, D. (2021). Controlling droplet deposition with surfactants. *Physical Review Fluids*, 6(3), 033601.
- [13] Varghese N., Sykes, T. C., Quetzeri-Santiago, M. A., Castrejón-Pita, A. A., & Castrejón-Pita, J. R. (2024). Effect of surfactants on the splashing dynamics of drops impacting smooth surfaces. *Langmuir* (aceptado), doi: 10.1021/acs.langmuir.3c03248.
- [14] Quetzeri-Santiago, M. A., Castrejón-Pita, J. R., & Castrejón-Pita, A. A. (2021). Controlling droplet splashing and bouncing by dielectrowetting. *Scientific Reports*, 11(1), 21410.
- [15] Williams, E. M., Dodds, M., Taylor, M. C., Li, J., & Michielssen, S. (2016). Impact dynamics of porcine drip bloodstains on fabrics. *Forensic science international*, 262, 66-72.
- [16] Qadir, M., Jiménez, G. C., Farnum, R. L., & Trautwein, P. (2021). Research history and functional systems of fog water harvesting. *Frontiers in Water*, 3, 675269.
- [17] Sharma, S., Pinto, R., Saha, A., Chaudhuri, S., & Basu, S. (2021). On secondary atomization and blockage of surrogate cough droplets in single-and multilayer face masks. *Science advances*, 7(10), eabf0452.
- [18] Mittal, R., Breuer, K., & Seo, J. H. (2023). The Flow Physics of Face Masks. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 55, 193-211.
- [19] Zhang, G., Quetzeri-Santiago, M. A., Stone, C. A., Botto, L., & Castrejón-Pita, J. R. (2018). Droplet impact dynamics on textiles. *Soft matter*, 14(40), 8182-8190.
- [20] Kooij, S. A., Moqaddam, A. M., de Goede, T. C., Deroome, D., Carmeliet, J., Shahidzadeh, N., & Bonn, D. (2019). Sprays from droplets impacting a mesh. *Journal of Fluid Mechanics*, 871, 489-509.

De la vis impresa de Hiparco a la cantidad de movimiento de Newton

José Luis Álvarez García

Departamento de Física, Facultad de Ciencias, UNAM
josel.alvarezgarcia@gmail.com

Resumen

La explicación que Aristóteles (384-322 a.n.e.) daba al fenómeno del lanzamiento de proyectiles nunca convenció a los expertos. Hiparco de Nicea, en el siglo II a.n.e., plantea el concepto de *vis impresa* para explicarlo. Los eruditos del medioevo, los pensadores árabes y, más tarde, filósofos de las universidades de Oxford y París, continuaron los estudios para la explicación de este fenómeno desarrollando el concepto planteado por Hiparco hasta llegar al concepto de cantidad de movimiento expuesto en *Los Principia* de Newton, que es uno de los grandes logros en la historia del pensamiento científico y ahí Newton introduce el concepto de *masa*. No obstante los espectaculares éxitos de la física newtoniana, una de las más sorprendentes características de la historia de la física es la confusión que rodea a la definición de masa, que es el término clave de la dinámica.

Introducción

En este trabajo se presenta una historia sobre el episodio de la ciencia que trata de las explicaciones sobre el fenómeno del lanzamiento de proyectiles. Para narrar esta historia se utiliza, en lo general, el modelo

de desarrollo de la ciencia planteado por T. S. Kuhn en su libro *La estructura de las revoluciones científicas* [1].

Dentro del modelo de Thomas S. Kuhn sobre el desarrollo del conocimiento científico se plantea la secuencia ciencia normal-crisis-revolución-nueva ciencia normal. Este patrón o estructura general comienza con una etapa “preparadigmática” o “pre-ciencia”, en donde aparecen coexistiendo las variadas “escuelas” que se disputan entre sí el dominio en un campo particular de investigación. Este periodo de las distintas escuelas en disputa finaliza cuando el campo de investigación se unifica bajo la dirección de un marco común de supuestos básicos, que Kuhn denomina “paradigma”. El consenso acerca de un paradigma marca el inicio de una etapa de “ciencia normal”, y una vez que una ciencia específica ha quedado individualizada, como resultado precisamente de dicho consenso, pasa por la secuencia mencionada.

En términos muy generales, Kuhn distingue dos maneras principales mediante las cuales quiere emplear el término “paradigma”.

Una es como logro o realización concreta y otra es como conjunto de compromisos compartidos. El primer sentido se refiere a las soluciones exitosas y sorprendentes de ciertos problemas, las cuales son reconocidas por toda la comunidad respectiva. El segundo sentido se refiere al conjunto de supuestos o compromisos básicos que comparte la comunidad encargada de desarrollar una disciplina científica. Kuhn mismo reconoce el carácter polisémico del término y realiza un intento por clarificarlo definiéndolo como “la matriz disciplinaria” [2].

Ahora bien, ningún paradigma que proporcione una base para la investigación resuelve por completo todos sus problemas. Podemos entonces hablar de ciencia normal como una actividad de resolución de enigmas, entendidos estos como problemas que la teoría en un determinado momento no ha resuelto, pero que se espera que lo haga. Sin embargo, la investigación que se realiza en el periodo de ciencia normal, con su creciente especialización y ampliación del campo de aplicaciones, conduce, contrariamente a sus propósitos, al planteamiento de problemas que se resisten a ser resueltos con las herramientas del paradigma vigente; estamos entonces en presencia de una “anomalía”.

No obstante, surge el problema de cuándo una anomalía obligará a un cambio en los fundamentos de alguna rama de la ciencia, esto es, que constituya un auténtico contraejemplo; o bien, puede suceder que tal anomalía sea solo un enigma que será resuelto tarde o temprano dentro del paradigma prevaleciente. Cuando se considera que la anomalía es más que un simple enigma por resolver, comienza la etapa de “crisis” hacia la “ciencia extraordinaria”. Este

tipo de anomalías provocan crisis y resultan auténticos contraejemplos, que para ser resueltos es necesaria la construcción de otro marco teórico, esto es, de un nuevo paradigma que sustituya al anterior. Este tipo de anomalías conducen primero a una crisis y después a lo que Kuhn llama una “revolución científica” [3].

Si bien no se puede caracterizar de manera general en qué circunstancias una anomalía provoca una crisis, o sea el brote de una serie de intentos de reajuste o modificación de los supuestos básicos del paradigma vigente, sí queda claro que las anomalías son una condición necesaria, aunque no suficiente para que esto ocurra.

Para finalizar esta sección, es preciso hacer una aclaración. El tema que es objeto de este trabajo (lanzamiento de proyectiles) proporciona un excelente ejemplo (aunque parcial) del desarrollo de la ciencia en términos del modelo kuhniano. Es un ejemplo parcial, porque la revolución científica de los siglos XVI y XVII se produjo en dos frentes del conocimiento científico: en la física del movimiento y en la cosmología.

El paradigma aristotélico

El estudio sistemático y racional del fenómeno del cambio o movimiento en la naturaleza tiene sus orígenes en las ricas colonias jonias de las costas mediterráneas del Asia Menor. En el siglo VI a.n.e. existía el viejo axioma filosófico “Ignoratio motu, ignoratur natura”. Cualquier filosofía que aspirara a ser considerada verdadera debía explicar el fenómeno del cambio o movimiento. Todos los filósofos naturales dieron distintas respuestas, ya sea para explicar cómo está hecho el mundo o para tratar de explicar el cambio o movimiento en la naturaleza [4].



Cambio y movimiento en la naturaleza

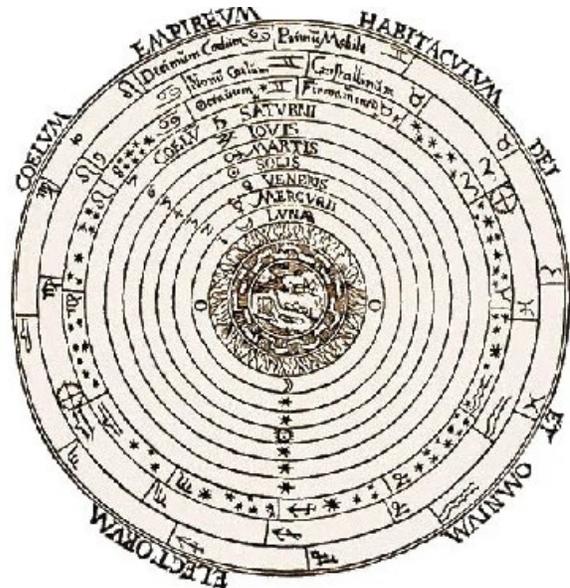


Las colonias jónicas y los antiguos filósofos griegos

Aristóteles realiza la primera síntesis en la historia sobre el conocimiento del mundo natural en el siglo IV a.n.e. Sintetiza el conocimiento de los filósofos naturales anteriores y los de su época, y hace sus propias aportaciones. En particular, divide el Universo en dos regiones: la región sublunar, que es la región del cambio, para satisfacer las exigencias de la filosofía de Heráclito (540-480 a.n.e.), que fue el primer filósofo que abordó directamente el problema del cambio en la naturaleza y que dictaba que lo fundamental en ella era el cambio y que este constituía la auténtica realidad en el mundo natural; por el otro lado, para satisfacer la filosofía de Parménides (c.525-470 a.n.e.), estaba la región supralunar o celeste, externa y rodeando a la anterior, y era la región de la perfección y la inmutabilidad y donde nunca existía el cambio [5].



Aristóteles



El universo aristotélico

El paradigma aristotélico posee las siguientes características:

En el terreno cosmológico: la noción de una Tierra inmóvil en el centro de un Universo finito dividido en las dos grandes regiones mencionadas anteriormente; preeminencia de las figuras circular y esférica como formas perfectas que siguen la naturaleza. El *plenum* aristotélico, que consiste en que el Universo está lleno y no admite el vacío, en la región

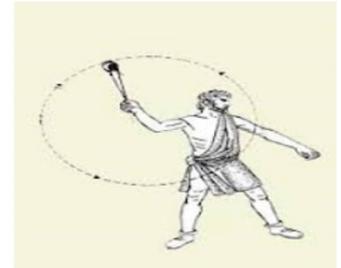
sublunar están los elementos graves (agua y tierra) y los elementos leves (aire y fuego), la región supralunar o celeste está llena de una quinta esencia muy sutil llamada éter; el *horror vacui*, la naturaleza tiene horror al vacío y no permite que este se forme.

En el terreno de la física del movimiento: movimientos naturales y violentos, los primeros, como es el caso de la caída de los graves, se dan de manera natural y no necesitan de un “motor” para ocurrir, los segundos sí necesitan de un “motor” para poder realizarse; la noción de “lugar natural” para todos los cuerpos en el Universo; el estado natural de los cuerpos es el reposo, la permanencia del movimiento es imposible [6].

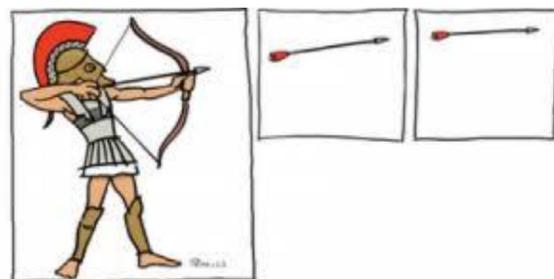
Una actitud epistemológica que es fundamental dentro del paradigma aristotélico es la estricta separación que debía haber entre matemáticas y los fenómenos de la naturaleza (física). Según Aristóteles, la física trata de objetos concretos que tienen materia y forma; las matemáticas son abstracciones. Por lo tanto, no deben ni pueden mezclarse, son géneros diferentes.

Aristóteles estudia el movimiento y el cambio como fenómenos básicos de la naturaleza. Para él existen cuatro tipos de cambio o movimiento en general: substanciales, cualitativos, cuantitativos y locales. A partir de estos cuatro tipos mencionados, al explicar el *movimiento local*, desarrolla su explicación de la caída de los graves y del lanzamiento de proyectiles [7]. Las explicaciones que Aristóteles daba para estos movimientos jamás convencieron a los especialistas; eran anomalías que a la larga constituyeron el telón de fondo que representó el derrumbamiento de la física aristotélica. Estas anomalías permanecie-

ron durante largo tiempo sin provocar una crisis; fueron realizados muchos estudios, ajustes y adecuaciones para conservar los fundamentos del paradigma aristotélico, y siempre fueron considerados dentro del estricto marco de la propia filosofía aristotélica hasta que provocaron una crisis en los siglos XVI y XVII que, junto con las anomalías que se dieron en el terreno de la cosmología, provocaron el derrumbamiento del paradigma aristotélico.



Los cuatro tipos de cambio o movimiento según Aristóteles



Tipo de cambio local

Así, los estudios sobre el *movimiento local* que desarrollaron los eruditos medievales como crítica a las teorías aristotélicas sobre la caída de los cuerpos y el lanzamiento de proyectiles, cobraron una total autonomía y son los que hereda la física clásica de Galileo y Newton, en donde aparece un nuevo paradigma que sustituirá al aristotélico [8].

Críticas a las teorías aristotélicas sobre el movimiento local

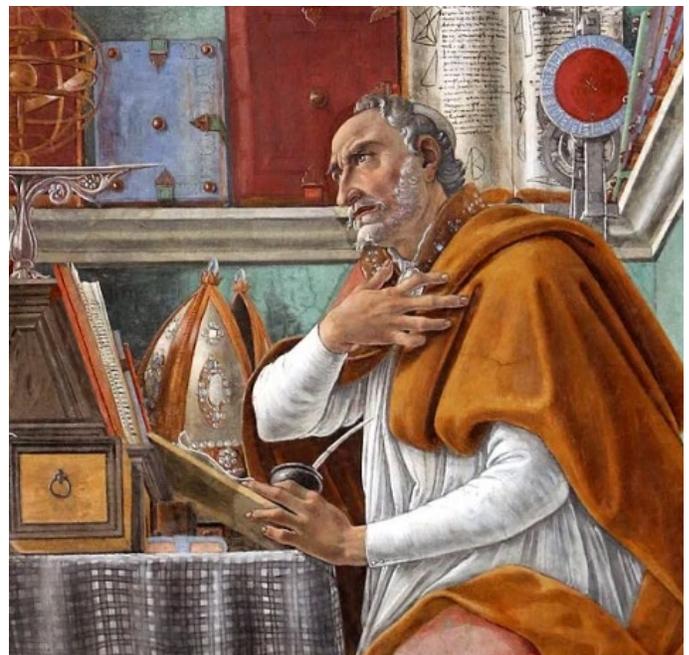
En el lanzamiento de proyectiles, una pregunta que surgía de inmediato era, ¿cómo es que el móvil continúa moviéndose aun cuando ha dejado de estar en contacto con el motor? La explicación aristotélica era que el medio actuaba de motor y era el que mantenía al móvil moviéndose; al mismo tiempo, el medio también ofrecía resistencia al movimiento. Este doble papel del medio era contradictorio y jamás convenció a los especialistas; constituía una anomalía. Y son los fenómenos del lanzamiento de proyectiles y el de la caída de los cuerpos los que fueron estudiados por parte de pensadores del periodo helenístico y los eruditos medievales y constituyeron lo que finalmente sería el derrumbamiento de la física aristotélica [9].

Hiparco (siglo II a.n.e.) introduce el concepto de *vis impressa* (fuerza impresa), según el cual un proyectil se mueve después de haber cesado el contacto con el motor por una fuerza “transmitida” al móvil. Esta fuerza absorbida por el móvil se extingue gradualmente. Algo similar a lo que ocurre al ser calentada una barra de hierro, la cual paulatinamente se enfría al ser retirada del fuego. El calor transmitido a la barra de hierro era considerado como una cualidad, ya que la física aristotélica era una física de cualidades y no era matematizable ni cuantificable. Sin embargo, una diferencia importante entre las teorías de Aristóteles e Hiparco para el movimiento de proyectiles era que para el primero la fuerza que impulsaba al proyectil provenía del propio medio siendo, por lo tanto, externa al proyectil. Para el segundo, la responsable de su movimiento era una fuerza interna “almacenada” en el proyectil.



Hiparco

Filopón, en Alejandría, durante el siglo VI, tomó la idea de Hiparco de la *fuerza impressa*, con la diferencia de que el concepto de Hiparco tenía la cualidad de ser “autoextinguible”. La de Filopón solo podía ser “consumida” si el cuerpo se movía en un medio. De ahí se deducía la inexistencia del vacío, pues si este existía, no había nada que consumiera la fuerza que se había impreso en el móvil y este permanecería en movimiento indefinidamente. Esto era imposible, dado uno de los fundamentos del paradigma aristotélico que consideraba que todos los cuerpos tendían al reposo.



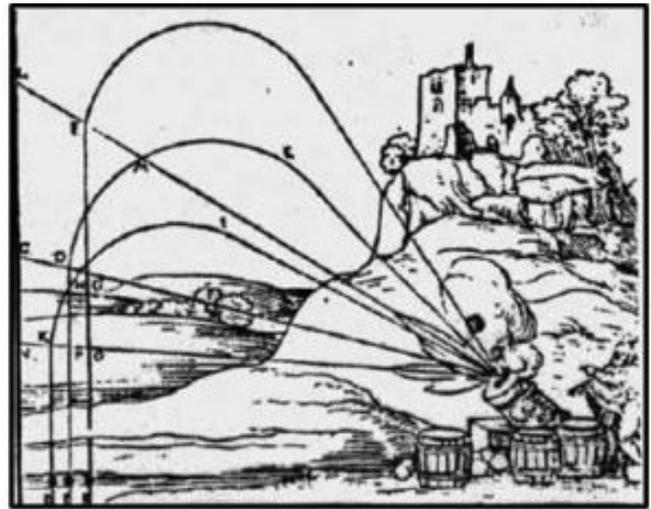
Filopón

Con la caída del Imperio Romano de Occidente en el siglo V, todo el tesoro del conocimiento clásico se traslada a Oriente. Y es en los centros de cultura del mundo musulmán donde se preservó y desarrolló dicho conocimiento, para retornar a Europa alrededor del siglo X. Es con Avicena (980-1037), en Bagdad, donde reaparece el concepto de la *vis impressa* con sus características de ser una cualidad que el motor imprime al móvil y que se extinguirá debido al medio en el cual el cuerpo se mueve, reforzándose la idea de la inexistencia del vacío. Así, por ejemplo, la trayectoria de un proyectil primero seguirá una línea recta ascendente y, después de haber perdido la *fuerza impressa* que le fue transmitida por el motor, describirá una circunferencia, que es la forma perfecta que siguen todos los movimientos de manera natural, para finalmente caer verticalmente debido a la cualidad de pesantez que caracteriza a los cuerpos graves. Durante todo este periodo de la historia, los estudios fueron hechos dentro del estricto marco del paradigma aristotélico y así continuarían hasta la revolución científica de los siglos XVI y XVII.

Continuadores de la obra de Avicena son Avempace (1085-1138) y Averroes (1126-1198) en la España musulmana. Es la época en que el saber de la Antigüedad clásica, conservado y desarrollado por la cultura árabe, comienza a ser recuperado por el Occidente europeo. Aparecen las escuelas catedráticas, que son el antecedente inmediato de las primeras universidades. Una característica de este proceso es que reaparece un interés por el estudio de las matemáticas y los fenómenos de la naturaleza. Comienza a debilitarse la estricta separación que dictaba la filosofía aristotélica de no mezclar los géneros de las matemáticas y la física.



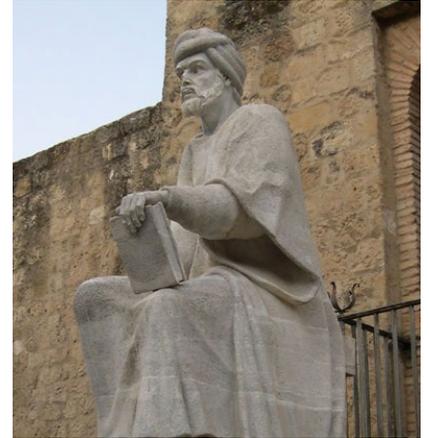
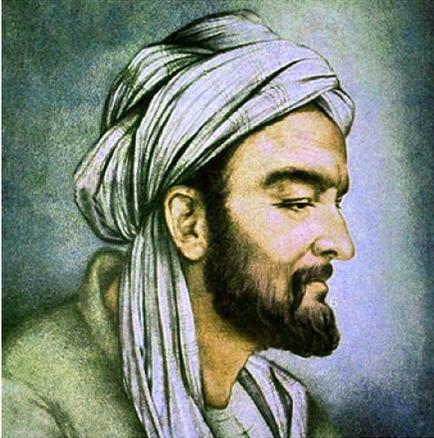
Eruditos musulmanes



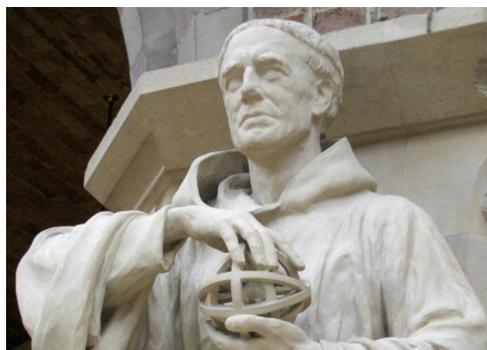
Trayectoria de un proyectil

En la Universidad de Oxford están Robert Grosseteste (1175-1253), Roger Bacon (1214-1294) y William de Ockham (1287-1347). En esta misma tradición hay que ubicar a los eruditos del Merton College, también en la Universidad de Oxford, así como a pensadores de la Universidad de París, como Jean Buridan (1300-1358), Alberto Magno (1316-1390) y Nicole de Oresme (1323-1382). Aquí, se continuará con la actitud epistemológica de ir disolviendo las barreras entre la física y las matemáticas impuestas por la filosofía aristotélica [10].

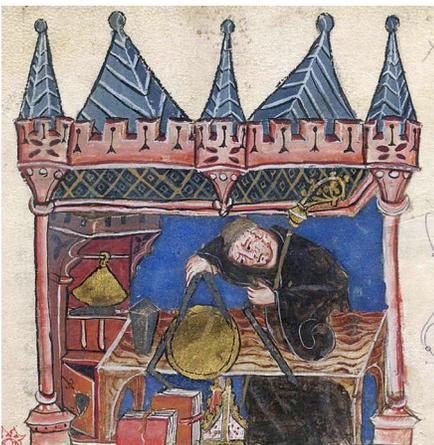
En la Universidad de París adoptan la teoría de la *vis impressa*, pero ahora con el nombre de *virtus motiva* o *impetus*. Esta tiene una naturaleza permanente y es proporcional a



Avicena, Avempace y Averroes



Grosseteste, Bacon y Ockham



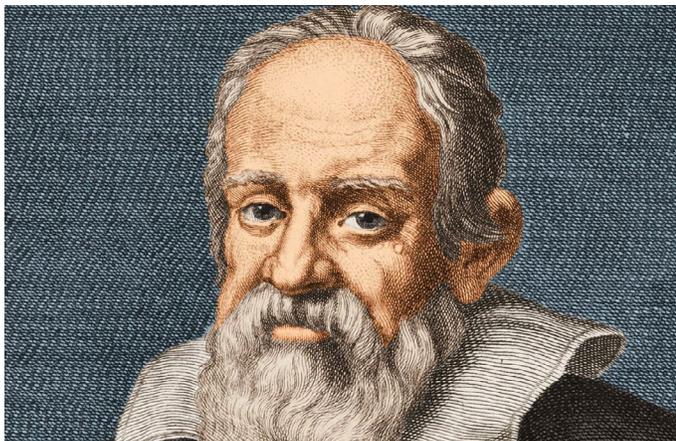
Los Calculadores
del Merton College

la cantidad de materia del cuerpo (a través de la cualidad aristotélica de gravedad) y a la velocidad que adquiere su movimiento (siempre en términos cualitativos, todavía no hay una cuantificación). Una piedra lanzada adquirirá más *impetus* que una hoja y viajará más lejos. (Aquí se tiene el origen de lo que en la física newtoniana será la cantidad de movimiento, $p=mv$).

Al final del siglo XIV, una versión de la teoría del *impetus*, similar a la expuesta por Buridan y Oresme, había reemplazado a la defectuosa explicación aristotélica del lanzamiento de proyectiles en prácticamente todas las obras científicas medievales. Galileo (1564-1642) la aprendió en Pisa de su maestro Bonamico y en sus primeros estudios adopta la teoría del *impetus* dentro de un marco aristotélico de *cualidades*, llegando a un callejón sin salida, y sale de él utilizando la hidrostática arquimediana, que es una física *cuantitativa*. Galileo se percata de la asombrosa concordancia que existe entre las matemáticas y los fenómenos de la naturaleza y funda la epistemología de la física moderna al aplicar todos los estudios sobre el movimiento, que eran *ejercicios lógicos* realizados por los eruditos de Oxford y París, a fenómenos que ocurren en la naturaleza como la caída libre y el



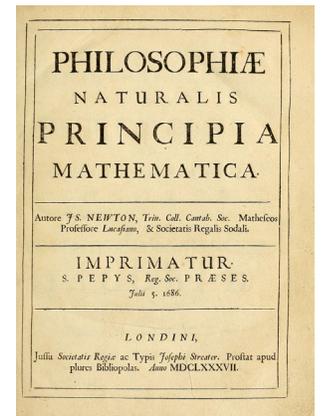
Buridan, Alberto Magno y Oresme



Galileo

lanzamiento de proyectiles. La Revolución Científica de los siglos XVI y XVII culmina con la gran obra de Newton (1642-1727), donde el paradigma aristotélico ha sido substituido por el newtoniano. Como resultado de este periodo crucial en la historia del conocimiento científico se sustituye el modelo cosmológico geocéntrico por el heliocéntrico, la física aristotélica es sustituida por la física galileana, que más tarde alcanzará su culminación con la gran síntesis newtoniana. Además, el espacio físico (cualquier cosa que esto sea) es substituido por el espacio euclidiano; se construyó el principio de inercia; los cuerpos físicos fueron substituidos por los objetos geométricos y se cumplió el sueño pitagórico de encontrar regularidades matemáticas en la naturaleza. Sueño que había sido continuado por

Platón y Arquímedes y fue interrumpido por la doctrina aristotélica de no mezclar la física con las matemáticas.



Newton y Los Principia

La cantidad de movimiento de Newton

Es en su obra *Philosophia naturalis principia mathematica*, conocida como Los Principia, donde Newton define los conceptos de cantidad de materia, cantidad de movimiento y fuerza ínsita, y enuncia sus tres leyes del movimiento, pilares de la física clásica [11]:

“La cantidad de materia es la medida de la misma originada de su densidad y volumen conjuntamente”.

“La cantidad de movimiento es la medida del mismo obtenida de la velocidad y de la cantidad de materia conjuntamente”.

“La fuerza ínsita de la materia es una capacidad de resistir por la que cualquier cuerpo, por cuanto de él depende, persevera en su estado de reposo o movimiento uniforme y rectilíneo”.

“El cambio de movimiento es proporcional a la fuerza motriz impresa y ocurre según la línea recta a lo largo de la cual aquella fuerza se imprime”.

Ya no es el concepto de *vis impressa* propuesto por Hiparco como una *qualidad* transmitida al móvil por el motor y que era autoextinguible, ni tampoco una *qualidad* que era consumida si el móvil se movía en un medio. Ahora existe el vacío y el movimiento se puede conservar indefinidamente, el movimiento mismo ya no es un proceso, sino un estado y la cantidad de movimiento está perfectamente matematisada. Incluso en la segunda ley de Newton aparece el carácter vectorial de la cantidad de movimiento ($F=dp/dt$).

Ahora bien, hay un gran paso entre el *impetus* medieval, que todavía se maneja a finales del siglo XVI y principios del XVII y la cantidad de movimiento de *Los Principia* de Newton que se publica en 1687. La cantidad de movimiento es el producto de la masa m por la velocidad v . Así, se tiene el concepto moderno de cantidad de movimiento, momento lineal o ímpetu ($p=mv$).

La física newtoniana es una de las grandes obras del pensamiento científico y sus logros son impresionantes. Sin embargo, una de las más sorprendentes características de la historia de la física es la confusión que rodea a la definición de la masa, que es el término clave de la dinámica moderna.

Newton introduce, al inicio de los *Principia*, la antigua noción de “cantidad de materia” para referirse a la masa. Incluso, en su definición de “cantidad de materia”, se ha señalado la circularidad entre “masa”, “densidad” y “volumen”. Más adelante, también en los *Principia*, Newton define la masa como la *vis insita* o inercia, que es “una capacidad de resistir por la que cualquier cuerpo, por cuanto de él depende, persevera en su estado de reposo o movimiento uniforme y rectilíneo”.

Los términos “cantidad de materia” y “masa” permanecen, en general, como sinónimos desde los tiempos de Newton hasta finales del siglo XIX. No obstante, “cantidad de materia” representaba tres significados completamente diferentes en la física del siglo XVIII. Euler (1707-1783) identificó masa (y cantidad de materia) con “cantidad de inercia”. Luego se tiene la masa gravitacional, que tiene que ver con la acción gravitacional de un cuerpo con otros, que para propósitos puramente instrumentales se plantea la equivalencia entre los dos conceptos, masa inercial y masa gravitacional, pero eso no resuelve el problema sobre la definición fundamental del concepto de masa. Es una característica puramente accidental que dos *qualidades* diferentes de materia, inercia y carga gravitacional, conduzcan a la misma “cuantificación”.

En el siglo XVIII, el periodo de la concepción substancial de la materia, los términos “masa” y “materia” fueron prácticamente idénticos y la resistencia de la materia a la presión, su solidez e impenetrabilidad, fueron usualmente consideradas como *qualidades* sensoriales y directamente observables de “masa”.

A mediados del siglo XIX el consenso newtoniano acerca de masa había sido remplazado por muchas definiciones. Es muy criticado como inconsistente que el término “masa” signifique un cuerpo, la propiedad de un cuerpo y un número. Es muy difícil imaginar categorías tan contrastantes como los de objeto, propiedad y número. Alrededor de 1960, la masa se había fragmentado en otras direcciones, como masa inercial, masa gravitacional y masa gravitacional pasiva.

Respecto al punto de su apariencia metafísica. “La masa puede ser comparada con un actor que aparece sobre el escenario con diversos disfraces, pero nunca como su verdadero ser [...] Puede aparecer en el papel de la carga gravitacional, o en el de la inercia, o en el de la energía, pero en ninguna parte la masa se presenta a los sentidos como ella misma, sin adornos”.¹

Los modernos físicos pueden estar legítimamente orgullosos de sus espectaculares logros en la ciencia y en la tecnología. No obstante, siempre deberían estar conscientes de que los fundamentos de su imponente edificio, las nociones básicas de su disciplina, tales como el concepto de masa, presentan serias incertidumbres y perplejas dificultades que todavía no han sido resueltas. Pero esta obscuridad que rodea al concepto de masa no impide el enorme éxito de la física newtoniana. En la bibliografía se presentan varios textos en donde se discute y analiza en profundidad el problema de la definición del concepto de masa [12].

Para concluir este trabajo, y continuando con el modelo de desarrollo del conocimiento científico planteado por Thomas S. Kuhn, se tiene que, a partir de la Revolución Científica de los siglos XVI y XVII, tiene vigencia el paradigma newtoniano, el cual tiene logros impresionantes durante todo el siglo XIX, al final del cual, con el surgimiento de la mecánica cuántica y la relatividad einsteiniana, aparecen nuevos paradigmas, que, hasta el momento y de manera notable, no han sustituido al paradigma newtoniano, sino que cada uno opera en su ámbito de aplicación.

Referencias

1. T. S. Kuhn, La estructura de las revoluciones científicas, 2ª edición, Fondo de Cultura Económica, México (2004).
2. A. R. Pérez Ransanz, Kuhn y el cambio científico, Fondo de Cultura Económica, México (1999) p. 35.
3. Ibid. p. 43.
4. W.K.C. Guthrie, Los filósofos griegos. De Tales a Aristóteles, FCE, México (1982).
5. A. Koestler, Los Sonámbulos, CONACyT, México (1981).
6. Aristóteles, Física, Ed. Gredos, Madrid (2008).
7. D. Ross, Aristotle's Physics, Clarendon Press, Oxford (1979).
8. A. Beltrán Marí, Galileo, ciencia y religión, Ediciones Paidós Ibérica, Barcelona (2001).
9. A. Koyré, Estudios galileanos, Editorial Siglo XXI, México (1982).
10. J. Jolivet, Historia de la filosofía, vol. 4, Siglo XXI Editores, México (1981).
11. I. Newton, Principios matemáticos de la filosofía natural, Alianza, Madrid (1987).
12. M. Jammer, Concepts of Mass in Classical and Modern Physics, Dover Publications, Inc., New York (1997); J. Roche, “What is mass?”, European Journal of Physics, 26, 225-42 (2005); G. B. Brown, “Gravitational and inertial mass”, American Journal Physics, 28, 475-83 (1960); E. Mach, Desarrollo Histórico-Crítico de la Mecánica, Espasa Calpe Argentina, S.A., Buenos Aires (1949).

¹ Herbert L. Jackson, “Presentation of the concept of mass to beginning physics student”, American Journal of Physics, 27, 278 (1959).

Fenómeno de convección natural en líquidos conductores

José Luis Morón-Cruz, Alberto Beltrán

Instituto de Investigaciones en Materiales, Unidad Morelia, Universidad Nacional Autónoma de México, Antigua Carretera a Pátzcuaro No. 8701, Col. Ex Hacienda de San José de la Huerta, C.P. 58190, Morelia, Michoacán, México
albem@materiales.unam.mx

Resumen

La convección natural es un fenómeno en el que el movimiento de un fluido se produce debido a diferencias de densidad causadas por variaciones de temperatura y está presente en múltiples fenómenos naturales, tales como en la circulación atmosférica, las corrientes oceánicas, corrientes de magma en el manto terrestre, etc. Recientemente ha cobrado relevancia el estudio del fenómeno de convección por su presencia en algunas aplicaciones tecnológicas: sistemas de calefacción y refrigeración, sistemas innovadores de almacenamiento de energía, entre otros. En este trabajo se presenta el fenómeno de convección natural en fluidos conductores de la electricidad, como los metales líquidos a temperatura ambiente. Finalmente, se proporciona información visual de pruebas realizadas en el laboratorio.

Palabras clave:

Almacenamiento de energía, metal líquido, baterías

Introducción

El fenómeno de convección natural tiene implicaciones importantes, tanto en contex-

tos naturales como tecnológicos. La comprensión de estos procesos es fundamental para un mejor entendimiento de algunos flujos observados en la naturaleza y/o presentes en la industria. La convección solar y estelar [1], la geodinamo de un reactor de fusión nuclear y la generación de viento [2] son solo algunos ejemplos que ilustran la importancia de la convección. Además, los principios de la transferencia de calor por convección desempeñan un papel fundamental en diversos ámbitos industriales y energéticos, especialmente a medida que surgen desafíos debido al aumento de las densidades de flujo de calor.

Un parámetro determinante de la naturaleza de los flujos convectivos son las propiedades termofísicas de los fluidos involucrados; el número de Prandtl (Pr) es una cantidad adimensional que se deriva de la relación entre la viscosidad cinemática y la difusividad térmica. Este parámetro sirve como un indicador de la difusión de calor dentro del fluido. En la Tabla 1 se muestran algunos ejemplos de valores para el número de Prandtl de fluidos.

Existe un interés particular en el estudio de

Tabla 1. Valores típicos del número de Prandtl para diversas sustancias a su temperatura de fusión T_f (cuando no se especifica, se supone que los fluidos están a temperatura de 315 K). Tabla propia con información de Lappa [3]

Tipo	Fluido	T_f (K)	Pr
Metales líquidos	Al	934	0.053
	Ga	303	0.0207
	Hg	300	0.025
	Sn	505	0.009
Componentes semiconductores y aleaciones metálicas	GaAs (arseniuro de galio)	298.15	0.068
	InP (fosfuro de indio)	298.15	0.015
	InSb (antimoniuro de indio)	298.15	0.039
Sales fundidas	KCl	1043	1.16
	NaCl	1073	1.02
	LiCl	883	1.52
Líquidos transparentes orgánicos e inorgánicos	Ciclohexano	–	14.6
	Glicol etileno	–	159
	Vidrio fundido	1873	6750
	Acetona	–	4.3
	Agua	–	6.9
Fluidos de interés geofísico	Magma	–	10^4 - 10^8
	Manto rocoso de la Tierra	–	10^{23}

fluidos con número de Prandtl mucho más pequeños que la unidad, ($Pr \ll 1$) donde la difusividad térmica supera ampliamente a la difusividad de momento. Ya que estos fluidos participan en los flujos internos en cuerpos celestes [4], zonas turbulentas en estrellas [5] y recientemente en baterías de metal líquido (BML) [6] [7]. Las BML nacen con la necesidad de tener sistemas de almacenamiento estacionarios a gran escala y son una alternativa de almacenamiento para la generación de energía eléctrica a través de las denominadas fuentes renovables de energía, de las cuales los principales exponentes son la energía geotérmica, hidroenergética, eólica y fotovoltaica [8]. Sin embargo, derivado de que estas fuentes de energía dependen de variables tales como la radiación solar, el calor interno de la Tierra, la velocidad del viento, entre otras; la capacidad de almacenar grandes cantidades de

electricidad será fundamental. Además de hacer la red eléctrica actual más eficiente, permitiendo entregar suministros rápidos durante las interrupciones y satisfacer los picos de demanda temporales.

En dichas baterías, tanto los electrodos como el electrolito se encuentran en estado líquido. Los componentes líquidos pueden ofrecer una mayor conductividad iónica, lo que se traduce en una mejor capacidad de carga y descarga. Esto puede conducir a una mayor densidad de energía y una mayor potencia específica, lo que significa que estas baterías pueden almacenar más energía y liberarla más rápidamente.

Actualmente, los desarrollos de BML funcionan a temperaturas superiores a 240°C , para mantener los electrodos metálicos en estado líquido. Estas temperaturas de tra-

bajo conllevan a un gradiente de temperatura de alrededor de 10 °C, lo cual provoca el fenómeno de convección natural de los fluidos al interior.

Adicionalmente, durante la carga o descarga, la corriente eléctrica genera disipación de Joule. Es importante mencionar que la capa de electrolito tiene la mayor resistencia eléctrica de las tres capas, provocando que el mayor calentamiento ocurra en esta región. De esta forma, el metal localizado al fondo se calienta desde la parte superior, mientras que el de arriba se calienta por abajo, generándose un flujo convectivo en el electrodo superior.

Estudios experimentales y numéricos

En el grupo de trabajo se ha estudiado el fenómeno de convección en líquidos conductores. Para los experimentos, se usa un metal líquido a temperatura ambiente como el Galio-Indio-Estaño (GaInSn) y se realizan mediciones con la técnica de velocimetría de ultrasonido por efecto Doppler (UDV, por sus siglas en inglés); mientras que, para los estudios numéricos se emplean herramientas de software comercial. Dichos estudios han permitido medir la velocidad del flujo convectivo de GaInSn, siendo posible obtener la velocidad máxima, tiempos característicos de los patrones de flujo, entre otros parámetros.

En la Figura 1 se puede observar la configuración experimental usada para la medición de los perfiles de velocidad, así como el modelo CAD (Computer-aided design, por sus siglas en inglés) y una imagen representativa de un flujo simulado para dicha configuración. En la Figura 2 se muestran ejemplos de los resultados obtenidos en el estudio, destacando el campo de velocidad.

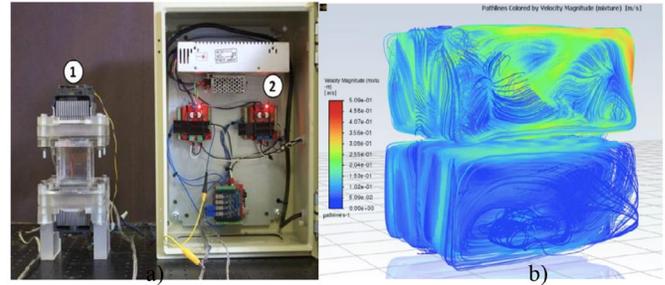


Figura 1.a) Configuración experimental constituida por una actividad cúbica (1) y sistemas de control de temperatura (2). b) Imagen de líneas de trayectoria del flujo de una simulación usando ANSYS Fluent

Con base en los resultados anteriores, es posible determinar que gradientes de temperatura cercanos a los 10 °C son capaces de generar un flujo convectivo de un metal líquido como el GaInSn, dicho movimiento puede influir (de forma positiva o negativa) en el desempeño de tecnologías como las BML. En trabajos futuros, se planea realizar un estudio que considere también campos electromagnéticos (campo magnético y/o corriente eléctrica).

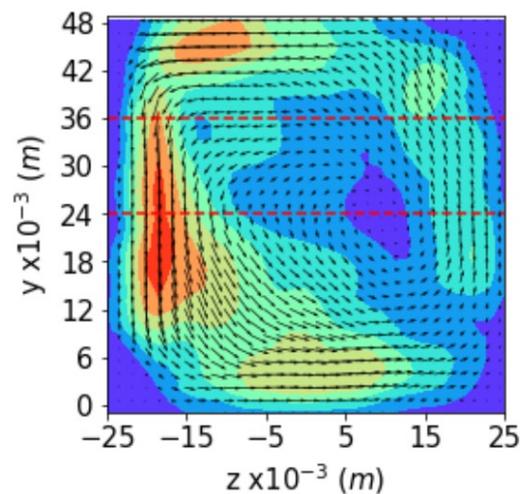


Figura 2. Campo de velocidades numérico para una T=4K en el plano y-z de una cavidad cúbica

Conclusión

La convección en líquidos conductores es un fenómeno que no solo ocurre en la naturaleza, sino que también puede ser aprovechado en tecnologías innovadoras como las baterías de metal líquido. Al compren-

der mejor los mecanismos de convección y otros fenómenos de transporte, es posible estudiar formas de controlarlos y así avanzar hacia una nueva generación de sistemas de almacenamiento de energía.

Agradecimientos

Se agradece el apoyo financiero de los proyectos CONAHCyT CF-2023-I-1373 y UNAM-DGAPA-PAPIIT IN107722. J. L. Morón-Cruz agradece una beca de doctorado del CONAHCyT. La caracterización experimental se realizó en el Laboratorio de Magnetohidrodinámica (MHD), mientras que las simulaciones se realizaron en el Laboratorio de Diseño, Modelado y Simulaciones (LDMS), ambos en la Unidad Morelia del IIM-UNAM.

Referencias

- [1] E. A. Spiegel, "Thermal turbulence at very small prandtl number," *Journal of Geophysical Research*, pp. 1896-1977, 1962. <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com>
- [2] J.F Salavy, L.V. Boccaccini, R. Lässer, R. Meyder, H. Neuberger, Y. Poitevin, G. Rampal, E. Rigal, M. Zmitko, and A. Aiello, "Overview of the last progresses for the european test blanket modules projects.," *Fusion Engineering and Design*, p. 2105–2112, 2007. <https://www.sciencedirect.com/>
- [3] M. Lappa, *Thermal Convection: Patterns, Evolution and Stability.*, 2010. <https://www.researchgate.net/>
- [4] J.M. Aurnou, M.A. Calkins, J.S. Cheng, K. Julien, E.M. King, D. Nieves, K.M. Soderlund, and S. Stellmach, "Rotating convective turbulence in earth and planetary cores.," *Physics of the Earth and Planetary Interiors*, p. 246:52– 71, 2015. <https://www.sciencedirect.com/>
- [5] S. Hanasoge, L. Gizon, and K.R. Sreenivasan, "Seismic sounding of convection in the sun.," *Annual Review of Fluid Mechanics*, p. 191–217, 2016. <https://www.annualreviews.org/>
- [6] T. Weier. and D.H. Kelley, "Fluid Mechanics of Liquid Metal Batteries," *Applied Mechanics Reviews.*, 2018. <https://asmedigitalcollection.asme.org/>
- [7] N-. Weber, T. Weier, A. Bund, W. El-Mofid, G. M. Horstmann, C-C. Lalau, S. Landgraf, M. Nimtz, M. Starace and F. Stefani, "Liquid metal batteries - materials selection and fluid dynamics," *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, p. 012013, 2017. <https://iopscience.iop.org/>
- [8] Secretaría de Energía, " Balance Nacional de Energía 2013," 2013. [Online]. Available: <https://www.gob.mx/>[Accessed 2020].

Manufactura aditiva, nanopartículas y catálisis, el impacto de estos procesos en el desarrollo sostenible de la industria

Lucy-Caterine Daza-Gómez¹, Rocío Redón²

¹ División de Ingeniería Mecánica e Industrial, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México, México

² Laboratorio de materiales bio y catalíticos nanoestructurados. Instituto de Ciencias Aplicadas y Tecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México, México
cgomez.nanoscience@gmail.com

Resumen

La manufactura aditiva y la catálisis están estrechamente relacionadas en la actualidad, ya que a través de la técnica de impresión 3D se pueden potencializar desde varios puntos de vista el campo de la catálisis, por ejemplo: en el diseño y fabricación de catalizadores personalizados, optimización de la estructura catalítica, fabricación de microreactores y reparación de catalizadores desgastados. Estos procesos pueden mejorar la eficiencia y selectividad de las reacciones catalizadas en áreas como la síntesis química, la industria de la energía y la producción farmacéutica. La integración de la manufactura aditiva en la catálisis tiene un gran potencial para mejorar la eficiencia, sostenibilidad y adaptabilidad en la producción química.

Palabras clave

Catálisis, manufactura aditiva, industria.

La catálisis

La catálisis ha sido clave en el desarrollo y avance de la industria moderna. Si bien se

dice que Berzelius, en 1835, fue la primera persona en utilizar el término para describir una "fuerza misteriosa", el término real "catálisis" se deriva de la fermentación del vino que se remonta aproximadamente al 5000 a.C. La catálisis enzimática ocurre cuando enzimas catalizan la reacción que convierte selectivamente la glucosa en etanol. Aunque la primera influencia importante de la catálisis en la industria comenzó alrededor de 1915, con la aparición a escala industrial del método Haber-Bosch, proceso usado para la síntesis de amoníaco ($N_{2(g)} + 3H_{2(g)} \rightarrow 2NH_{3(g)}$). Esta reacción (crítica en esa época y útil en la actualidad) puede realizarse más rápidamente con hierro como aditivo en condiciones estándar. A partir de entonces, el avance de la catálisis ha estado estrechamente ligada con su aplicación al mundo industrial, como por ejemplo a la síntesis de ácido nítrico (sustancia vital en procesos industriales) y la producción de combustibles sintéticos, entre otras aplicaciones.

En términos químicos, la catálisis se refiere a la modificación de la velocidad de una reacción al reducir la temperatura o la presión requeridas para iniciarla mediante el uso de una sustancia que no se consume en la reacción, es decir, un catalizador. Según la definición actual de la American Chemical Society (ACS), el catalizador disminuye la energía de activación de la reacción, lo que resulta en un aumento de la velocidad de la reacción¹ (Figura 1).

A la catálisis la podemos entender con un sencillo ejemplo (Figura 1). Si pensamos que vamos en nuestro coche de un punto A a un punto B puede haber dos posibles caminos. Uno, el más largo, implica subir y bajar una montaña (camino azul), mientras que en el otro camino (camino rojo) hay que atravesar un túnel, lo cual hace que el camino sea más corto. Si tomamos el camino azul, en términos de la cantidad de gasolina (energía), gastaremos más gasolina, en comparación con el camino rojo, más corto. Es decir, si tomamos el camino rojo, no solamente ahorraremos energía (gasolina), sino que, en términos de tiempo, también llegaremos más rápido. Lo mismo ocurre en las reacciones químicas, el punto A son los reactivos y el punto B los productos. Si queremos llegar de los reactivos a los productos también existen dos rutas, una corta, rápida y de menor consumo energético, y la otra todo lo contrario. ¿Cómo se consigue en química, que los reactivos se vayan por la ruta más favorable? Pues al igual que en la imagen, a través de un túnel. En química “ese túnel” es llamado un **catalizador**, el cual reduce la energía de activación y acelera la velocidad de la reacción. Otra ventaja de “ese túnel” es que pueden pasar muchos coches a través de él, cumpliendo el mismo objetivo que ya mencionamos anteriormente. De manera

análoga, en las reacciones químicas donde se usa un catalizador (nuestro túnel), este puede reusarse muchas veces, acelerando numerosas reacciones químicas. En el ejemplo los autos son moléculas, las cuales pueden pasar una y otra vez por ese túnel sin alterarlo. El catalizador, entonces, nos proporciona una ruta alternativa para la reacción química.

Lo anterior es descrito de forma ideal, sin embargo, en la realidad, los catalizadores generalmente pierden su actividad a medida que pasan a través de ellos muchas moléculas. Es decir que a medida que los reusamos, ese túnel comienza a colapsarse, impidiendo que más moléculas puedan pasar fácilmente. Este es uno de los principales desafíos en el campo de la catálisis, desarrollar catalizadores estables a lo largo del tiempo, es decir, catalizadores cuya actividad no disminuya en ciclos consecutivos de reacción, como se discutirá más adelante.

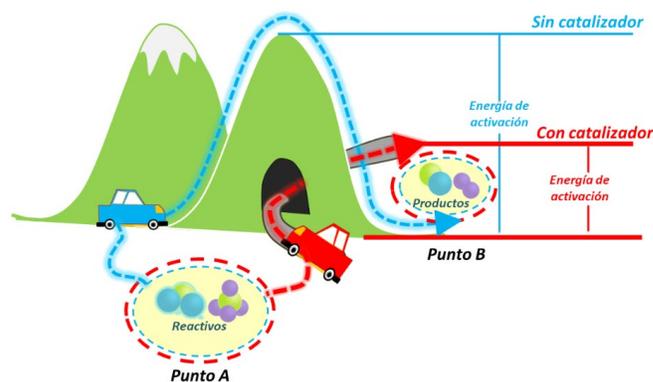


Figura 1. Representación esquemática de la definición de catálisis

El campo de la catálisis se puede clasificar de forma general en: **la catálisis homogénea** y **la catálisis heterogénea**. En la catálisis homogénea el catalizador se encuentra en la misma fase que los reactivos. En general, todos los componentes están presentes en forma de gas o están contenidos en una sola fase líquida (Figura 2). Por otro lado,

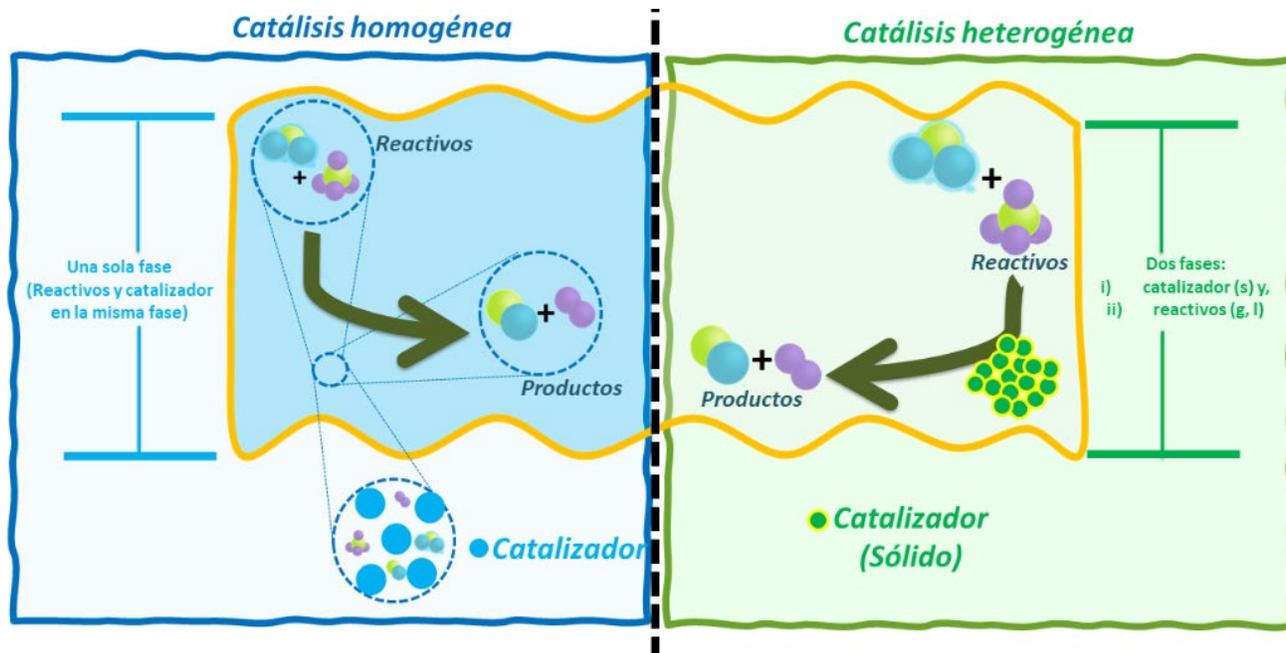


Figura 2. Catálisis homogénea vs. catálisis heterogénea

en la *catálisis heterogénea* el catalizador se encuentra en una fase diferente de los reactivos, lo cual implica la presencia de dos fases. Los ejemplos típicos involucran un catalizador sólido en presencia de reactivos líquidos o gaseosos².

En la industria se utilizan ambos tipos de catálisis, sin embargo, la catálisis heterogénea es la principal fuerza impulsora en muchos procesos industriales críticos. Esto se debe a que, además de proporcionar las características exclusivas de un catalizador (aceleración de la velocidad de reacción), también ofrece otras ventajas en comparación con la catálisis homogénea, por ejemplo:

1. **Reutilización del catalizador:** El catalizador sólido puede ser recuperado y reutilizado en múltiples ciclos de reacción, lo que resulta en una mayor eficiencia y rentabilidad en los procesos a nivel industrial. Además, esto contribuye a una minimización en la producción de residuos³.
2. **Pérdida de la fase activa:** La fase activa es la parte del catalizador que acelera

la reacción, en el caso de un catalizador sólido, al estar separado de la fase donde se encuentran los reactivos y productos, se evita la migración de la fase activa a la disolución o el medio de reacción. Esto es importante para mantener la estabilidad y la eficacia del catalizador a lo largo del tiempo^{3,4}.

3. **Recuperación del catalizador sólido:** En los procesos de catálisis heterogénea el catalizador sólido puede ser fácilmente separado de la mezcla final de reacción, lo que facilita su recuperación y permite su reutilización o tratamiento adecuado. Esto simplifica los procesos industriales y contribuye a la sostenibilidad. Como resultado de estas ventajas, la catálisis heterogénea está involucrada en la producción del 80 % de todos los productos químicos en el mundo actualmente. Su aplicación extensiva en la industria demuestra su importancia para el desarrollo de procesos eficientes, económicos y respetuosos con el medio ambiente².

Las nanopartículas y la catálisis

En la catálisis heterogénea, un factor crucial es el área superficial de los catalizadores sólidos. Esto se debe a la interacción entre el catalizador y los reactivos que ocurre en la superficie del sólido; entre más área superficial del catalizador, se esperará una mayor interacción con los reactivos, y por ende mayor actividad hacia la conversión de los productos. Entonces, ¿cómo lograr que los catalizadores tengan una gran área superficial? Esto se logra reduciendo el tamaño de las partículas que conforman el sólido. Esto puede sonar contradictorio, ¿verdad? Entonces, ¿cómo es posible que al disminuir el tamaño de las partículas se aumente el área superficial? La Figura 3 nos ilustra mejor esta aparente contradicción:

Consideremos un cubo cuyos lados miden 4 cm. Si calculamos su superficie ($S = A \cdot 6$, donde A es el área, recordando que el área de un cubo es $L \cdot L$, donde L es la longitud de un lado), obtenemos un valor de 96 cm^2 . Ahora, si dividimos este cubo en ocho cubos de 2 cm de cada lado, cada uno de estos nuevos ocho cubos tendrá una superficie de 24 cm^2 ($S = 4 \cdot 6$). Al sumar las superficies de los ocho cubos obtendremos un total de 192 cm^2 ($24 \text{ cm}^2 \cdot 8 = 192 \text{ cm}^2$). Si continuamos dividiendo uno de los cubos anteriores nuevamente en ocho partes más pequeñas, tendremos un total de 64 cubos con una longitud de lado de 1 cm. La superficie total de todos estos cubos suma 384 cm^2 . Si notamos en la imagen, el volumen no cambia, sigue siendo 64 cm^3 , pero la

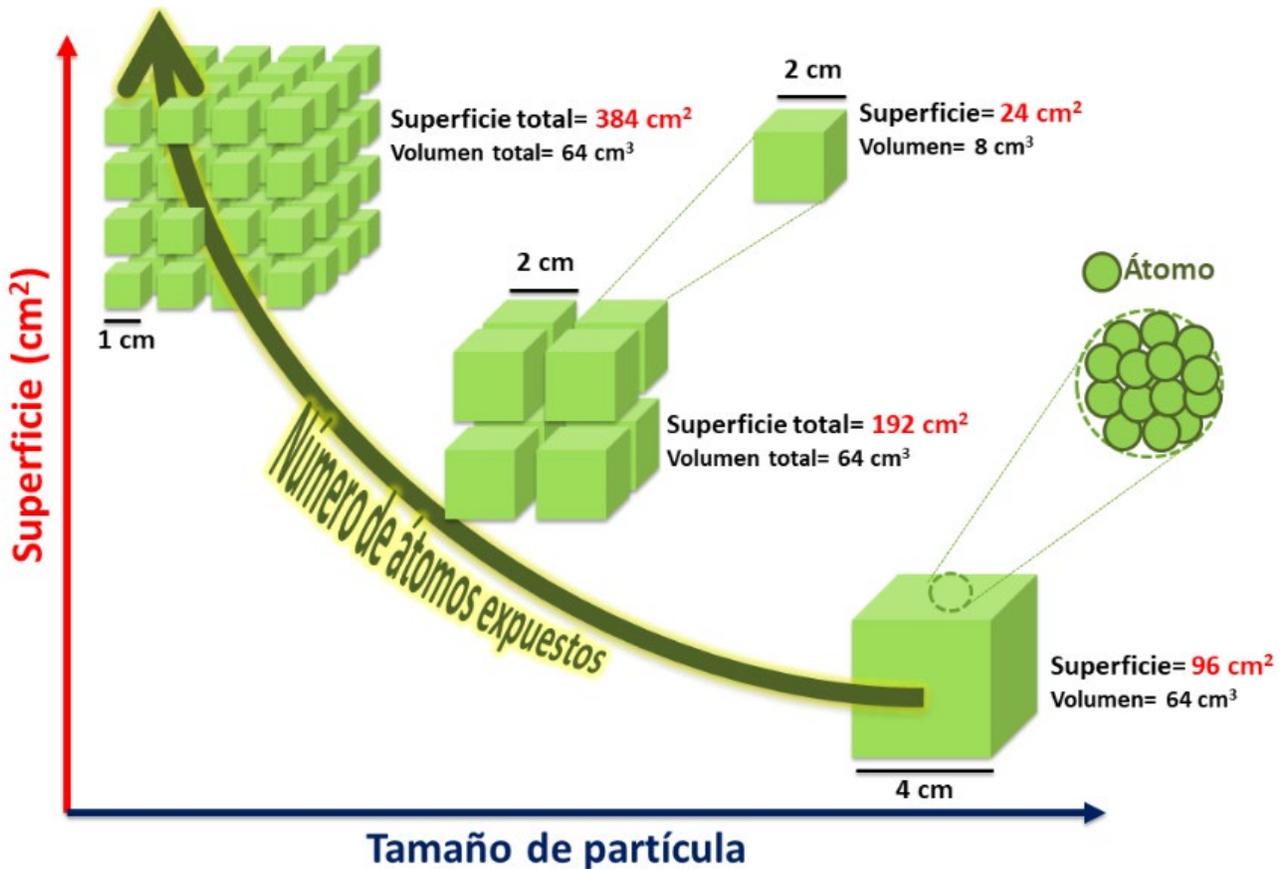


Figura 3. Efecto de la disminución del tamaño de partícula en el área superficial

superficie total sí cambió, aumentando a medida que el cubo inicial se iba partiendo en cubos cada vez más pequeños. Es decir, al disminuir el tamaño de los cubos, el área superficial aumentó. Esto mismo ocurre con una partícula de un sólido catalizador: a medida que hacemos más pequeña esa partícula, mayor será el área superficial, y por ende habrá más interacción con los reactivos. Lo anterior ocurre debido a que se reduce el tamaño de los cubos y se generan más caras adicionales, que antes estaban escondidas. Esta relación demuestra que a medida que disminuimos el tamaño de los cubos, la superficie disponible aumenta.

En el caso de los catalizadores sólidos hablamos de partículas. En estos casos, en la superficie de las partículas están presentes átomos. Si asumimos que un cubo es una partícula de un sólido catalizador, cada cara del cubo contiene átomos y que cada átomo tiene un tamaño de 1 cm (aunque en realidad los átomos son mucho más pequeños), entonces en cada cara habría 16 átomos, y si son 6 caras en el cubo, tendrías 96 átomos en la superficie. Y seguimos con el ejercicio de seguir dividiendo el primer cubo en cubos más pequeños, iremos exponiendo más átomos en la superficie. Este ejemplo nos ilustra cómo la superficie está directamente relacionada con la cantidad de átomos expuestos en ella. Aplicando este ejemplo de los cubos a partículas compuestas por millones de átomos, a medida que se reduce el tamaño de las partículas, específicamente en el intervalo de los nanómetros, aumenta el número de átomos que se encuentran en la superficie. Esto es especialmente relevante en el campo de la catálisis, ya que implica una mayor área para que los catalizadores reaccionen con los compuestos y aceleren las reacciones químicas. Por lo tanto, uno de

los enfoques de la catálisis heterogénea es obtener catalizadores con tamaño de partícula nanométrico (con dimensiones entre 1 y 100 nm), este tipo de partículas son conocidas como *nanoestructuras*, por ejemplo, las *nanopartículas esféricas*. Cuando se reduce el tamaño de las partículas a la escala nanométrica no solo se incrementa el área superficial, sino que también se pueden manifestar otras propiedades que no se observan en partículas a gran escala (*bulk*).

Sin embargo, trabajar con nanopartículas también conlleva desafíos, uno de ellos es que las nanopartículas tienden a aglomerarse. Este fenómeno ocurre debido al tamaño de las partículas, que al ser tan pequeñas, poseen gran energía superficial, y para disminuirla (todo tiende a la mínima energía) las nanopartículas tienden a unirse entre sí (aglomerarse) y alcanzar una mayor estabilidad. Por lo cual, se esconden átomos (dejando menos átomos expuestos en la superficie) y, por ende, disminuyen la interacción con los reactivos. Otro problema asociado con las nanopartículas es la dificultad de separarlas del medio de reacción. Debido a su tamaño diminuto se requieren técnicas de ultrafiltración o ultracentrifugación, lo cual puede aumentar los costos y el tiempo de los procesos.

Una forma de solucionar estas desventajas es anclar las nanopartículas en un soporte, como cuando colgamos un cuadro a la pared y lo fijamos en una superficie (Figura 4). De esta manera, se siguen manteniendo las propiedades innatas de las nanopartículas y, al mismo tiempo, evitamos que se junte (aglomeren); además permite que se pueda recuperar más fácilmente el catalizador del medio de reacción. De esta manera no se necesitarían técnicas

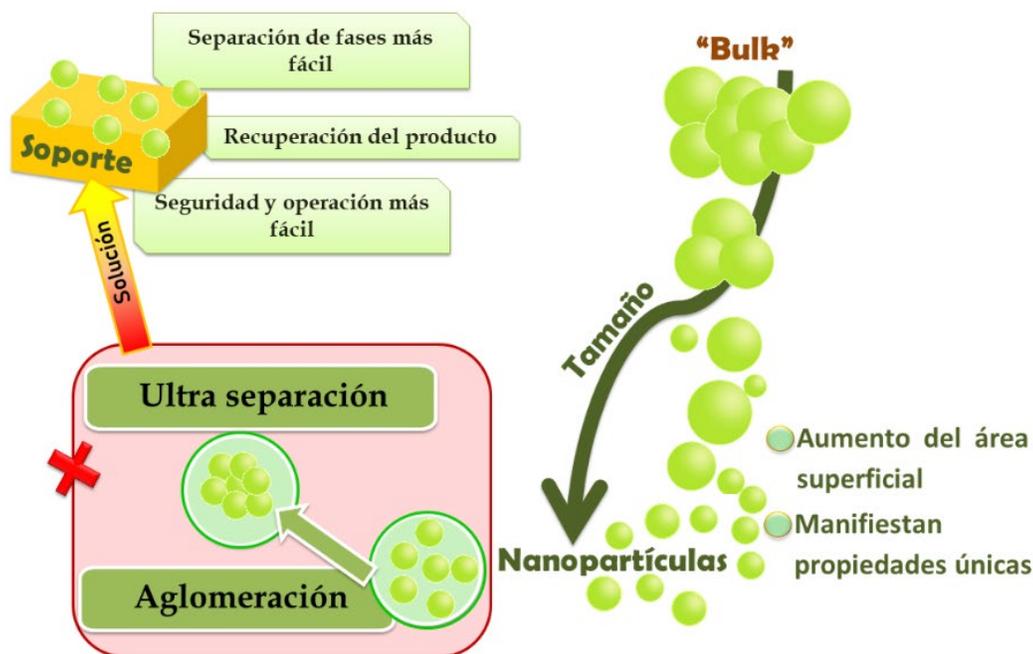


Figura 4. Efecto de la disminución del tamaño de partícula en las propiedades físicas y químicas, los problemas asociados a este proceso y la solución a estos

de ultra separación para recuperar el catalizador, lo que puede reducir costos y tiempo en los procesos catalíticos.

A este tipo de materiales, en el cual se anclan nanopartículas a un soporte, se les conoce como *catalizadores soportados*. El soporte puede ser inerte o tener una participación cooperativa en la reacción catalítica. Su participación o no en la reacción química dependerá de la aplicación en específico, como el tipo, medio y condiciones de reacción. En la literatura podemos encontrar muchos tipos de soporte, como los óxidos metálicos mesoporosos, la sílice mesoporosa, las estructuras metal-orgánicas (MOFs), el carbón activado, los polímeros, las arcillas y las zeolitas, entre otros⁵ (Figura 5). Entre los soportes más comunes se encuentran los óxidos metálicos y no metálicos, como el dióxido de silicio (SiO_2), el trióxido de aluminio (Al_2O_3) y el dióxido de titanio (TiO_2). Algunos de estos soportes tienen como

característica su gran área superficial, estabilidad térmica y mecánica y, en muchos casos, inercia química. Es importante que el soporte utilizado presente una buena resistencia mecánica, para mantener la actividad de los catalizadores y garantizar su funcionamiento óptimo durante las condiciones de reacción. Esto es especialmente importante en situaciones en las que los catalizadores soportados se someten a agitación vigorosa u otros factores que podrían causar desgaste, como presiones y temperaturas elevadas.

Los catalizadores soportados siguen presentando algunos desafíos importantes, como una síntesis costosa, la difícil recuperación de los mismos y la lixiviación de la fase activa. En este sentido, una nueva generación de catalizadores soportados han surgido, a raíz del desarrollo y rápida evolución de la *manufactura aditiva* (mejor conocida como *impresión 3D*). Estos catalizadores soportados son conocidos como

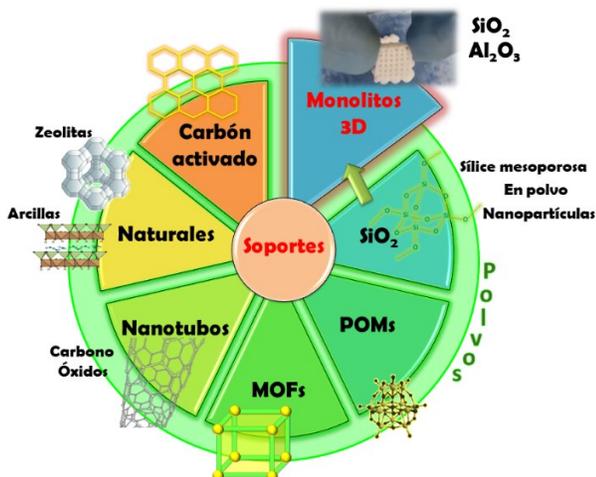


Figura 5. Tipos de soportes más utilizados en la catálisis heterogénea

catalizadores monolíticos y han despertado interés recientemente debido a sus ventajas en comparación con los soportes en polvo o granulados. Estos monolitos se caracterizan por su facilidad de extracción del medio de reacción (debido a su tamaño), como se muestra en la figura 6.

El fuerte vínculo entre la catálisis y la industria

Como ya se mencionó anteriormente, la catálisis ha evolucionado significativamente desde su primera definición, hace casi

200 años. Debido al impacto positivo que ha tenido este campo en cuanto a la reducción de la temperatura y la presión de una reacción se han llegado a reducir los costos de operación de los procesos industriales. La catálisis ha desempeñado un papel fundamental en la obtención de una gran mayoría de productos utilizados diariamente. Se estima que alrededor del 90 % de todos los productos químicos usados industrialmente se producen con la ayuda de catalizadores y se espera que esta cifra siga aumentando año tras año⁶. La evolución de la catálisis siempre ha estado estrechamente ligada al crecimiento y evolución de la industria a lo largo de las distintas revoluciones industriales (Figura 6), principalmente desde la Revolución 2.0 (en la cual aparece la catálisis).

Después de la Revolución Industrial 1.0, en el cual se introdujo la energía de vapor y la mecanización de la producción, apareció la Revolución Industrial 2.0 que estuvo marcada por el descubrimiento y desarrollo de la electricidad, el gas y el petróleo, junto con avances en la industria del acero, la



Figura 6. Crecimiento de la catálisis y aparición de la manufactura aditiva a lo largo de las revoluciones industriales

síntesis química y las comunicaciones a través del telégrafo y el teléfono. Posteriormente, la Revolución Industrial 3.0 trajo consigo la energía nuclear, la electrónica, las telecomunicaciones, las computadoras, la automatización y la exploración espacial, así como la biotecnología e investigación.

La Revolución Industrial 4.0 (I 4.0), también conocida como la era de la ciberindustria, se caracterizó por sistemas de digitalización, ciberfísicos y de robótica, cuyo enfoque estaba en las energías renovables y la interconexión inteligente de máquinas y procesos a través de Internet de las Cosas (IoT), Internet Industrial de las Cosas (IIoT), robótica colaborativa, big data, computación en la nube, fabricación virtual e *impresión 3D*. **La digitalización** de los procesos industriales ha sido uno de los enfoques principales de la I 4.0.

La catálisis, desde su aplicación industrial, ha ido transformándose para acoplarse a cada una de las revoluciones industriales, a sus desafíos y a innovación tecnológica. De ahí que en la actual transición entre la I 4.0 y la I 5.0, la catálisis haya buscado adaptarse al desarrollo de manufactura aditiva, incluyéndola en el campo de la catálisis, como una herramienta para la fabricación 3D de catalizadores. Por lo cual, los catalizadores soportados y los catalizadores monolíticos son ejemplos de enfoques utilizados en la catálisis heterogénea y la digitalización de los procesos industriales, como una tendencia clave en la actual I 5.0.

La manufactura aditiva, industria y catálisis

La manufactura aditiva ha brindado nuevas oportunidades al campo de la catálisis en el contexto de la I 4.0. Una de las aplicacio-

nes más importantes de la manufactura aditiva en la catálisis es la fabricación de catalizadores soportados, especialmente en la obtención de soportes tridimensionales, para el posterior anclaje de nanopartículas catalíticamente activas. Entre los soportes tridimensionales más eficientes desarrollados hasta el momento tenemos los denominados monolitos, los cuales son estructuras unitarias con canales interconectados o separados que pueden tener diferentes geometrías. También son conocidos como soportes de panal y su característica principal es que son piezas con estructuras porosas, cuya porosidad y geometría son perceptibles al ojo humano.

Para la obtención de estos monolitos se usa la impresión 3D, el cual permite la fabricación precisa de estos y otros soportes tridimensionales, facilitando la personalización y optimización de la estructura para una aplicación catalítica específica. La mayor ventaja que da la impresión 3D es que ofrece flexibilidad en la geometría de los canales y la distribución de poros, de una forma sencilla y sin procesos complejos, como en la síntesis tradicional de estos soportes tridimensionales. La geometría y distribución de los poros puede influir en la transferencia de masa, la eficiencia de reacción y la selectividad del catalizador. Adicionalmente, la impresión 3D ofrece una mayor reproducibilidad y escalabilidad en la fabricación de catalizadores soportados, lo que puede tener un impacto significativo en la producción industrial, a diferencia de la síntesis química de estos catalizadores.

Hasta ahora se ha visto cómo empleando la impresión 3D es posible obtener catalizadores soportados, sin embargo, ¿qué es exactamente la manufactura aditiva?

Podemos decir que es un método de fabricación de abajo hacia arriba, que logra los requisitos de impresión mediante la acumulación de materiales, capa por capa, hasta obtener un objeto 3D. Existen varios tipos de manufactura aditiva y las siguientes son las más usadas en el campo de la catálisis:

- **Estereolitografía (SLA):** Esta técnica utiliza un láser ultravioleta para solidificar resinas líquidas fotosensibles, capa por capa. Se construye el soporte mediante la exposición selectiva a la luz, creando una estructura tridimensional ⁷.
- **Fusión por deposición de material (FDM):** En esta técnica, un material termoplástico se extruye a través de una boquilla que se desplaza en patrones definidos, capa por capa. A medida que el material se enfría, se solidifica y se forma el soporte⁸.
- **Sinterización selectiva por láser (SLS):** Un láser de alta potencia fusiona y solidifica las partículas de un polvo en capas sucesivas. El láser se mueve según el patrón definido por el diseño, fabricando el soporte con una geometría determinada ⁹.
- **Deposición de material fundido:** Esta técnica es similar a la FDM, pero en lugar de utilizar termoplásticos se emplean metales o aleaciones fundidas. El material se deposita capa por capa y se solidifica para formar el soporte metálico ¹⁰.
- **Impresión 3D basada en gel (Gel-3D):** Esta técnica utiliza geles poliméricos (semisólidos) que se extruyen capa por capa y luego se solidifican mediante procesos de curado químico o fotopolimerización. Los geles pueden contener partículas de catalizador u otros componentes activos ¹¹.

Cada técnica de manufactura tiene sus propias ventajas y desventajas, y la elección de la técnica adecuada dependerá de los requisitos específicos del soporte y de la aplicación catalítica. **La extrusión de materiales** es una técnica ampliamente utilizada en la manufactura aditiva de catalizadores y catalizadores soportados tridimensionales (Figura 7). Con esta técnica se pueden obtener monolitos catalíticamente activos, combinarlos con un soporte adecuado durante el proceso de extrusión o anclar la fase activa (posterior a la obtención del soporte 3D). El material para extruir puede ser una pasta o una mezcla viscosa, la cual puede ser calentada o enfriada (dependiendo de sus propiedades reológicas) para facilitar su extrusión. A medida que se va depositando cada capa el material se enfría y solidifica, formando así la estructura tridimensional del catalizador o catalizador soportado. Esta técnica, al igual que todas las técnicas de manufactura aditiva, permite flexibilidad de diseño y personalización, ya que permite la fabricación de estructuras complejas y adaptadas a las necesidades específicas de la catálisis. Además, otra ventaja de esta técnica en especial es que es un proceso relativamente rápido y eficiente, lo que lo hace adecuado para la producción a escala industrial. Los aspectos más importantes a tener en cuenta al usar esta técnica son la elección del material y la optimización de los parámetros de extrusión, como la velocidad, presión y temperatura de extrusión, ya que son aspectos críticos para garantizar una buena funcionalidad y estabilidad del catalizador.

Impacto de la manufactura aditiva y la catálisis

La manufactura aditiva que se aplica en el campo de la catálisis también abarca otras ramas de la industria (Figura 8).

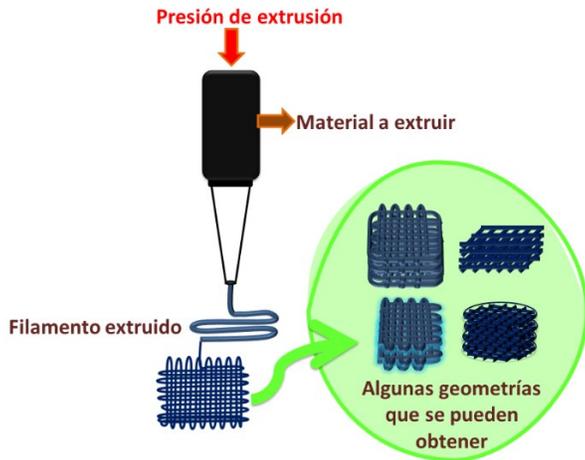


Figura 7. Técnica de extrusión de materiales

Aprovechando que la impresión 3D da la posibilidad de fabricar piezas a demanda (es decir, con estructuras y geometrías intrincadas) se puede utilizar para obtener reactores y materiales de laboratorio con una geometría característica y específica (y también a escalas muy pequeñas). Así como también, sistemas digitales que procuren optimizar los procesos catalíticos y mejorar la eficiencia en diferentes etapas de la producción industrial ¹²⁻¹⁴.

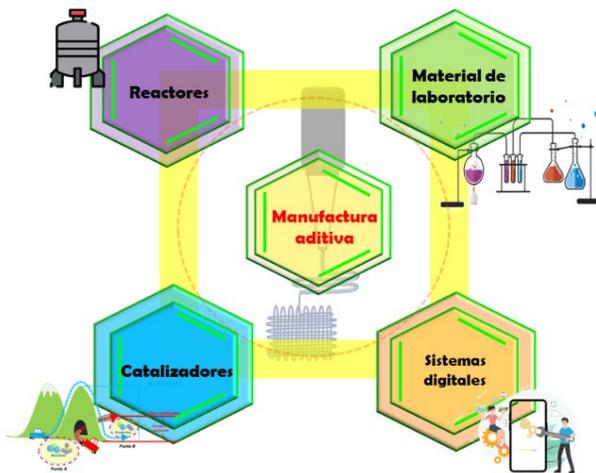


Figura 8. Aplicación de la manufactura aditiva en el campo de la catálisis

A continuación, se mencionan algunas formas en las que la manufactura aditiva y la catálisis están relacionadas:

- **Diseño y fabricación de catalizadores personalizados:** la fabricación de catalizadores con formas y geometrías específicas puede maximizar la eficiencia y selectividad de los catalizadores utilizados para reacciones químicas estratégicas en la industria. Estos catalizadores personalizados no son posibles con los métodos tradicionales de síntesis.
- **Optimización de las estructuras catalíticas:** la posibilidad de obtener estructuras catalíticas con geometrías específicas permite que exista un control de la porosidad y la distribución de poro. Estas características son fundamentales para maximizar la eficiencia y selectividad de los catalizadores. Además, usando manufactura aditiva es posible intercalar diferentes soportes entre capa y capa, pudiéndose de esta forma optimizar aún más la eficiencia catalítica.
- **Fabricación de microreactores:** usando manufactura aditiva es posible fabricar microreactores con canales y geometrías características. Esto permite que se mejore la transferencia de masa y calor, lo cual provoca reacciones más rápidas y controladas. Esto impacta (sobre todo) a la catálisis heterogénea, donde los catalizadores están en una fase separada a la de los reactivos.
- **Reparación y regeneración de catalizadores:** la manufactura aditiva puede utilizarse para reparar o regenerar los catalizadores que estén desgastados o dañados por el reuso consecutivo. En lugar de reemplazar completamente un catalizador se pueden utilizar técnicas de fabricación aditiva para agregar material en las áreas afectadas y restaurar su funcionalidad. De esta forma, se abaratan costos y tiempo en comparación con los métodos tradicionales de reemplazo.

Con los ejemplos anteriores puede verse cómo el campo de la catálisis puede beneficiarse de la manufactura aditiva a través de la fabricación de catalizadores y, desde otros enfoques, puede tener un efecto sinérgico en el proceso global de una reacción catalítica.

La industria de la manufactura aditiva en México

En México existen empresas dedicadas a la manufactura aditiva que ofrecen servicios de impresión 3D (para prototipado rápido), fabricación de piezas personalizadas y producción en pequeña escala. Estas compañías utilizan una amplia gama de materiales como plásticos, metales y resinas para fabricar objetos tridimensionales según las especificaciones de los clientes.

Además, se han venido estableciendo diversos centros de investigación enfocados (o relacionados) con la manufactura aditiva. Estas instituciones promueven la innovación y la colaboración entre la industria y el sector académico para impulsar el avance de la tecnología en el país. Dentro de los laboratorios más importantes está el Laboratorio Nacional de Manufactura Aditiva Digitalización 3D y Tomografía Computarizada (MADiT)-UNAM, el Laboratorio de Nano & Micro Manufactura Aditiva de Polímeros y Materiales Compuestos "3DLab"-CIMAV y Laboratorio de Manufactura Aditiva-UPA.

Por otro lado, el gobierno mexicano también ha mostrado interés en fomentar el desarrollo de la manufactura aditiva. Por ejemplo, se han implementado programas y políticas para impulsar la adopción de esta tecnología en la industria, con el objetivo de aumentar la competitividad y promover la creación de empleos especia-

lizados en el campo de la impresión 3D¹⁵. Además, equipos de manufactura aditiva han sido comprados para instituciones públicas (como hospitales) para, de esta forma, mejorar la atención médica.

En el sector privado, la manufactura aditiva se utiliza en diversos sectores, como la industria automotriz, aeroespacial, médica, de diseño de productos y arquitectura, entre otros. Las empresas mexicanas han utilizado la impresión 3D principalmente para el prototipado de piezas, producción de componentes personalizados, fabricación de herramientas y dispositivos médicos y para la creación de modelos arquitectónicos, entre otros usos^{16,17}.

Finalmente, la manufactura aditiva ha venido ganando terreno en México y se ha convertido en una herramienta importante para la innovación y el desarrollo industrial en el país. Esta tecnología sigue evolucionando y se espera que siga expandiéndose a corto y largo plazo, y retribuya de forma positiva en la industria mexicana.

En resumen...

La manufactura aditiva y la catálisis están estrechamente relacionadas debido a que, a través de la fabricación aditiva, se pueden obtener catalizadores y microreactores personalizados, así como la optimización de los procesos catalíticos con la reparación de catalizadores desgastados. Estas aplicaciones tienen un impacto significativo en diversas áreas como la síntesis química, la industria de la energía y la producción farmacéutica, mejorando la eficiencia y selectividad de las reacciones catalíticas. La fabricación de microreactores puede generar un impacto positivo, no solo abaratando costos, sino también un enfoque

sostenible para producir productos químicos bajo demanda. Además, la flexibilidad que proporciona la manufactura aditiva facilita la adaptación de diseños de los reactores. De esta manera, la integración entre la manufactura aditiva y la catálisis tiene un gran potencial para mejorar la sostenibilidad, adaptabilidad y eficiencia de los procesos industriales.

Aunque se han realizado numerosos esfuerzos para utilizar la manufactura aditiva en la fabricación de catalizadores 3D, aún no se ha aprovechado todo el potencial de esta tecnología, debido a que la mayoría de los estudios se han centrado en la obtención de estructuras pequeñas (las cuales son similares a las producidas mediante métodos convencionales). Además, estos trabajos no superan la barrera de consideraciones químicas y materiales en el proceso de manufactura y no han saltado a la intensificación del proceso.

Agradecimientos

Lucy Caterine-Daza Gómez agradece a DGAPA-UNAM por la beca posdoctoral.

Referencias

- (1) American Chemical Society. Catalysis. <https://www.acs.org/greenchemistry/research-innovation/catalysis.html#:~:text=In%20chemistry%2C%20catalysis%20refers%20to,not%20consumed%20by%20the%20reaction.https://www.acs.org/greenchemistry/research-innovation/catalysis.html#:~:text=In%20chemistry%2C%20catalysis%20refers%20to,not%20consumed%20by%20the%20reaction.> (accessed 2023-05-11).
- (2) Hu, X.; Yip, A. C. K. Heterogeneous Catalysis: Enabling a Sustainable Future. *Frontiers in Catalysis* 2021, 1. <https://doi.org/10.3389/fctls.2021.667675>.
- (3) Schlögl, R. Heterogeneous Catalysis. *Angewandte Chemie International Edition* 2015, 54 (11), 3465–3520. <https://doi.org/10.1002/anie.201410738>.
- (4) Copéret, C.; Chabanas, M.; Petroff Saint-Arroman, R.; Basset, J. Homogeneous and Heterogeneous Catalysis: Bridging the Gap through Surface Organometallic Chemistry. *Angewandte Chemie International Edition* 2003, 42 (2), 156–181. <https://doi.org/10.1002/anie.200390072>.

- (5) *Advances in Carbon Capture*; Elsevier, 2020. <https://doi.org/10.1016/C2018-0-05339-6>.
- (6) Armor, J. N. A History of Industrial Catalysis. *Catal Today* 2011, 163 (1), 3–9. <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2009.11.019>.
- (7) Xiao, R.; Ding, M.; Wang, Y.; Gao, L.; Fan, R.; Lu, Y. Stereolithography (SLA) 3D Printing of Carbon Fiber-Graphene Oxide (CF-GO) Reinforced Polymer Lattices. *Nanotechnology* 2021, 32 (23), 235702. <https://doi.org/10.1088/1361-6528/abe825>.
- (8) Bhagia, S.; Bornani, K.; Agrawal, R.; Satlewal, A.; Đurkovič, J.; Lagaña, R.; Bhagia, M.; Yoo, C. G.; Zhao, X.; Kunc, V.; Pu, Y.; Ozcan, S.; Ragauskas, A. J. Critical Review of FDM 3D Printing of PLA Biocomposites Filled with Biomass Resources, Characterization, Biodegradability, Upcycling and Opportunities for Biorefineries. *Appl Mater Today* 2021, 24, 101078. <https://doi.org/10.1016/j.apmt.2021.101078>.
- (9) Yang, C.; Zhang, C.; Chen, Z.-J.; Li, Y.; Yan, W.-Y.; Yu, H.-B.; Liu, L. Three-Dimensional Hierarchical Porous Structures of Metallic Glass/Copper Composite Catalysts by 3D Printing for Efficient Wastewater Treatments. *ACS Appl Mater Interfaces* 2021, 13 (6), 7227–7237. <https://doi.org/10.1021/acsami.0c20832>.
- (10) Cannio, M.; Righi, S.; Santangelo, P. E.; Romagnoli, M.; Pedicini, R.; Carbone, A.; Gatto, I. Smart Catalyst Deposition by 3D Printing for Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell Manufacturing. *Renew Energy* 2021, 163, 414–422. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2020.08.064>.
- (11) Zhu, J.; Wu, P.; Chao, Y.; Yu, J.; Zhu, W.; Liu, Z.; Xu, C. Recent Advances in 3D Printing for Catalytic Applications. *Chemical Engineering Journal* 2022, 433, 134341. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2021.134341>.
- (12) Laguna, O. H.; Lietor, P. F.; Godino, F. J. I.; Corpas-Iglesias, F. A. A Review on Additive Manufacturing and Materials for Catalytic Applications: Milestones, Key Concepts, Advances and Perspectives. *Mater Des* 2021, 208, 109927. <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2021.109927>.
- (13) Zhu, J.; Wu, P.; Chao, Y.; Yu, J.; Zhu, W.; Liu, Z.; Xu, C. Recent Advances in 3D Printing for Catalytic Applications. *Chemical Engineering Journal* 2022, 433, 134341. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2021.134341>.
- (14) Hurt, C.; Brandt, M.; Priya, S. S.; Bhatelia, T.; Patel, J.; Selvakannan, P.R.; Bhargava, S. Combining Additive Manufacturing and Catalysis: A Review. *Catal Sci Technol* 2017, 7 (16), 3421–3439. <https://doi.org/10.1039/C7CY00615B>.
- (15) La Cámara Nacional de la Industria de Transformación (CANACINTRA). DIAGNÓSTICO PARA EL DESARROLLO DE PROCESOS DE FABRICACIÓN DE MANUFACTURA ADITIVA. chrome-extension://efaidnbmninnibpcjpcglclefindmkaj/https://www.gob.mx/cms/uploads/attachment/file/189123/0018-F-13032015_Diagn_stico_para_desarrollo_de_procesos_de_fabricaci_n_de_manufactura_aditiva_Parte_1.pdf (accessed 2023-05-22).
- (16) Verónica Alcántara. La Industria de La Manufactura Aditiva En México. *ManufacturaLATAM*. 2022.
- (17) Rodrigo Riquelme. *Manufactura Aditiva En México Adolece de Acceso a Inversión Por Desconocimiento de La Tecnología. El economista*. 2021. <https://www.eleconomista.com.mx/empresas/Manufactura-aditiva-en-Mexico-adolece-de-acceso-a-inversion-por-desconocimiento-de-la-tecnologia-20210717-0003.html> (accessed 2023-05-22).

Manufactura de estufas ecológicas, una nueva perspectiva que conecta el diseño con el usuario

Yovany Galindo, José Núñez

Escuela Nacional de Estudios Superiores Unidad Morelia. Antigua Carretera a Pátzcuaro No. 8701 Col. Ex Hacienda de San José de la Huerta C.P. 58190 Morelia, Michoacán, México

joseng@enesmorelia.unam.mx

Resumen

Este trabajo presenta el proceso de diseño, fabricación y difusión de una estufa de biomasa, destacando el papel crucial de la dinámica de fluidos computacional y la ingeniería asistida por computadora. Además, se ejemplifica cómo la academia puede involucrarse con las comunidades rurales y abordar sus necesidades energéticas. Esta colaboración ilustra el potencial de desarrollar soluciones innovadoras que mejoren la calidad de vida y promuevan el desarrollo sostenible en entornos rurales.

Palabras clave:

Estufas de biomasa, diseño asistido por computadora, difusión de tecnologías, comunidades rurales.

Introducción:

Una estufa de biomasa (diseñada para quemar leña) aprovecha el calor resultante para cocinar alimentos en una placa metálica o comal. Un componente esencial de estas estufas es la chimenea, la cual expulsa el humo generado durante la

combustión, evitando su acumulación en el ambiente y protegiendo la salud de los usuarios. En este trabajo ejemplificaremos cómo la ciencia y la ingeniería se aplican en el desarrollo de estas tecnologías para cubrir las necesidades energéticas de las comunidades rurales.

Para iniciar la reflexión se plantean algunas interrogantes clave: ¿Sigue siendo común cocinar con leña en las zonas rurales? ¿Qué características definen a una estufa ecológica? ¿De qué manera la ingeniería asistida por computadora contribuye al diseño de este tipo de tecnologías?

En los hogares, las labores de cocina suelen realizarse mayormente con estufas de gas LP o eléctricas. Además de estas, se difunden otras alternativas ecotecnológicas, como las cocinas solares. Sin embargo, es crucial resaltar que, en las comunidades rurales, las estufas de biomasa son ampliamente utilizadas. Estas estufas son especialmente útiles cuando la leña, su principal combustible, es abundante. No hay una

solución única y es esencial tener en cuenta que los usuarios eligen cierto tipo de tecnología para cocinar en función de sus recursos económicos y sus prácticas culturales [1].

El desarrollo de estufas eficientes de biomasa implica una colaboración estrecha con los usuarios o codiseño, de modo que las tecnologías ofrecidas satisfagan de manera más precisa las necesidades de las personas. Esto puede lograrse mediante la realización de investigaciones participativas que involucren a las comunidades rurales en el proceso de diseño y mejora. Al trabajar directamente con los usuarios es posible identificar sus requerimientos específicos, así como comprender mejor las condiciones ambientales y culturales en las que operarán estas estufas.

Al seleccionar una estufa de biomasa, es crucial considerar varios aspectos importantes. En primer lugar, se debe evaluar el tipo de tarea de cocinado que se realizará en ella, ya que distintos modelos pueden ser más apropiados para ciertos tipos de alimentos o técnicas culinarias. En el contexto mexicano, donde la fabricación de tortillas es una actividad destacada en la cocina diaria, muchas estufas de biomasa están equipadas con un comal para facilitar esta tarea específica.

Además, es esencial evaluar el mantenimiento necesario para garantizar el óptimo funcionamiento de la estufa, lo cual implica aspectos como la limpieza y el cuidado regular. El tipo de combustible utilizado también desempeña un papel crucial, ya que puede influir en la eficiencia y el rendimiento de la estufa, así como en su impacto ambiental. No se debe subestimar la importancia de reducir al mínimo las emisiones generadas durante el funcionamiento de la

estufa, tanto para mitigar la contaminación interior como para mejorar la calidad del aire en el entorno de la cocina. Es importante destacar que la adopción de este tipo de tecnologías implica una transición significativa. La exposición al humo de la leña ha sido asociada con problemas de salud en numerosas personas que utilizan fogones tradicionales [2, 3]. Además, el elevado consumo de leña contribuye al agotamiento de los recursos forestales y representa un gasto considerable para los hogares en términos de costos de cocción [4]. Por lo tanto, es crucial abordar estos desafíos mediante la promoción de tecnologías de cocina más limpias y eficientes.

Estrategias de diseño de estufas de biomasa

En este ejemplo presentamos una descripción del desarrollo de la estufa llamada k'eri, desarrollado para la comunidad indígena de San Francisco Pichátaro en Michoacán. Para comenzar, es esencial desarrollar una estrategia que contemple las preferencias de los consumidores y emplee instrumentos de política efectivos. Es crucial considerar los factores sociales, culturales y económicos del estado, así como las variaciones entre sus diferentes regiones [5]. La participación activa de cada beneficiario en todas las etapas del proceso de implementación es indispensable.

En el caso de la comunidad purépecha de San Francisco Pichátaro se implementaron talleres participativos como primera actividad para el desarrollo de una estufa de biomasa. Estos talleres permitieron conocer de cerca las necesidades energéticas de los usuarios y obtener información valiosa sobre cómo diseñar una estufa que se adapte de manera óptima a sus requerimientos.

En la segunda etapa se procedió a la definición del diseño. Entre las diversas metodologías utilizadas sobresalió el enfoque de la ingeniería asistida por computadora, que integra estrategias de diseño asistido por computadora y dinámica de fluidos computacional. Este método tiene como objetivo principal proporcionar una evaluación virtual de la tecnología, lo que permite un prototipado rápido [6]. Esta capacidad facilita la interacción con los usuarios y permite verificar si se cumplen sus expectativas.

La hipótesis fundamental es que este tipo de dispositivos tienen como centro de funcionamiento el volumen interior, que es la región por donde fluye el aire. La figura 1 muestra el diseño conceptual de esta región.

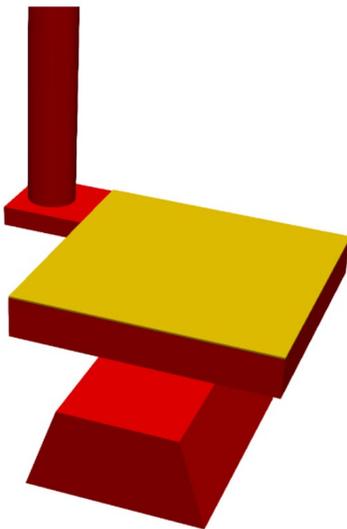


Figura 1. Volumen interior

La dinámica de fluidos computacional facilita la evaluación del rendimiento térmico a través de la solución numérica de las ecuaciones de conservación de masa, cantidad de movimiento, energía y especies químicas de la combustión. Esto permite la evaluación de múltiples configuraciones usando reglas de costo beneficio y, de este modo, encontrar la configuración óptima geomé-

trica. La figura 2 muestra la distribución de temperatura en el comal, la cual se obtiene a partir de esta solución numérica

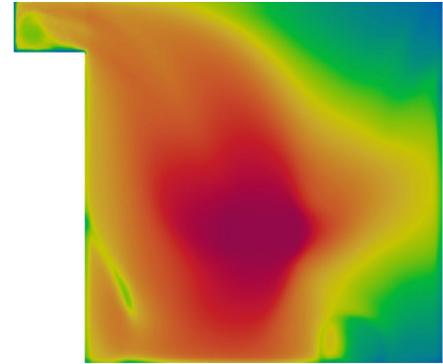


Figura 2. Distribución de temperatura en el comal

Una vez que se define el volumen interior es posible añadir elementos estructurales adicionales para proporcionar soporte, seguridad y funcionalidad. Para convertir el prototipo propuesto en una realidad tangible se pueden emplear estrategias como la impresión 3D o la manufactura en metal. Estos métodos permiten materializar la idea explorada en el entorno virtual de la computadora, llevando el diseño conceptual a la vida real de manera precisa y eficiente.

El dispositivo se fabricó en metal y se presentó en una demostración comunitaria, la interacción con los usuarios ocurrió en diferentes etapas: desde su receptividad inicial hacia la tecnología, su integración con ella, la exploración de sus características, hasta el punto en que decidieron adoptarla o rechazarla. La comunidad está probando varias tecnologías metálicas, ya que mostraron interés en su portabilidad, mientras mantienen un funcionamiento óptimo. La figura 3 ilustra la estufa en operación y la comunidad explorando las características de la estufa.

Discusión

A pesar de la existencia de numerosos diseños de estufas de biomasa, seguir desarro-



Figura 3. Demostración comunitaria de estufas

lizando nuevos dispositivos es fundamental por varias razones. En primer lugar, las necesidades y condiciones varían significativamente en diferentes partes del mundo. Por lo tanto, es necesario adaptar la tecnología a estas variaciones locales para garantizar su eficacia, relevancia y aceptabilidad. Desarrollar dispositivos que sean adaptables a diferentes tipos de biomasa disponibles localmente, así como a distintos climas y entornos, es esencial para su aplicación práctica y sostenible.

La dinámica de fluidos computacional puede modelar con precisión la transferencia de calor dentro de la cámara de combustión. Esta capacidad es crucial para diseñar estufas que sean capaces de calentar de manera uniforme y eficiente, lo que maximiza el aprovechamiento del calor generado. Al comprender y optimizar la distribución del calor en la cámara de combustión es posible desarrollar diseños que mejoren la eficiencia energética y reduzcan el consumo de combustible, lo que produce beneficios, económicos, de salud y ambiental.

La academia y las universidades pueden desempeñar un papel fundamental en el apoyo al desarrollo tecnología a través de una variedad de iniciativas y actividades incluyendo:

a) Investigar los impactos ambientales y so-

ciales de las estufas de biomasa, incluidos los efectos en la calidad del aire interior y exterior, la salud humana y el acceso energético en comunidades rurales y en desarrollo.

b) Ofrecer programas de capacitación y cursos especializados en diseño, fabricación, instalación y mantenimiento de dispositivos para estudiantes de ingeniería, ciencias ambientales y desarrollo sostenible.

c) Trabajar en estrecha colaboración con comunidades locales para comprender sus necesidades y desafíos específicos, y desarrollar soluciones tecnológicas adaptadas a sus contextos socioeconómicos y ambientales.

Conclusiones

El desarrollo de ecotecnologías desempeña un papel crucial en la transición energética, mejorando los métodos tradicionales de cocina y satisfaciendo las emergentes necesidades de los usuarios. En muchas áreas rurales, cocinar con leña sigue siendo común, lo cual resalta la importancia de mejorar estas prácticas mediante estufas ecológicas. Estas últimas se caracterizan por su eficiencia energética, reducción de emisiones y aprovechamiento óptimo de recursos locales. La ingeniería asistida por computadora facilita el diseño de estas tecnologías, permitiendo simulaciones precisas que mejoran el rendimiento térmico y la seguridad de los dispositivos. Mirando hacia el futuro, es crucial empoderar a las comunidades rurales para que participen activamente en el desarrollo de estas soluciones, integrando sus conocimientos tradicionales con innovaciones tecnológicas actuales. Este enfoque no solo promueve la autosuficiencia y el fortalecimiento comunitario, sino que también conserva el patrimonio cultural y se adapta específicamente a las necesidades locales de cada comunidad.

Agradecimientos

Los autores desean agradecer al proyecto CONAHCyT-PRONACES 319333.

Referencias

- [1] Anita V. Shankar, Ashlinn K. Quinn, Katherine L. Dickinson, Kendra N. Williams, Omar Masera, Dana Charron, Darby Jack, Jasmine Hyman, Ajay Pillarisetti, Rob Bailis, Praveen Kumar, Ilse Ruiz-Mercado, Joshua P. Rosenthal. Everybody Stacks: Lessons from Household Energy Case Studies to Inform Design Principles for Clean Energy Transitions. *Energy Policy*, vol. 141, junio de 2020, p. 111468. <https://doi.org/10.1016/j.enpol.2020.111468>.
- [2] Michael Brauer, Karen Bartlett, Justino Regalado-Pineda, and Rogelio Perez-Padilla. Assessment of Particulate Concentrations from Domestic Biomass Combustion in Rural Mexico. *Environmental Science & Technology*, 30(1):104–109, December 1996. <https://doi.org/10.1021/es9501272>
- [3] Kirk R Smith, John P McCracken, Martin W Weber, Alan Hubbard, Alisa Jenny, Lisa M Thompson, John Balmes, Anaité Diaz, Byron Arana, and Nigel Bruce. Effect of reduction in household air pollution on childhood pneumonia in Guatemala (RESPIRE): a randomised controlled trial. *The Lancet*, 378(9804):1717–1726, November 2011. [https://doi.org/10.1016/S0140-6736\(11\)60921-5](https://doi.org/10.1016/S0140-6736(11)60921-5)
- [4] Paulo Medina, V. Berrueta, M. Martínez, V. Ruiz, R.D. Edwards, O. Masera. Comparative Performance of Five Mexican Plancha-Type Cookstoves Using Water Boiling Tests. *Development Engineering*, vol. 2, 2017, pp. 20-28. <https://doi.org/10.1016/j.deveng.2016.06.001>.
- [5] Luz Angélica De La Sierra-de La Vega, Horacio Riojas-Rodríguez, Ester Librado-de La Cruz, Minerva Catalán-Vázquez, Rogelio Flores-Ramírez, Víctor Berrueta, and Astrid Schilmann. Implementation process evaluation of an improved cookstove program in rural San Luis Potosí, Mexico. *Energy for Sustainable Development*, 66:44–53, February 2022. <https://doi.org/10.1016/j.esd.2021.11.003>
- [6] José Núñez, Miguel F. Moctezuma-Sánchez, Elizabeth M. Fisher, Víctor M. Berrueta, Omar R. Masera, Alberto Beltrán. Natural-Draft Flow and Heat Transfer in a Plancha-Type Biomass Cookstove. *Renewable Energy*, vol. 146, febrero de 2020, pp. 727-36. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2019.07.007>.

Olimpiadas de París 2024, de pseudociencias e inclusión intersexual y trans

Astron Rigel Martínez Rosas

Asociación civil DiVU: Diversidad, cultura, género, alimentación y ciencia (CLUNI:

DDC17040509R4Q) www.divu.mx @divu_ac @colectivodivu

Coordinación de asignaturas sociohumanísticas, Facultad de Química UNAM. Circuito escolar, CU, Coyoacán, 04510, Ciudad de México, México

astronr@hotmail.com

Para la fecha de publicación de esta revista, los Juegos Olímpicos de París 2024 tendrán pocos días de haber terminado. Apresuraré entonces el paso para sacar este artículo a tiempo. La “polémica” inauguración dio mucho de qué hablar y estos primeros días ya están repletos de jugosos chismes, por lo que es un momento excelente para la sociabilización de la ciencia y también para cuestionar varios de nuestros prejuicios.



Mil quinientos Rotoplas de hielo

Comencemos por las pseudociencias y por los más de 50 millones de pesos mexicanos de hielo que figuran en el presupuesto original que presentó la Federación Internacional para estas olimpiadas [1]. Eso representa unas 1600 toneladas de agua congelada (ninguna empresa productora independiente tiene la capacidad de proveer y entregar todo ese hielo a tiempo pues, dimensionándolo, representa unas 25 veces más de todo el hielo que se usó para los juegos olímpicos de Tokio 2020). Pero, ¿para qué se necesita tanto hielo?.. ¿Alguna vez ha utilizado hielo para bajar la inflamación o para aliviar el dolor después de un golpe? Más o menos la misma función tiene el spray frío Traumazol (cloruro de etilo) que le ponen a futbolistas y demás deportistas después de lesionarse (cuando estos “cloruros” no están siendo utilizado como droga recreativa, aclaro).

La evidencia anecdótica que es cercana a nuestra experiencia cotidiana, junto con los años de investigación médica en crioterapia [41], han demostrado la efectividad del tratamiento frío para tratar ciertas afecciones

en condiciones muy particulares. Pero las personas atletas de las olimpiadas no solo están yendo a las clínicas por paquetes de hielo para heridas o golpes, asisten para realizar inmersiones totales en agua fría y baños helados. Y es que, a diferencia de los golpes, relajar los músculos o recuperarse adentro de agua helada no es un procedimiento médico que cuente con respaldo científico; tampoco se ha llegado a un consenso clínico en cuanto a la efectividad de estos tratamientos [1, 2]. Pero, incluso si existiera un consenso razonable, debemos recordar algunos tropiezos dentro de la historia de la medicina, como cuando se popularizaron los baños de agua fría para pacientes psiquiátricos en el siglo XIX [42], que eran respaldados por las opiniones médicas de la época, pero rara vez con buenos resultados (pasando entonces al campo de la pseudociencia y la pseudomedicina). Lo que sí sabemos es que esta práctica va en aumento. El *British Journal of Science Medicine* publicó que, durante los juegos de Río 2016, casi la mitad de visitas al centro de fisioterapia fueron para inmersiones en agua fría (prácticamente todas fueron para recuperación y casi ninguna para tratar lesiones). Esto representó un aumento del 300 % con respecto a Atenas 2004 [1]. Solo el tiempo y la evaluación retrospectiva dirán si, en la *moda del hielo*, valió la pena gastar todo ese dinero (que equivale al presupuesto que el gobierno de Nuevo León usó para la construcción del nuevo estadio de fútbol de los Tigres [43]).

Si las deportistas lo usan, yo lo quiero

Y es que las pseudociencias y tratamientos milagro ya han llegado a las olimpiadas en el pasado. En Londres 2012 se dio el repunte [3] de las cintas kinesiológicas (KT)



y pudimos ver a muchas personas atletas que orgullosas portaban estos supuestos dispositivos médicos adheridos a la piel. Los reviews [4] disponibles (y reviews de *systematic reviews* [5]) indican que “el 54 % de estudios concluyeron que las cintas KT no funcionan”. También muestran que (en el mejor de los casos) su uso es limitado y bastante específico para ciertas enfermedades (muy alejadas de justas deportivas) en donde quizá podría reportarse cierta mejora (misma que es difícilmente distinguible del efecto placebo). La prevalencia de esta (y algunos otros tratamientos de *medicina alternativa*) puede explicarse gracias a que el uso de cintas KT “parece no afectar negativamente en la recuperación de los pacientes que la usan”. Así que ni para adelante ni para atrás, con las bandas coloridas pegadas a los cuerpos de las personas atletas que supuestamente prometían aumentar la circulación sanguínea local y reducir la inflamación muscular “levantándoles el pellejo”. Nunca se logró comprobar que el uso de las mismas ayudara a aumentar los niveles de oxígeno de forma localizada y aquello que anuncian de “convertir el calor natural del cuerpo y regresarlo en forma de energía infrarroja” lo puede hacer, en realidad, cualquier prenda de vestir; no necesariamente los polímeros usados para fabricar esta tela

“ultrarrespirable”, que a veces es embebida con mentol y siempre es enriquecida con partículas cerámicas (un material al que bautizaron Celliant). En 2017, tras una demanda legal por publicidad engañosa, la empresa productora más importante de estas cintas acordó pagar 1.7 millones de dólares [6] para acallar las reclamaciones (pero nunca admitieron la inutilidad de su producto). Para los juegos de París 2024, la jugadora de voleibol Sara Hughes sacó a la venta una cinta KT de edición limitada y de firma profesional que “ella misma ayudó a diseñar”; a pesar de ello, no se ha visto a esta jugadora usarlas en ninguna de las retas que ha tenido hasta el mes de julio del presente año.

Otro caso es el de las ventosas médicas, que fueron tan vistosas y de uso muy generalizado durante las competencias de Río 2016 [7], aunque bastante ausentes en París 2024. ¿Será que los atletas olímpicos entraron en razón y dejaron de utilizarlas al ver que no funcionaban? Las marcas que dejan en la piel (que son muy parecidas a chupetones) delatan su uso. Hay evidencia científica confiable de que la eficiencia de dichas ventosas es baja o moderada (en el mejor de los casos) para la rehabilitación musculoesquelética y deportiva [8]. Esa pseudoterapia va a la baja. La que parece ir en aumento durante estos juegos olímpicos es la osteopatía visceral (un tratamiento holístico de medicina alternativa) de la cual, publicaciones y meta análisis científicos publicados concluyen que “no aporta ningún beneficio en ninguna de las condiciones musculoesqueléticas o no musculoesqueléticas estudiadas” [9, 10]. Así que, mientras la evidencia científica desmiente prácticas pseudocientíficas en el deporte y le corta una cabeza de serpiente al monstruo de la

desinformación, dos nuevas cabezas surgen cuatro años después, para las siguientes olimpiadas. En la época de la posverdad y la infodemia, las personas de ciencia estamos perdiendo la batalla ante los gigantes comerciales, porque simplemente no tenemos ni el tiempo ni los recursos suficientes para desmentir tanta paparruchada que sigue apareciendo de manera descontrolada.



Cuerpos diversos

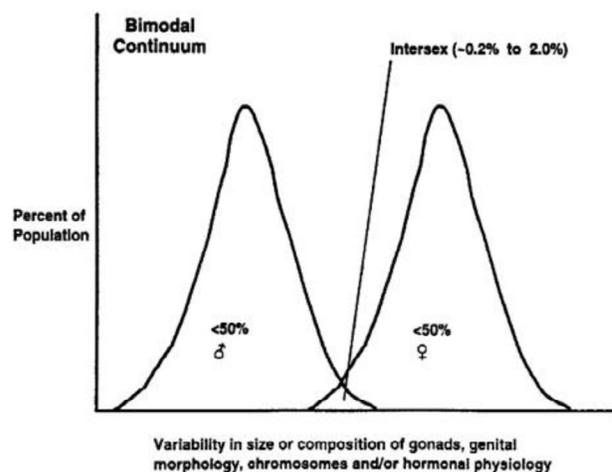
Pasemos a los escándalos. Algunas personas conservadoras se *sacaron de onda* al ver el irreverente espectáculo de rock pesado durante la inauguración de los juegos olímpicos. Mayor réplica tuvo el cuadro travesti (que en realidad fue una muestra escénica protagonizada por *Dragas*) que aludía a las bacanales (y no al famoso cuadro de la *Última cena* de Da Vinci, como algunos puritanos religiosos argumentaron). Más allá de las alegorías e interpretaciones, todo indica que aún es bastante incómodo para muchas personas visibilizar la diversidad étnica, cultural y sexual, o siquiera tomarse el atrevimiento de mostrar cuerpos diversos en televisión y demás medios masivos de comunicación (que por décadas solo favorecieron a cierta hegemonía y cierto ideal de belleza occidental). El espectáculo de inauguración es una muestra clara de que el mundo está cambiando. ¿Vamos a renegar de los nuevos términos y condiciones que esto conlleva?



Hablando de hegemonías, tal parece que para sacar una nota periodística [11, 12] del surfista Alan Cleland debe especificarse que es “nacido y criado en Colima”, aclarando que un rubio de ojos claros pueda ser tan mexicano como nosotros. Recordemos también a la multipremiada gimnasta bajacaliforniana Alexa Moreno, quien fue acosada e incluso criticada por supuestamente “normalizar” el sobrepeso, ya desde mucho antes de sus primeras olimpiadas en Río 2016 [44]. Opinar despiadadamente sobre los cuerpos ajenos es un mal generalizado que no se detiene en cuestionar si alguien es suficientemente *mexicano* o suficientemente *delgada* para tal o cual justa olímpica. ¿Se es lo suficientemente mujer o lo suficientemente hombre para competir? La pregunta lleva años y estos juegos olímpicos no fueron la excepción.

Esencialismo biológico

Se estima que la prevalencia de personas intersexuales en el mundo deportivo de alto rendimiento es unas 140 veces mayor que en la media global [13]. Como recordatorio, la intersexualidad es parte de los polimorfismos (incorrectamente llamados mutaciones) y variedades que presentan diversos seres vivos entre los que está presente la especie humana, en la cual la prevalencia se estima entre el 0.1 y el 2 % de toda la población [14]. En el sentido estricto, las personas intersexuales no son ni machos humanos ni hembras humanas, y sus cromosomas sexuales pueden ser diferentes a los conocidos XX y XY. Hay insensibilidad a hormonas sexuales, hiperandrogenia, disgenesia gonadal y demás variaciones de origen genético o ambiental que, en conjunto, amplían el espectro de las dos posibilidades sexuales que ya todos conocemos. La condición de *macho humano* o *hembra humana* se encuentra distribuida bimodalmente en dicho espectro, donde gran parte de la población se encuentra en estas dos categorías (personas endosexuales) pero una importante fracción se encuentra fuera de la tendencia central (y son las personas intersexuales) [30].



Pasemos ahora a las personas travestis, transgénero y transexuales, que suelen ser personas endosexuales y cuyo sexo asignado al nacer las coloca en lo que convencionalmente acordamos llamar *machos* o *hembras humanas*, pero que en algún punto de su vida tuvieron la autodeterminación de transicionar (social, hormonal o quirúrgicamente) al otro *género* (hombres o mujeres), a ninguno o algún género que escapa la concepción binaria (personas no binarias). Investigaciones que yo he realizado en México desde el 2018 muestran que la prevalencia de personas trans es de al menos un 0.57 %, en este lado del mundo [15]. En Brasil se ha reportado un 0.69 % [16] y en Estados Unidos [17] entre un 0.3 y 0.6 % (1.4 % en adolescentes). Mucho se ha escrito, debatido, discriminado e investigado en torno a las personas trans en el deporte. ¿Pueden competir con las personas cis?, ¿Deberían concursar en juegos separados (promoviendo la exclusión)? ¿Cuál es la finalidad de las competencias deportivas, en primer lugar?

Del laboratorio al comité internacional y a la prensa

Inquietudes de esta naturaleza han llegado a los laboratorios de investigación científica y bastante ciencia básica ha derivado de los hallazgos. Ahora sabemos, por ejemplo, que la especie humana tiene una altísima variación natural de testosterona, estrógenos y demás hormonas [39] que por años creímos que estaban fuertemente asociadas al rendimiento físico, y que esta variación está presente independientemente de los cromosomas. También aprendimos que lo anterior no es del todo relevante para muchas de las competencias deportivas, pues elevados niveles de testosterona no garantizan una ventaja biológica en disciplinas relacionadas con la resistencia. Sí



parece haber cierta ventaja en disciplinas que requieren de mayor fuerza física, muy particularmente en la parte superior del cuerpo [18]. Ahora debemos cuestionar si dicha ventaja representa un impedimento para que las personas trans compitan con sus congéneres, cuando por años hemos permitido que personas con otras “ventajas biológicas” compitan sin problema con aquellas personas que no son ni remotamente tan altas, ni tan corpulentas, ni tienen los brazos o las piernas tan largas... *La bendición* que hace a los cuerpos de ciertos atletas diferentes al resto de la población es admirable, mientras que el de las personas

trans e intersexuales es deleznable y un impedimento para competir... Los cuerpos de mujeres cis (especialmente de mujeres cis racializadas, con sobrepeso, muy delgadas o tantas otras características) también son constantemente fiscalizados. La doble moral de celebrar en unos, lo que en otros censuramos, nos ha llevado a la baja o nula (tal como pasó en París 2024) representación de la T de lo LGBTI+ (no solo en los deportes, también ocurre en la academia, en las ciencias, tecnología, ingenierías y matemáticas, STEM). Mucho más baja que el 0.57 % en todo lo anteriormente mencionado, como puedo dar fe en mis años como divulgador de la ciencia, defensor de derechos humanos y exolímpico internacional durante la International Chemistry Olympiad de 2008.

La homobofobia y los prejuicios de género nos afectan a todas las personas. Al clavadista olímpico que teje con agujas y ganchillo (usurpando así saberes femeninos, según algunas conservadoras); a las jugadoras de voleibol playero que denunciaron lo sexista de sus uniformes y optaron por utilizar pantalones [19]; al basquetbolista heterosexual que adquirió VIH en un tiempo en el que era considerada una enfermedad de drogadictos y homosexuales; a la gente de ciencia que activa y orgullosamente trabajamos la agenda política en materia de disidencia sexual; a los atletas representantes de la que es considerada como una afeminada disciplina, y a las poco femeninas o masculinizadas competidoras de “esa otra” justa deportiva. La boxeadora y ex embajadora de la UNICEF, Imane Khelif, estuvo en el centro de estas críticas durante París 2024. Vulneraron su derecho a la privacidad, hicieron públicas fotos de su infancia, la revictimizaron y señalaron públicamente en su país de origen (donde

es especialmente peligroso ser mujer), fue vetada de competencias anteriores por su supuestamente anormal nivel elevado de testosterona [20], se habló de ella como mujer trans, se habló de ella como intersexual, se exigió que se hicieran públicos su historial clínico y documentos probatorios que la acreditaran como mujer... La historia se repite, porque no hemos aprendido del pasado. Personas trans y no binarias ya han competido en las olimpiadas (Tokio 2020, Pekín 2022). Desde hace veinte años (2004), el Comité Olímpico Internacional lo permite (con varias restricciones, pero con un fallo favorable). En cuanto a las personas intersexuales hay muchísima más historia y se tienen registros de su participación en olimpiadas tan antiguas como las de Los Ángeles 1932 y Berlín 1936. ¿Noventa años no han sido suficientes para darnos cuenta de que el sexo no es binario (y de que excluir invisibiliza y desinforma)?



Entonces, ¿qué procede?

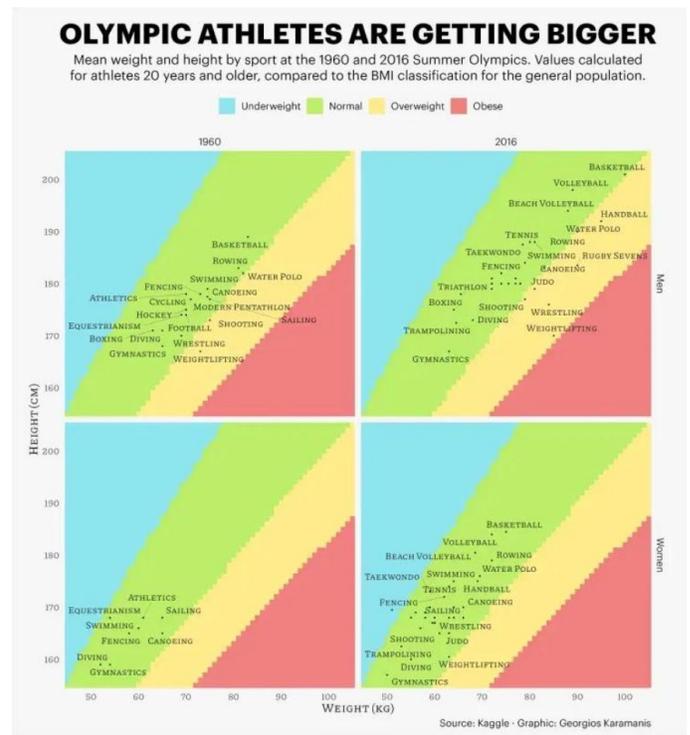
Existe un gran problema metodológico, si queremos entender todo esto desde la óptica de la ciencia. Además de que contamos con pocos referentes trans e intersexuales, el universo muestral es limitado (a veces de uno o dos casos aislados). Una persona trans no representa a todas las

personas trans. Esto aplica para cualquier identidad de género. Una mujer no es automáticamente feminista por ser mujer y, a veces, puede esperarse mayor inclusión de heterosexuales aliados que de gays con homofobia internalizada (esto es especialmente insidioso en el tema de las cuotas inclusivas de organizaciones que justifican ser incluyentes o progresistas “por tener una mujer –un LGBTI+ o cualquier persona de algún grupo de atención prioritaria– dentro de su equipo”).

Lo cierto es que no es una tarea sencilla. Por una parte, urge dejar de tomar casos específicos de ciertas personas atletas intersexuales y trans, extrapolándolos como si representaran la generalidad de todas las personas trans e intersex en el deporte. Por otra parte, también debemos exigir mayor empatía, solidaridad, inclusión y repensar las normativas y reglamentos para que estos sean más flexibles y tomen en consideración el contexto e historia de vida de cada persona competidora (y no hablo exclusivamente de la identidad sexual). Un review científico de mujeres trans atletas en deportes de élite concluye que muchas políticas deportivas de “inclusión” trans utilizan límites arbitrarios que no están basados en evidencia científica, mientras que la evidencia disponible hasta el momento indica que las mujeres trans que se han sometido a supresión de testosterona no tienen ventajas biológicas claras sobre las mujeres cis en el deporte [21]. De los hombres trans no contamos con información detallada, ¿misoginia en el deporte? Me pregunto a qué conclusiones habría llegado el comité organizador y tomador de decisiones de las olimpiadas si hubiera destinado el mismo presupuesto y esfuerzos que están invirtiendo en determinar si una persona es cissexual/endosexual

o transexual/intersexual para, en su lugar, conocer la efectividad de tratamientos milagro, pseudomedicina y pseudociencias que se han colado a las olimpiadas de París 2024, en años anteriores y entre los deportistas, tal como indiqué al principio del texto. No creo que haya voluntad política para hacerlo, especialmente con las absurdas cifras de dinero que inyecta la inversión privada y la presión de las marcas patrocinadoras.

Hay personas divulgadoras científicas que opinan que, para el tiempo en el que se resuelva la cuestión trans e intersexual en el deporte, las avanzadas civilizaciones del futuro ya habrán perdido interés por hacer olimpiadas y justas deportivas en primer lugar. Quizá en cien años nos demos cuenta de que las competencias “crean demasiados incentivos para comportamientos no éticos” y que “los atletas representan extremos biológicos (...) por lo que la competencia justa nunca ha sido la finalidad de competir” [22]. Quizá algún día concluyamos que

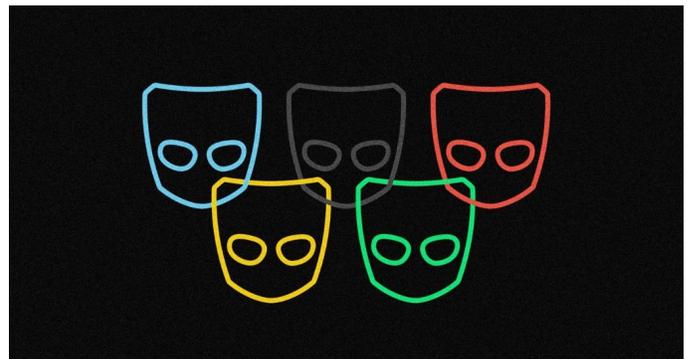


dividir a las competencias deportivas con base en el sexo y género de las personas es acientífico (y que deberíamos construir nuevas categorías).

Fuera de proporción

Lo que me queda claro es que estamos más enfocados en debatir acerca de los genitales y cromosomas de las personas (cuestionando su identidad y fiscalizando su condición trans o endosexual), que en hacer una reflexión crítica en torno a los discursos y prácticas pseudocientíficas en las olimpiadas o sobre los antivalores, prácticas deleznable y discursos de odio de algunos competidores. Veamos el ejemplo de uno de los representantes olímpicos de voleibol que compiten este año. Se trata de un ex convicto que fue encarcelado por abuso sexual infantil hace siete años. El comité olímpico alegó que sí puede participar, porque cumplió los criterios de elegibilidad marcados por la federación de voleibol de su país [23]. Él se ha defendido apelando, entre otras cosas, a que ahora es una *persona diferente a la que fue en ese tiempo* (cuando violó a una niña de 12 años) y que esos valores ya no lo describen... que él ha cambiado gracias a terapia, resoluciones legales y asesoría de especialistas. Una vez más, podemos ver un doble estándar olímpico, pues esta explicación fue válida para los jueces dictaminadores que lo dejaron competir en París 2024, pero no es una justificación válida para una persona trans que quiera utilizar exactamente esos mismos argumentos (las personas trans son personas diferentes a las que fueron hace años, los anquilosados valores transfóbicos —y otros prejuicios— no les describen y ya han cambiado gracias a terapia —de reemplazo hormonal—, resoluciones legales y la asesoría de especialistas).

Mientras que Palestina reporta que más de 300 atletas en su territorio han sido asesinados a causa del conflicto armado, un tercio de todas las personas atletas participantes de Israel en estas olimpiadas han hecho público su apoyo a la guerra y a las Fuerzas Armadas Israelíes. Algunas de estas personas incluso han servido al ejército de forma voluntaria (independientemente del servicio militar obligatorio en este país) [24]. Para estas olimpiadas se permitió la participación de Israel, a pesar de que existen precedentes tales como la expulsión (por varias décadas) de Sudáfrica a razón del conocido discurso de odio y segregación racial que tuvo durante el tiempo que duró el apartheid (el debate sobre si estas medidas funcionan o no continúa) [25]. ¿Qué sanciones hay para quienes propagan el discurso de odio hacia las poblaciones LGBTI+? ¿Esa es la ética y los valores a los que le estamos dando voz? ¿Un discurso que estamos promoviendo, premiando?



La conocida aplicación de citas gay Grindr (que tanto facilita encuentros sexuales en todo el mundo) tomó una postura radical al restringir los perfiles, accesibilidad y su uso dentro de los espacios olímpicos [26]. Esta medida es el resultado de una suma de factores, pero la gota que derramó el vaso fue una inética nota periodística (durante Río 2016) en la que se sacó del closet, difundió información privada e incluso se

calificó despectivamente el libre ejercicio sexual de competidores olímpicos y demás personas involucradas en los juegos. El periodista responsable de dicha nota obtuvo esa información usando Grindr y chateando bajo un perfil falso y, más allá del chisme, puso en peligro a las personas que provienen de países que criminalizan la homosexualidad. En el caso más extremo, podemos mencionar que al menos 200 atletas que compiten en París 2024 vienen de países en donde ser gay se castiga con la muerte [26]. En estas olimpiadas, al menos el 1.7 % de los más de 10 mil competidores olímpicos se identifican como LGBTI+ (de nuevo, nuestra población sexodisidente está subrepresentada, recordando que la prevalencia a nivel global es superior al 10 %). La evaluación retrospectiva dirá si las restricciones impuestas por Grindr en estos juegos sirvieron para algo o solo abonaron al estigma social y el slut shaming. Siendo un activista social, no concibo un escenario en el que censurar a una población —que por siglos ya fue censurada— se presente como la mejor solución. Algo en nuestra sociedad debe estar descompuesto si, para mantener la armonía y garantizar la justicia social, debemos recurrir a más y más prohibiciones y castigos.

No todo en la vida es ganar

Líderes religiosos y media centena de premios Nobel hicieron un llamado para detener los conflictos bélicos [27] que afectan a Palestina, Ucrania, Birmania y tantos otros países en guerra, al menos por el tiempo que duren las olimpiadas y siguiendo la milenaria tradición griega de la tregua olímpica. Esa empatía y compromiso social me parecen remarcables (además de una clara forma de activismo político en la que participan personas científicas e investigadoras de todo el

mundo). También es una gran oportunidad para reforzar las alianzas que permiten lograr objetivos comunes y demás cooperación internacional. Mi padre siempre me dijo que las personas deportistas de alto rendimiento deberían servirnos como ejemplo de perseverancia, dedicación y disciplina. Incluso pueden empoderar a generaciones enteras de mujeres y niñas. Su ejemplo favorito es la gimnasta Nadia Comaneci, quien obtuvo el primer diez perfecto en toda la historia de las olimpiadas durante su participación en Montreal 1976, siendo todavía una adolescente. Esta talentosa mujer le enseñó a la humanidad entera que, con dedicación y entrega, al menos por unos instantes, la perfección es posible. Esos son los valores que deberíamos promover, replicar y premiar.

Las olimpiadas no solo entretienen, también educan y replican los valores ya mencionados (a los que le sumaría la justicia y el reconocimiento). En este tenor, considero incompatible promover la exclusión y los discursos de odio hacia las personas trans, la diversidad sexual, personas con tatuajes (Tokio 2020) y hacia otros grupos en situación de vulnerabilidad social. Desde los preparativos para estas olimpiadas, personas defensoras de derechos humanos de todo el mundo denunciaron [28] las campañas de “limpieza social” y desplazamiento forzado que reubicaron a miles de personas en situación de calle y deportaron migrantes que habitaban puentes, plazas públicas y otros puntos turísticos que serían empleados para las olimpiadas [29], todo con la finalidad de “mejorar la imagen pública del país” y supuestamente mantener el orden social.

Desde mi punto de vista, el mensaje de inclusión, empatía y no discriminación valen mucho más que cualquier medalla (y justifi-

OLYMPIC ATHLETES' PHYSICAL ATTRIBUTES



GABBY DOUGLAS

16 years old; 4 feet, 11 inches.

When she rotates on the uneven bars, her body will generate enough force to make it the equivalent of 9 times her normal body weight because of the rotation.

The run-up to the vault is approximately 82 feet; she will be hitting speeds of 15 mph.

Her momentum helps her spring off the board with loads of force, helping her to launch almost 13 feet in the air.

Her arms are strong enough to speed up her rotation when doing twists and flips.

MICHAEL PHELPS

6 feet, 5 inches.

He wears a size 14 shoe.

He has a 6-foot-7-inch wing span.

Michael Phelps' leg length is in proportion to a 6-foot-tall man, and his torso length fits a man 6-foot-8.

His elbows, knees, ankles and shoulders are double jointed.

His shoulders are rumored to be 45 inches across.



LEBRON JAMES

6 feet, 8 inches and about 250 pounds.

His legs produce 700 pounds of force when lifting off for a dunk, and his vertical leap can reach up to 43 inches.

He has a 7-foot wing span.

His arms can stretch out far enough to dunk the basketball even though his body is 3 and half feet away from the rim.

LeBron James' hands are 9.25-inches long, letting him grip a basketball like few others.

USAIN BOLT

6 feet, 5 inches.

While it takes most elite sprinters 44 strides to complete 100 meters, Bolt does it in 41.

He reaches a top speed of 28 mph in the 100-meter dash.

Each step that hits the ground can cause a force equivalent to 1,000 pounds of pressure.

He wears a size 13 shoe.



BRADY ELLISON

When the archer pulls the arrow back, he creates 50 pounds of draw weight.

During an Olympic event, he will have to shoot the arrow more than 100 times.

This stance to the left is called potential energy. The arrow can reach speeds of more than 160 mph.

Ellison's vision is 20/10, which means he is above average.

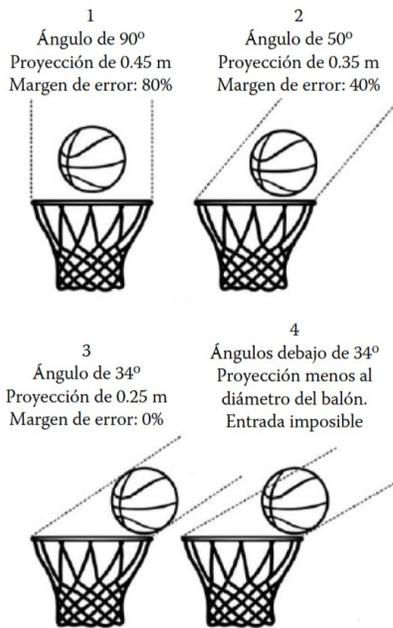
can la aceptación plena de personas trans e intersexuales en la categoría del género con el que se identifican). También deberíamos cuestionarnos si podemos permitir que las olimpiadas sean utilizadas como una plataforma (de alcance mundial) que promueve la desinformación, las pseudociencias o la publicidad engañosa que busca posicionar productos milagro y aumentar sus ventas en un mundo que refunfuña ante la búsqueda por la equidad.

Un necesario complemento

Para este artículo quise alejarme de los lugares comunes que mis pares divulgadores científicos ya han explotado hasta el cansancio. Utilizar a las olimpiadas como excusa para hablar de ciencia me parece una premisa un tanto gastada. De cualquier forma, funciona. La buena divulgación no solo puede ser bella, sino necesaria. Así que pongo a su alcance algunos recursos que pueden serle de bastante utilidad, si lo que buscaba al leer este texto era conocer más sobre la ciencia del deporte, los novedosos materiales que ayudan a las personas deportistas, la química de las medallas olímpicas y otros tantos temas relacionados. En primer lugar está el fantástico libro *En sus marcas, listos... ¡Ciencia! Crónicas de investigación en la cancha y deporte en el laboratorio* [31] escrito por el divulgador científico mexicano Miguel García Guerrero. Sus cuantiosos ejemplos son cercanos a nuestra cotidianidad latinoamericana y a la cultura popular.

Propuestas pedagógicas para el aula y apoyo a la docencia (desde el preescolar hasta preparatoria) las hallará en los recursos electrónicos y ligas de *The Science and Math of the Summer Olympics* [32]. La presentación interactiva del New York

EJEMPLOS DE ÁNGULOS DE ENTRADA DEL BALÓN AL ARO



Times Six Olympic athletes described the delicate mechanics [33] es un paso a paso de cómo atletas de alto rendimiento hacen lo que hacen. La página oficial del Comité Olímpico Internacional tiene un dinámico abanico multimedia [34] que nos adentra a un laboratorio de anatomía y ciencia del deporte, y nos permite explorar las características corporales de los atletas olímpicos más populares. Y ni empezar a hablar de las personalidades científicas detrás de estas olimpiadas, usted escoja qué rama STEM le interesa (*El matemático que ayuda a los nadadores olímpicos a ir más rápido, Física en acción, El papel de los científicos franceses en las olimpiadas*) [35, 36, 37].

La divulgación científica con perspectiva integral de diversidad sexual es escasa (y todavía más lo es el trabajo presencial de base que impacte nuestros grupos prioritarios). Los aliados y pares LGBTI+ de *AsapSCIENCE* tienen toda una serie de videos sobre la ciencia de las olimpiadas en su canal digital [38]. Están los multipremiados libros de

la neurocientífica y divulgadora feminista Cordelia Fine [39] y del filósofo y activista español trans Paul Beatriz Preciado [40]. Mi recomendación para la ciencia comunitaria en grupos de atención prioritaria siempre será ir directamente con las poblaciones estudiadas y convivir con estas personas (escuchar sus inquietudes, vivir de primera mano sus retos y discriminación, y lo más importante, retribuir y corresponder desde la academia –divulgación incluida– de forma activa y retroactiva), al menos eso es lo que intentamos hacer en DiVU AC. Por eso, antes de opinar del tema trans e intersexual, conozca a personas científicas trans e intersexuales. Si quiere profundizar más en el tema trans, bajo una óptica científica y de las olimpiadas, la referencia obligada es el video de Sabine Hossenfelder [22]. Todo su canal está repleto de los más completos y fundamentados videos de comunicación científica.

Agradecimientos

Quiero agradecer el valioso apoyo de las personas prestadoras de Servicio Social de la UNAM que me asistieron a través de nuestro programa “Promotores y promotoras jóvenes de DDHH y ciencias naturales y exactas (a través de la divulgación) para personas que viven con VIH, población LGBTI+ y personas en rehabilitación por uso de drogas”, con clave 2023-5/1144-5899, de la asociación civil DiVU de personas científicas LGBTI+, divulgadoras científicas y activistas sociales. Extiendo mi reconocimiento y agradezco el apoyo y compromiso social de: Citlali Correa Pérez, Wendy Sherlyn Cayetano Antonio, Victoria Martínez García, María Fernanda Iturbide Martínez, Juan Alejandro Cifuentes Bravo y Tania Chirinos Hernández. Quiero agradecer al prestador de Prácticas Profesionales, psicólogo Miguel Ángel Gallagos Pérez, del Tecnológico Universitario

Naucalpan, a quien también asesoré durante su estancia con nosotros en DiVU a.c. dentro del programa PPDIV-0523. No menos importante, agradezco la atenta revisión de la bióloga trans Michelle Alani Vences Espindola y del doctorando Luis Fernando Patlán Velázquez de la UAM-I.

Referencias

1. Racinais S, Ihsan M, Grant M, et al. Ice challenge in recent summer olympic games. *British Journal of Sports Medicine*. Published Online First: 25 July 2024. doi: 10.1136/bjsports-2024-108664
2. Dury, Julien. (29 de julio de 2024). From ice baths to osteopaths: unproven therapies at the Olympics. *Medical Xpress*.
3. Gavura, Scott (22 de junio de 2023). Can Kinesiology Tape Increase Oxygen Delivery and Improve Sports Performance?. *Science-Based Medicine*.
4. Dehghan F., Fouladi R., Martin, J. (2023). Kinesio taping in sports: A scoping review. *Journal of Bodywork and Movement Therapies*. DOI:<https://doi.org/10.1016/j.jbmt.2023.05.008>
5. Piriš, A. i Kozinc, Ž. (2024). Kinesio taping - What have we learned in 50 years?: A review of existing systematic reviews. *Hrvatska revija za rehabilitacijska istraživanja*, 60 (1), 119-161. <https://doi.org/10.31299/hrri.60.1.6>
6. Batterman, Cardozo, Freeman, Ganz, Katz, Leccese. (7 de julio de 2017). Athletic Tape Maker Feels the Pain, Settles Misleading Advertising Suit. *The National Law Review*.
7. Novella, Steven (10 de agosto de 2016). Cupping – Olympic Pseudoscience. *Science-Based Medicine*.
8. Mohamed, Ayman A., Zhang, Xueyana., Jan, Yih-Kuena. (2023). Evidence-based and adverse-effects analyses of cupping therapy in musculoskeletal and sports rehabilitation: A systematic and evidence-based review. *Journal of Back and Musculoskeletal Rehabilitation*. 36 (1) p. 3-19. DOI: 10.3233/BMR-210242
9. Luis Ceballos-Laita, Edzard Ernst, Andoni Carrasco-Uribarren, Germán Esteban-Tarcaya, Lucas Mamud-Meroni, Sandra Jiménez-del-Barrio. (2024). Is visceral osteopathy therapy effective? A systematic review and meta-analysis. *International Journal of Osteopathic Medicine*. <https://doi.org/10.1016/j.ijosm.2024.100729>.
10. Oliver P. Thomson, Andrew MacMillan. (2023). What's wrong with osteopathy?. *International Journal of Osteopathic Medicine*. <https://doi.org/10.1016/j.ijosm.2023.100659>.
11. Mancera, Diego. (29 de julio de 2024). Alan Cleland cae pero provoca que México enloquezca con el surf en los Juegos Olímpicos. *El País*.
12. Valencia, Iago A. (23 de julio de 2024). Alan Cleland, el atleta que ha cambiado el surfing mexicano. *GQ*.
13. Bermon S, Garnier PY, Hirschberg AL, Robinson N, Giraud S, Nicoli R, Baume N, Saugy M, Fénichel P, Bruce SJ, Henry H, Dollé G, Ritzen M. (2014). Serum androgen levels in elite female athletes. *J Clin Endocrinol Metab*. DOI: 10.1210/jc.2014-1391.
14. Furtado PS, Moraes F, Lago R, Barros LO, Toralles MB, Barroso U Jr. (2012). Gender dysphoria associated with disorders of sex development. *Nat Rev Urol*. DOI: 10.1038/nrurol.2012.182.
15. Martínez, Astron. (2020). Ni minoría ni cuota: divulgación científica LGBTI+, *Revista Catálisis*, Ecuador, 4 (2). p. 41-43.
16. Spizzirri, G., Eufrásio, R., Lima, M.C.P. et al. (2021). Proportion of people identified as transgender and non-binary gender in Brazil. *Sci Rep* 11, 2240. <https://doi.org/10.1038/s41598-021-81411-4>.
17. Jody L. Herman, Andrew R. Flores, Kathryn K. O'Neill. (2022). How Many Adults and Youth Identify as Transgender in the United States?. *Williams Institute UCLA School of Law*.
18. Healy ML, Gibney J, Pentecost C, Wheeler MJ, Sonksen PH. (2014). Endocrine profiles in 693 elite athletes in the postcompetition setting. *Clin Endocrinol Oxf*. (2) 294-305. DOI: 10.1111/cen.12445. Epub 2014 Apr 2. PMID: 24593684.
19. Otto, Tyson. (31 de julio 2024). Ridiculous: Controversy erupts over Olympic beach volleyball uniforms. *News.com.au*
20. Gaydos, Ryan (1 de agosto de 2024). Who is Imane Khelif: The Algerian Olympic boxer deemed to have male chromosomes. *Fox News*
21. Pavlenko, Félix. (2022). Transgender Women Athletes and Elite Sport: A Scientific Review. *The Canadian Centre for Ethics in Sport (CCES) Canadian Centre For Ethics In Sport Cces, Research Hub For Gender Equity In Sport E-Alliance*. <https://hal.science/hal-04477646/file/transgenderwomenathletesandelitesport-ascientificreview-e-final%20%281%29.pdf>
22. Hossenfelder, S. [Sabine Hossenfelder]. (4 de junio de 2022). Trans athletes in women's sports: Is this fair? [Video]. *YouTube*. <https://www.youtube.com/watch?v=cZ9YAFYIBOU>
23. Lawton, Katherine. (25 de julio de 2024). Why is a convicted child rapist allowed to compete in the Olympic Games?. *Daily Mail UK*.
24. Zidan, Karim. (25 de julio de 2024). Israel's Olympic Soldiers. *Sports Politika*.
25. Rosner, S., & Low, D. (2009). The efficacy of Olympic bans and boycotts on effectuating international political and economic change. *Tex. Rev. Ent. & Sports L.*, 11, 27.
26. Monteil, Abby. (26 de julio de 2024). There's a Good Reason Why Grindr Turned Off Location Services in the Olympic Village. *Them*.
27. Kravchuk, Vira. (14 de julio de 2024). End the loss of human lives: Nobel laureates demand ceasefire in Ukraine and Gaza ahead of Olympics, 51 Nobel Prize laureates signed an open letter. *Euromaidan Press*.
28. Martínez, A. [astronr]. (28 de mayo de 2024). El viernes voy a estrenar taller científico sobre Cambio climático y personas en situación de calle. Es en Ciudad Universitaria. [Publicación de estado]. *Facebook*. <https://>

- www.facebook.com/share/p/D9YVtyswRfCg4fHv/
29. Hurtes, Sarah y Le Stradic, Ségolène. (11 de julio de 2024). France Is Busing Homeless Immigrants Out of Paris Before the Olympics. *The New York Times*.
 30. King DE. (2022). The Inclusion of Sex and Gender Beyond the Binary in Toxicology. *Front Toxicol*. DOI: 10.3389/ftox.2022.929219.
 31. García Guerrero, Miguel. (2019). En sus marcas, listos... ¡Ciencia! Crónicas de investigación en la cancha y deporte en el laboratorio. México: Juan Pablos Editor, Universidad Autónoma de Zacatecas.
 32. Jeung, Emily. (2 de julio de 2024). The Science and Math of the Summer Olympics. *Pacific Science Center*.
 33. The New York Times. (s.f.). Six Olympic athletes described the delicate mechanics behind their chosen event. Here's how they do what they do. <https://www.nytimes.com/interactive/2024/07/29/science/paris-olympics-science.html>
 34. Comité Olímpico Internacional. (s.f.). Anatomy of Olympics IOC. <https://olympics.com/en/original-series/anatomy-of/>
 35. Castelvechi, Davide. (31 de julio de 2024). The mathematician who helps Olympic swimmers go faster. *Nature*. <https://www.nature.com/articles/d41586-024-02514-2>
 36. Pope, Amy. (17 de junio de 2024). Physics In Action: Paris 2024 Olympics To Debut High-Level Breakdancing. *Discover Magazine*. <https://www.discovermagazine.com/the-sciences/physics-in-action-paris-2024-olympics-to-debut-high-level-breakdancing>
 37. The Inria Foundation. (17 de abril de 2024). Olympic Games 2024: What role for French scientists?. *National Institute for Research in Digital Science and Technology*. <https://www.inria.fr/en/jo-paris-2024-french-scientists-sport>
 38. Brown, Gregory y Moffit, Mitchell. [AsapSCIENCE]. (2 de febrero de 2014). Amazing Olympic Facts. [Video]. YouTube. <https://www.youtube.com/watch?v=fOyO6l-75GU8>
 39. Fine, Cordelia. (2018). Testosterona rex: mitos sobre sexo, ciencia y sociedad. España: Paidós.
 40. Preciado, Paul B. (2019). Un apartamento en Urano: Crónicas del cruce. España: Anagrama.
 41. Bleakley, C. et al. (2014). Whole-body cryotherapy: Empirical evidence and theoretical perspectives, *Open Access Journal of Sports Medicine*, p. 25. doi:10.2147/oajsm.s41655.
 42. Foucault, M. and Utrilla, J.J. (2015). Historia de la locura en la época clásica. Michel Foucault ; Juan José Utrilla, traductor. México: Fondo de Cultura Económica.
 43. Milenio Política. (10 de enero de 2023). Gobierno de NL plantea asignar 50 mdp al nuevo estadio de Tigres. Milenio.
 44. Sulbarán Lovera, Patricia. (17 agosto 2016). Me dolió. No soy un robot que no siente: habla la gimnasta mexicana Alexa Moreno, criticada por su peso en las Olimpiadas. *BBC Mundo*

Imágenes

1. [https://www.infobae.com/new-resizer/_nxpihOEm-9pW3ccn_trCb2-aFfg=/1200x1200/filters:format\(webp\):quality\(85\)/cloudfront-us-east-1.images.arcpublishing.com/infobae/ICFPJDKGNVERNBN-3LW7AZ7ADNI.jpg](https://www.infobae.com/new-resizer/_nxpihOEm-9pW3ccn_trCb2-aFfg=/1200x1200/filters:format(webp):quality(85)/cloudfront-us-east-1.images.arcpublishing.com/infobae/ICFPJDKGNVERNBN-3LW7AZ7ADNI.jpg)
2. https://www.hjnews.com/news/state/kt-tape-launches-pro---signature-sara-hughes-limited-edition-tape-ahead-of-olympic/article_9292e08b-0d98-55a2-a569-b1eb7ee8c82a.amp.html
3. <https://www.mundodeportivo.com/juegos-olimpicos/rio-2016/20160808/403777968252/michael-phelps-misterio-manchas-marrones-secreto-rio-2016-cupping.html>
4. <https://elpais.com/autor/antonio-ortuno/>
5. https://www.reddit.com/r/ElorBeSub/comments/1e-gwzd9/drag_queens_ruined_his_olympic_dreams/#lightbox
6. <https://jeffsearle.blogspot.com/2020/?m=1>
7. https://en.as.com/olympic_games/who-are-the-tallest-shortest-youngest-and-oldest-basketball-players-at-the-2024-paris-olympic-games-n/?outputType=amp
8. <https://www.gettyimages.com.mx/fotos/imane-khelif?family=editorial>
9. <https://www.visualcapitalist.com/cp/charted-olympic-athletes-getting-bigger/>
10. <https://es.wired.com/articulos/app-de-citas-grindr-estara-bloqueada-en-villa-olimpica-de-paris-2024>
11. <https://abcnews.go.com/Sports/fullpage/olympic-athletes-physical-attributes-16864853>
12. García Guerrero, Miguel. (2019). En sus marcas, listos... ¡Ciencia! Crónicas de investigación en la cancha y deporte en el laboratorio. México: Juan Pablos Editor, Universidad Autónoma de Zacatecas.

Las ecuaciones cúbicas de estado en la dinámica de fluidos

Rosendo Monroy-Loperena

ROMON. Paseo de los Pirules 124, 04250 CDMX, México
rosendo.monroyloperena@gmail.com

Resumen

Este trabajo examina la aplicación de las ecuaciones cúbicas de estado en la dinámica de fluidos, enfocándose en cómo describen propiedades termodinámicas y de transporte en entornos industriales y científicos. Se aborda desde la ecuación de Van der Waals, formulada en 1873, hasta adaptaciones modernas, cubriendo temas como densidad, presión de saturación, energía, capacidades caloríficas, compresibilidad, velocidad del sonido, expansión volumétrica, viscosidad y tensión superficial. Este estudio resalta la evolución de estas ecuaciones para manejar transiciones de fase y mezclas complejas, subrayando su relevancia en el diseño de procesos y la mejora de tecnologías de ingeniería.

Palabras Clave:

Termodinámica, ecuaciones cúbicas de estado, propiedades de fluidos, dinámica de fluidos, modelado predictivo.

Introducción

La dinámica de fluidos es una rama crítica que estudia los fluidos en movimiento, utilizando ecuaciones de estado, especialmente las cúbicas, para describir propiedades termodinámicas y de transporte en varios

contextos.

Las ecuaciones de estado son relaciones matemáticas que describen el comportamiento de los fluidos, correlacionando variables como presión, volumen y temperatura. Las ecuaciones cúbicas de estado, en particular, son un tipo especial de ecuación de estado que incluye términos cúbicos en el volumen molar, lo que les permite describir con mayor precisión las propiedades de los fluidos reales en comparación con las ecuaciones lineales o cuadráticas. Las ecuaciones cúbicas de estado son especiales porque ofrecen un equilibrio entre complejidad matemática y precisión predictiva, permitiendo una descripción más detallada de las interacciones moleculares y las transiciones de fase. Estas ecuaciones son esenciales en el modelado predictivo de propiedades termodinámicas y de transporte en diversos contextos industriales y científicos.

Desde los primeros estudios de Leonardo da Vinci e Isaac Newton, pasando por las contribuciones de Daniel Bernoulli y Leonhard Euler, hasta aplicaciones modernas en aeronáutica, automoción, meteorología y oceanografía, la dinámica de fluidos ha integrado técnicas avanzadas de simula-

ción y modelado predictivo. Este desarrollo histórico y técnico de la dinámica de fluidos es detallado ampliamente por Batchelor [1], que aborda desde los fundamentos teóricos establecidos por los primeros pioneros hasta los desarrollos contemporáneos en tecnologías de simulación computacional.

Para entender la relevancia de las ecuaciones cúbicas de estado, es útil conocer su evolución histórica y sus aplicaciones. La primera ecuación de estado cúbica fue propuesta por Johannes Diderik van der Waals, en 1873, marcando un hito en la termodinámica al considerar las interacciones entre moléculas y el volumen ocupado por ellas. A partir de entonces, las ecuaciones cúbicas de estado han evolucionado para mejorar la precisión en la predicción de propiedades de los fluidos en diversas condiciones. Estas ecuaciones son fundamentales en la industria petroquímica, la ingeniería de procesos, y en aplicaciones científicas, donde se requiere un modelado preciso de las propiedades de los fluidos.

Ecuaciones cúbicas de estado

Una ecuación de estado es una relación matemática que describe cómo las propiedades macroscópicas de un sistema, como la presión, el volumen y la temperatura, están interrelacionadas. Las ecuaciones cúbicas de estado son una subclase de ecuaciones de estado que incluyen términos cúbicos en el volumen molar. La forma general de una ecuación cúbica de estado es:

$$p = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{g(v)}$$

donde p es la presión, v es el volumen molar, T es la temperatura, a y b son parámetros específicos del fluido y $g(v)$ es una

función cuadrática del volumen molar. Estas ecuaciones son capaces de capturar mejor las interacciones intermoleculares y los efectos de volumen finito en comparación con las ecuaciones de estado más simples, como la ecuación de los gases ideales.

Las ecuaciones cúbicas de estado, desde su concepción por Johannes Diderik van der Waals en 1873 [2], han sido fundamentales en el desarrollo de la termodinámica aplicada.

1. J.D. Van der Waals [2]: La tesis doctoral de Van der Waals, "*Continuity of the gaseous and liquid state of matter*", introduce la primera ecuación de estado que considera las interacciones entre moléculas y el volumen ocupado por ellas. Este enfoque revolucionario no solo explica el comportamiento de los gases reales más adecuadamente que la ley de los gases ideales, sino que también establece una base para estudiar fenómenos críticos y transiciones de fase.

2. Redlich & Kwong[3]: Su trabajo en "*On the thermodynamics of solutions*" propone mejoras significativas sobre la ecuación de Van der Waals, especialmente en la estimación de fugacidades en soluciones gaseosas. Esto fue fundamental para la industria petroquímica, mejorando la precisión de las predicciones de equilibrio líquido-vapor en mezclas de hidrocarburos.

3. Soave[4]: "*Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state*" adapta la ecuación de Redlich-Kwong para un mejor manejo de las propiedades de los hidrocarburos bajo condiciones de alta presión. La modificación de Soave mejora la capacidad de la ecuación para predecir el comportamiento de las fases, especialmente cerca del punto crítico.

4. Peng & Robinson[5]: En "*A new two-constant equation of state*", introducen una ecuación que se convirtió en un estándar de la industria para el manejo de fluidos en condiciones extremas. Este modelo es notoriamente efectivo en la predicción de equilibrios de fases y ha sido adoptado ampliamente en el diseño de procesos de gas y petróleo.
5. Martin[6]: "*Cubic equations of state-which?*" proporciona una evaluación crítica de las diferentes formas de ecuaciones cúbicas disponibles hasta ese momento, comparando su eficacia y aplicabilidad en diversos escenarios industriales, lo cual ha orientado la selección de ecuaciones adecuadas para aplicaciones específicas.
6. Abbott[7]: En "*Cubic equations of state: an interpretive review*", revisa las ecuaciones desde una perspectiva teórica, destacando su importancia en el diseño de procesos químicos y en la predicción de fenómenos termodinámicos complejos, ofreciendo perspectivas sobre su utilidad práctica y limitaciones.
7. Wei & Sadus[8]: "*Equations of state for the calculation of fluid-phase equilibria*" es fundamental para entender cómo las ecuaciones cúbicas pueden ser utilizadas para modelar equilibrios de fases en sistemas complejos, especialmente en la industria química y petroquímica.
8. Anderko[9]: "*Cubic and generalized van der Waals equations*" ofrece una visión práctica sobre la utilidad de estas ecuaciones en la experimentación y el análisis termodinámico, destacando su papel en la comprensión de los comportamientos de fluidos bajo condiciones experimentales controladas.
9. Valderrama[10]: En "*The state of the cubic equations of state*", se examina las variaciones y adaptaciones de las ecuaciones cúbicas a lo largo del tiempo, subrayando cómo se han modificado para manejar mejor las transiciones de fase crítica y las mezclas complejas. Destaca la importancia de estas ecuaciones en el diseño de procesos industriales y cómo han sido esenciales en el desarrollo de tecnologías más eficientes y precisas para la industria química.
10. Economou[11]: En "*Cubic and generalized van der Waals equations of state*", se aborda cómo las generalizaciones de la ecuación de Van der Waals han permitido adaptar mejor estos modelos a sistemas y condiciones más complejas, mejorando la predictibilidad en un rango más amplio de temperaturas y presiones.
11. Wilczek-Vera & Vera[12]: "*Understanding cubic equations of state*" exploran las razones detrás del éxito prolongado de las ecuaciones cúbicas, analizando cómo variaciones minúsculas en la forma funcional pueden significar mejoras significativas en la capacidad predictiva de las propiedades de los fluidos en diversas condiciones.
12. Kontogeorgis, Privat & Jaubert[13]: "*Taking another look at the van der Waals equation of state*" revisita la ecuación original casi 150 años después, discutiendo su relevancia y aplicaciones en la ciencia y tecnología modernas, y cómo continúa influyendo en el desarrollo de nuevas teorías y aplicaciones.
13. Li [14] "*Cubic equation of state*" en "*Multiphase Equilibria of Complex Reservoir Fluids*" proporcionan un análisis exhaustivo de cómo las ecuaciones cúbicas se aplican

en el modelado de equilibrios de fases de fluidos de yacimientos complejos, un área crítica para la explotación eficiente de recursos naturales.

Aplicación en la Dinámica de Fluidos

Las ecuaciones cúbicas de estado facilitan una descripción más precisa de los fluidos bajo diversas condiciones de presión y temperatura, siendo esenciales para el diseño de maquinaria y procesos industriales. La integración de estas ecuaciones en software de simulación ha mejorado notablemente la capacidad de predecir y manipular el comportamiento fluido en ingeniería y diseño industrial. Las ecuaciones de estado[15] y principalmente las ecuaciones cúbicas contribuyen a correlacionar y/o predecir propiedades termodinámicas y de transporte como son:

1. *Densidad.* El cálculo de la densidad de fluidos mediante ecuaciones cúbicas de estado es fundamental en la dinámica de fluidos. Estas ecuaciones son especialmente valoradas por su capacidad para estimar propiedades de los fluidos en condiciones donde los modelos ideales son insuficientes. Michelsen & Mollerup[16] han contribuido significativamente a profundizar en las teorías y aplicaciones de estas ecuaciones, ofreciendo herramientas avanzadas y métodos computacionales para calcular propiedades termodinámicas como la densidad. Sus publicaciones son un recurso esencial para académicos y profesionales interesados en entender y aplicar estas ecuaciones en el campo de la dinámica de fluidos. Adicionalmente, el concepto de traslado de volumen, una técnica crucial en termodinámica, complementa el uso de ecuaciones cúbicas para calcular densidades precisas en sis-

temas de fluidos. J. M. Prausnitz[17] y sus colaboradores han sido pioneros en integrar este concepto en el modelado de fluidos, estableciendo un marco para comprender cómo las interacciones moleculares influyen en el volumen y desarrollando métodos para ajustar las ecuaciones de estado que mejoran la estimación de la densidad en mezclas complejas.

2. *Presión de saturación.* La presión de saturación es un parámetro esencial en la caracterización de fluidos, tanto en dinámica de fluidos como en termodinámica. Es particularmente crítica en el diseño y operación de equipos que procesan fluidos en sus puntos de condensación o vaporización. Las ecuaciones cúbicas de estado son herramientas indispensables para predecir la presión de saturación, permitiendo el cálculo de equilibrios de fases en un amplio rango de temperaturas y presiones. Estas ecuaciones se han perfeccionado continuamente para ofrecer estimaciones precisas en variados entornos industriales. Storvick & Sandler[18] examinan cómo las ecuaciones de estado son utilizadas para calcular la presión de saturación, resaltando su relevancia práctica.

3. *Energía y las capacidades caloríficas.* Las ecuaciones cúbicas de estado son fundamentales para predecir y entender los cambios en la energía interna y la entalpía en función de la temperatura y la presión, aspectos vitales en la dinámica de fluidos. Recientes investigaciones han introducido modificaciones a estas ecuaciones para mejorar la precisión en la estimación de la energía interna y las capacidades caloríficas, especialmente bajo condiciones extremas de presión y temperatura. Estos avances son esenciales para la industria petroquímica y

energética, donde se gestionan fluidos en condiciones severas. Tester & Modell[19] han mostrado cómo las ecuaciones cúbicas de estado se aplican para calcular las capacidades caloríficas y otras propiedades energéticas críticas en la ingeniería.

4. Compresibilidad y la velocidad del sonido. El análisis de la compresibilidad y la velocidad del sonido en fluidos mediante ecuaciones cúbicas de estado es crucial en la dinámica de fluidos. Estas ecuaciones facilitan la predicción de cambios en las propiedades acústicas y mecánicas de los fluidos en función de las variaciones de presión y temperatura. Esta información es esencial para el diseño y la operación de sistemas que gestionan la transferencia de fluidos a alta velocidad o bajo condiciones extremas. Sirignano[20] proporciona una contribución significativa a este campo con un estudio detallado del flujo compresible bajo condiciones poco comunes, estableciendo una base para futuras investigaciones que buscan desarrollar nuevas ecuaciones de estado mejor adaptadas a las no linealidades de condiciones extremas.

5. Coeficiente de expansión volumétrica. El coeficiente de expansión volumétrica es una propiedad clave que describe cómo el volumen de un fluido varía con la temperatura a presión constante. Es fundamental en diversas áreas, desde la ingeniería de procesos hasta la meteorología y la oceanografía, influenciando el diseño y la operación de sistemas que manejan fluidos térmicamente activos. Las ecuaciones cúbicas de estado ofrecen un marco esencial para calcular esta propiedad, gracias a su capacidad para modelar la variación del volumen en función de la temperatura y la presión. Span & Wagner[21] se centran en el dióxido

de carbono, pero su investigación destaca cómo las modificaciones en las ecuaciones de estado pueden mejorar notablemente la precisión en la predicción de la expansión volumétrica bajo un amplio rango de temperaturas y presiones.

6. Velocidad del sonido y el número de Mach. La velocidad del sonido y el número de Mach son parámetros cruciales en la dinámica de fluidos, la ingeniería aeroespacial y otras áreas de la ingeniería y la física. Las ecuaciones cúbicas de estado desempeñan un papel esencial en la estimación de la velocidad del sonido en fluidos, ya que proporcionan un marco para comprender cómo factores como la compresibilidad y la temperatura afectan su propagación sonora. Klein & Nellis[22] ofrecen una discusión detallada sobre cómo estas ecuaciones se aplican para calcular la velocidad del sonido en gases y vapores, subrayando la importancia de la precisión en estas mediciones para aplicaciones de ingeniería.

7. Viscosidad. Utilizar ecuaciones cúbicas de estado para predecir la viscosidad en mezclas no ideales permite ajustar los parámetros que describen las interacciones entre distintas moléculas. Ajustando el parámetro de atracción entre tipos de moléculas en la ecuación de estado, se puede estimar su impacto en la viscosidad del sistema. El trabajo de Ji & Lempe[23] tiene como objetivo desarrollar un método más preciso y fiable para predecir la viscosidad de mezclas líquidas. Aplicando la teoría de Eyring, que modela el flujo viscoso como un proceso de activación en el que las moléculas superan una barrera de energía potencial, los autores integran este modelo con ecuaciones cúbicas de estado para mejorar la congruencia con los datos experimentales.

8. *Tensión superficial y los efectos capilares*. El estudio de la tensión superficial y los efectos capilares mediante ecuaciones cúbicas de estado representa un campo fascinante de la termodinámica que explora la interacción de los fluidos con sus propias fases y con superficies sólidas. Esta interacción influye en una amplia gama de fenómenos, desde procesos biológicos hasta aplicaciones industriales. Las ecuaciones cúbicas de estado describen interacciones moleculares y fases de equilibrio, y se pueden extender para calcular la tensión superficial, particularmente en el contexto de la coexistencia de fases líquido-vapor. Rowlinson & Widom[24] proporcionan un marco complementario a estas ecuaciones con su enfoque en la teoría molecular de la capilaridad, ofreciendo una comprensión profunda de cómo las propiedades moleculares afectan la tensión superficial y su aplicación en modelos termodinámicos.

Conclusiones

Las ecuaciones cúbicas de estado son esenciales para comprender y predecir el comportamiento de los fluidos bajo variadas condiciones de presión y temperatura. Han sido cruciales en el progreso de la termodinámica aplicada y la ingeniería de procesos, permitiendo a diseñadores y operadores optimizar rendimiento y eficiencia. Desde la ecuación original de Van der Waals, las ecuaciones cúbicas de estado han evolucionado para afrontar desafíos en dinámica de fluidos, con innovaciones que mejoran la predicción de propiedades críticas y el entendimiento de fenómenos en mezclas complejas. Estas ecuaciones han extendido su aplicación más allá de la predicción de presiones y volúmenes, convirtiéndose en herramientas indispensables en el diseño de maquinaria y procesos industriales.

Abordan aspectos como viscosidad, tensión superficial y efectos capilares, demostrando su versatilidad y capacidad de adaptación. Aunque han demostrado ser extremadamente útiles, las ecuaciones cúbicas de estado enfrentan desafíos en su aplicación a sistemas biológicos y materiales avanzados bajo condiciones extremas. La investigación futura debe enfocarse en mejorar la precisión de estas ecuaciones para tales aplicaciones, integrando nuevas teorías y datos experimentales para refinar y validar los modelos existentes.

Este estudio reafirma que las ecuaciones cúbicas de estado siguen siendo fundamentales en la termodinámica y la ingeniería de fluidos, esenciales para el avance de la ciencia y la tecnología modernas. Su desarrollo continuo y aplicación estratégica son vitales para superar los desafíos futuros en el diseño y optimización de procesos en diversas industrias.

Referencias

1. Batchelor, G.K., An introduction to fluid dynamics. 1967: Cambridge university press.
2. Van der Waals, J.D., Continuity of the gaseous and liquid state of matter. 1873, University of Leiden.
3. Redlich, O. and J.N.S. Kwong, On the thermodynamics of solutions. V. An equation of state. Fugacities of gaseous solutions. Chemical Reviews, 1949. 44(1): p. 233-244. <https://doi.org/10.1021/cr60137a013>.
4. Soave, G., Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state. Chemical Engineering Science, 1972. 27(6): p. 1197-1203. [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(72\)80096-4](https://doi.org/10.1016/0009-2509(72)80096-4).
5. Peng, D.-Y. and D.B. Robinson, A new two-constant equation of state. Industrial Engineering Chemistry Fundamentals, 1976. 15(1): p. 59-64.
6. Martin, J.J., Cubic equations of state-which? Industrial Engineering Chemistry Fundamentals, 1979. 18(2): p. 81-97. <https://doi.org/10.1021/i160070a001>.
7. Abbott, M.M., Cubic equations of state: an interpretive review. 1979. 10.1021/ba-1979-0182.ch003.
8. Wei, Y.S. and R.J. Sadus, Equations of state for the calculation of fluid-phase equilibria. AIChE journal, 2000. 46(1): p. 169-196. <https://doi.org/10.1002/aic.690460119>.

9. Anderko, A., 4 Cubic and generalized van der waals equations, in *Experimental thermodynamics*. 2000, Elsevier. p. 75-126.
10. Valderrama, J.O., The state of the cubic equations of state. *Industrial Engineering Chemistry Research*, 2003. 42(8): p. 1603-1618. <https://doi.org/10.1021/ie020447b>.
11. Economou, I.G., Cubic and generalized van der Waals equations of state. 2010. <https://doi.org/10.1039/9781849730983-00053>.
12. Wilczek-Vera, G. and J.H.J.A.J. Vera, Understanding cubic equations of state: A search for the hidden clues of their success. 2015. 61(9): p. 2824-2831. <https://doi.org/10.1002/aic.14741>.
13. Kontogeorgis, G.M., R. Privat, and J.-N.I. Jaubert, Taking another look at the van der waals equation of state—almost 150 years later. *Journal of Chemical Engineering Data*, 2019. 64(11): p. 4619-4637. <https://doi.org/10.1021/acs.jced.9b00264>.
14. Li, H., Cubic equation of state. *Multiphase Equilibria of Complex Reservoir Fluids: An Equation of State Modeling Approach*, 2022: p. 25-82. https://doi.org/10.1007/978-3-030-87440-7_2.
15. Kontogeorgis, G.M., et al., Equations of state in three centuries. Are we closer to arriving to a single model for all applications? *Chemical Engineering Science: X*, 2020. 7: p. 100060. <https://doi.org/10.1016/j.cesx.2020.100060>.
16. Michelsen, M.L. and J.M. Mollerup, *Thermodynamic Models: Fundamental and Computational Aspects*. 2 ed. 2007, Denmark: Tie-Line Publications.
17. Prausnitz, J.M., R.N. Lichtenthaler, and E. Gomes de Azevedo, *Molecular thermodynamics of fluid-phase equilibria*. 1999.
18. Storvick, T.S. and S.I. Sandler, *Phase Equilibria and Fluid Properties in the Chemical Industry: Estimation and Correlation*. 1977: ACS Publications.
19. Tester, J.W. and M. Modell, *Thermodynamics and its Applications*. 1997.
20. Sirignano, W.A., Compressible flow at high pressure with linear equation of state. *Journal of Fluid Mechanics*, 2018. 843: p. 244-292. <https://doi.org/10.1017/jfm.2018.166>.
21. Span, R. and W. Wagner, A new equation of state for carbon dioxide covering the fluid region from the triple-point temperature to 1100 K at pressures up to 800 MPa. *Journal of physical chemical reference data*, 1996. 25(6): p. 1509-1596. <https://doi.org/10.1063/1.555991>.
22. Klein, S. and G. Nellis, *Thermodynamics*. 2011: Cambridge University Press.
23. Weirong, J.I. and D.A. Lempe, Calculation of viscosities of liquid mixtures using Eyring's theory in combination with cubic equations of state. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 2006. 14(6): p. 770-779. [https://doi.org/10.1016/S1004-9541\(07\)60010-X](https://doi.org/10.1016/S1004-9541(07)60010-X).
24. Rowlinson, J.S. and B. Widom, *Molecular theory of capillarity*. 2013: Courier Corporation.

Suspensiones concentradas de partículas sólidas no coloidales: respuesta reológica y su modelado computacional

Alan Rosales-Romero¹, Adolfo Vázquez-Quesada², Marco Ellero^{3,4,5}, J. Esteban López-Aguilar¹

1. Facultad de Química, Departamento de Ingeniería Química, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Ciudad Universitaria, Coyoacán, Ciudad de México, 04510, México

2. Departamento de Física Fundamental, UNED, Apartado 60141, Madrid, 28080, Spain.

3. Basque Center for Applied Mathematics (BCAM), Alameda de Mazarredo 14, Bilbao, 48009, Spain.

4. IKERBASQUE, Basque Foundation for Science, Calle de María Díaz de Haro 3, Bilbao, 48013, Spain.

5. Zienkiewicz Centre for Computational Engineering (ZCCE), Swansea University, Bay Campus, Swansea, SA1 8EN, United Kingdom.

jelopezaguilar@quimica.unam.mx

Palabras clave:

Reología, fluido no-Newtoniano, suspensiones concentradas no coloidales, engrosamiento al corte discontinuo, flujo bandeado.

Resumen

En esta revisión se describe y se muestra la compleja reología que exhiben las suspensiones concentradas de partículas sólidas no coloidales. Su presencia en la industria y en la vida cotidiana hace que sea relevante describir y explicar el origen de su comportamiento reológico. Para conocer qué son, cómo se comportan, cómo se diferencian de los fluidos Newtonianos y qué estrategias se usan para reproducir su flujo, esta revisión se divide de la siguiente manera: en la sección I se describe la composición y los tipos de suspensiones en función de la fracción de sólidos; en la sección II se describe la reología, que se encarga de caracterizar

y describir las propiedades materiales de los fluidos, en este caso, las suspensiones concentradas; en la sección III se exhibe el comportamiento de las suspensiones concentradas, como son: el adelgazamiento al corte, el engrosamiento al corte continuo y discontinuo, y el flujo bandeado en la dirección de la vorticidad; en la sección IV se describen cómo se modelan y cuáles son los mecanismos propuestos que buscan reproducir la reología de las suspensiones concentradas, y en la sección V se muestra el trabajo por hacer en otros tipos de suspensiones.

¿Qué son las suspensiones?

Las suspensiones son sistemas compuestos por partículas suspendidas en un líquido (también llamado matriz de suspensión) [1]. Cuando las partículas son lo suficientemente grandes, con un radio mayor a un

micrómetro, se denominan suspensiones no coloidales o no-Brownianas. En tal caso, las fluctuaciones térmicas que afectan el movimiento de las partículas son despreciables; en cambio, si son menores a un micrómetro, las fluctuaciones térmicas en estas sí que son relevantes, y se les conoce como suspensiones coloidales o Brownianas [2]. Las suspensiones se pueden encontrar en productos cotidianos como cosméticos, alimentos y materiales de ingeniería [3], lodos, magma, sangre, cementos y pinturas [4], o en tintas [5]. Su uso se extiende al desarrollo de materiales de protección balística y equipo de protección flexible [6], y partes mecánicas, como amortiguadores “inteligentes”, que cambian su rigidez y capacidad de amortiguar en función de la carga aplicada [7].

A estos materiales también se les califica como fluidos complejos, ya que sus propiedades difieren notoriamente de las propiedades individuales del sólido suspendido o del líquido de la suspensión [4]. Además, su naturaleza mecánica y deformación muestran una variedad rica de comportamientos, ya que pueden presentar cambios en la viscosidad aparente dependientes de la rapidez de deformación aplicada (*shear rate*), como lo son el adelgazamiento y/o engrosamiento al corte (*shear thinning y shear thickening*), la plasticidad (esfuerzo de cedencia o *yield stress*) [8], viscoelasticidad (primera y segunda diferencias de esfuerzos normales en funcionalidades altamente no-lineales con la rapidez de deformación) [9] o flujo bandeado en la dirección de la vorticidad (*vorticity banding*) [10, 11]. Estas manifestaciones físicas contrastan con el fluido más simple, el fluido Newtoniano, cuyo ejemplo por antonomasia es el agua. La ciencia que se encarga de estudiar di-

chos fenómenos de flujo no lineal se llama reología.

Reología

El área de la física que se encarga de estudiar la deformación y el flujo de la materia es la reología. Los materiales de interés en esta parte de la física son aquellos que se alejan del comportamiento ideal descrito por la ley de Newton de la viscosidad para fluidos y por la ley de Hooke de la elasticidad para sólidos [12]. Estos materiales corresponden con los fluidos que tienen un comportamiento no-Newtoniano y con los sólidos que tienen un comportamiento no-Hookeano.

La forma de identificar si un fluido tiene un comportamiento no-Newtoniano es a través de las mediciones de sus propiedades materiales. La propiedad material por excelencia es la viscosidad de corte o, simplemente, viscosidad aparente, la cual proporciona una estimación de la resistencia a fluir que presentan los materiales [13]. Una de las manifestaciones no-Newtonianas esenciales es la dependencia de la viscosidad aparente (resistencia a fluir) con respecto a la rapidez de deformación aplicada. De forma esencial, al aumentar la rapidez de corte (o rapidez de deformación cortante), la viscosidad aparente puede aumentar, o bien, disminuir, siendo denominadas estas respuestas reológicas como engrosamiento y adelgazamiento al corte, respectivamente. El comportamiento de la viscosidad aparente está dado por la estructura molecular del material. Por ejemplo, gases y moléculas con bajo peso molecular tienden a comportarse como fluidos Newtonianos, mientras materiales como las suspensiones, polímeros fundidos (o en solución), emulsiones o fluidos biológicos tienden a presentar un

comportamiento no Newtoniano, debido a las múltiples interacciones que pueden ocurrir entre sus componentes [13]. Otra manifestación no-Newtoniana típica es la plasticidad, que se mide de manera fundamental a través del esfuerzo de cedencia. Esta propiedad provoca que un fluido no se deforme (no fluya) si no se aplica un esfuerzo que supere un esfuerzo umbral o de cedencia [13]. Como referencia en este contexto, un material Newtoniano (como el agua o la glicerina) mantiene una viscosidad constante y su esfuerzo de cedencia es nulo. Cuando el fluido presenta una mezcla del comportamiento de un fluido viscoso y un sólido elástico, se denomina como viscoelástico [13]. Además de la viscosidad aparente, la respuesta reológica de los fluidos viscoelásticos se mide a través de las propiedades materiales llamadas primera y segunda diferencias de esfuerzos normales, las cuales pueden ser diferentes a cero y dan pie a efectos como la capacidad de formar hilos, el efecto Weissenberg, en donde un fluido puede trepar una varilla que rota en el seno de un recipiente, o al “hinchamiento” del fluido a la salida de un tubo, entre muchos otros [14]. Estos comportamientos diferentes a los típicos desplegados por fluidos Newtonianos se asocian a la microestructura que compone al material [15]. Un ejemplo es el caso de las soluciones poliméricas, en las cuales, la deformación promueve que las cadenas del polímero se alinean y se estiren, a la par, estas buscan regresar a su estado original (sin estirar ni alinear), lo cual genera un esfuerzo extra. En el caso de las suspensiones, la microestructura se conforma por el arreglo e interacción de las partículas suspendidas en la matriz.

Para el estudio de las propiedades materiales antes mencionadas, se realizan pruebas

reométricas [12–14], es decir, pruebas en las cuales el flujo está controlado bajo condiciones de flujo homogéneo, es decir, flujos con rapidez de deformación constante, y en las cuales se pueden identificar tres direcciones espaciales en la prueba: la dirección 1 se asigna a la dirección del flujo (o movimiento del fluido), la dirección 2 se asigna a la dirección en la cual se presenta el gradiente de velocidades que promueve el flujo, y la dirección 3 se asigna a la dirección neutral. El flujo reométrico más simple es el flujo cortante simple, en donde las dos placas paralelas que contienen al material mantienen una velocidad, diferente para cada placa y en la dirección en la que son paralelas (cortante). En este flujo cortante simple, la rapidez de deformación (que se identifica como la rapidez de corte) se define como $\dot{\gamma} = \Delta v_1 / \Delta x_2$, en donde Δv_1 es la diferencia de velocidades entre las placas y Δx_2 su separación. La viscosidad cortante o aparente se calcula como $\eta = \tau_{12} / \dot{\gamma}$, donde τ_{12} es el esfuerzo cortante con el que responde el fluido ante la deformación cortante aplicada, aquí los índices del esfuerzo indican la dirección del flujo (dirección 1) y la dirección en la cual se transfiere la cantidad de movimiento o momentum (dirección 2), las direcciones son perpendiculares. El término de viscosidad “aparente” se refiere a la viscosidad medida por el equipo de medición, llamado reómetro, dadas las lecturas registradas de la rapidez de corte y el esfuerzo cortante. Además, si el fluido es viscoelástico, desarrollará esfuerzos normales, que se miden a través de la primera y la segunda diferencias de esfuerzos normales, definidas como $N_1 = \tau_{11} - \tau_{22}$ y $N_2 = \tau_{22} - \tau_{33}$, respectivamente. Aquí, τ_{11} , τ_{22} y τ_{33} representan los esfuerzos normales en las direcciones correspondientes. En los esfuerzos normales la dirección del flujo y la dirección de la

transferencia de *momentum* es la misma. A diferencia de los fluidos Newtonianos, en los que ambas diferencias de esfuerzos normales son nulas (es decir, $N_1=N_2=0$), en fluidos complejos, tales como las suspensiones concentradas, los componentes del tensor de esfuerzo diferentes de cero en un flujo cortante simple pueden ser: τ_{12} , τ_{11} , τ_{22} y τ_{33} , lo que conlleva a que ambas diferencias de esfuerzos normales puedan ser no nulas.

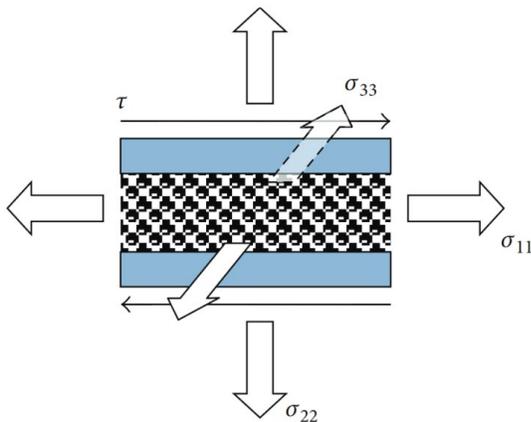


Figura 1. Esfuerzos normales, σ_{ij} , y esfuerzo cortante, τ , al aplicar un flujo cortante simple [16]. Open Access from: D. Verrelli and A.R. Kilcullen, Normal Stress differences and yield stresses in attractive particle networks, *Advances in Condensed Matter Physics*, 2016, 1716598, 21 pages, 2016. <https://doi.org/10.1155/2016/1716598> by Creative Commons CC BY 4.0 license.

¿Cómo se comportan las suspensiones?

El estudio y descripción de la reología de las suspensiones es de interés por la complejidad, la aplicabilidad y el comportamiento de estas. En el caso de *suspensiones diluidas*, es decir, cuando la fracción de volumen sea $\Phi \leq 0.1$ (donde Φ se define como la relación del volumen de las partículas sólidas entre el volumen total de la suspensión), el efecto de la presencia de las partículas se observa en un incremento de la viscosidad aparente de la suspensión en función de Φ . Los trabajos de Einstein [17] y Batchelor [18] explicaron de forma satisfactoria el cambio en la viscosidad para suspensiones diluidas.

Einstein [17] consideró la perturbación en el flujo, es decir, el aumento de la viscosidad aparente, como consecuencia de la presencia de las partículas, y Batchelor [18] introdujo las interacciones hidrodinámicas de largo alcance entre ellas. Por otro lado, las *suspensiones concentradas*, con $\Phi \geq 0.4$, no solo exhiben un incremento de la viscosidad aparente en función de Φ , sino que también muestran respuestas reológicas más complejas. La fenomenología típica observada para la viscosidad es un adelgazamiento al corte a bajas rapidezces de corte, seguido de un engrosamiento al corte para rapidezces de corte intermedias, el cual puede ser continuo o discontinuo y, por último, un segundo adelgazamiento al corte [3], como se ilustra en la Fig.2. El engrosamiento al corte continuo (CST, del inglés *Continuous Shear-Thickening*) se aprecia como un incremento moderado de la viscosidad aparente en un rango relativamente amplio de rapidezces de corte; mientras que el engrosamiento al corte discontinuo (DST, del inglés *Discontinuous Shear-Thickening*) muestra un dramático

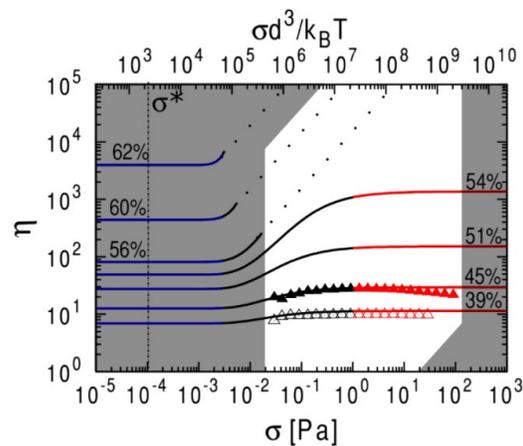


Figura 2. Curva de flujo. Viscosidad relativa contra esfuerzo cortante con unidades de Pa para esferas con diámetro de 45 μm a diferentes fracciones de volumen, Φ , [19]. Reprinted figure with permission from B. Guy, M. Hermes, W. Poon, *Phys. Rev. Lett.*, 115, 2015, 088304, <http://dx.doi.org/10.1122/1.4953814>. Copyright (2024) by the American Physical Society.

incremento de la viscosidad aparente, de hasta más de tres órdenes de magnitud [11], en un relativamente reducido rango de rapidez de corte.

En ocasiones, durante el DST, el fluido se puede fracturar o romper como lo haría un sólido [20], pero una vez que la deformación cesa, este vuelve a fluir como un líquido, como se muestra en la Fig.3. Respecto a las diferencias de esfuerzos normales, una marca distintiva de las suspensiones concentradas no-Brownianas es que tanto N_1 como N_2 son negativas y de magnitud similar [2, 21]. Otros materiales, como las soluciones poliméricas o polímeros fundidos, exhiben N_1 positivo y N_2 es muy pequeño (alrededor del 10 %) y de signo contrario con respecto a N_1 [13].

Asimismo, durante el DST, se ha reportado cierta inestabilidad en la dirección de la vorticidad llamada flujo bandeado en la dirección de la vorticidad (o *vorticity banding*, del inglés) [10, 11]. Esta inestabilidad exhibe la coexistencia de regiones en el seno de la suspensión en las que se ejerce la misma rapidez de corte, pero el esfuerzo que actúa sobre ellas es diferente. De forma visual se observa un cambio en la difracción de la luz que permite distinguir dos fases en el flujo en forma de bandas o donas (observadas en celdas de Couette), como se observa en la Fig.4. El flujo bandeado en la dirección de la vorticidad también se manifiesta como fluctuaciones transitorias en las mediciones de la viscosidad aparente que se intensifican conforme se incrementa, como se aprecia en la Fig.5.

Una suspensión concentrada comúnmente se consigue al preparar una mezcla de igual proporción del sólido y el líquido [22]; esto



Figura 3. Suspensión de almidón de maíz en agua donde: (arriba) al ser deformada tiene un comportamiento tipo sólido, y (abajo) al cesar la deformación tiene un comportamiento tipo líquido. Open Access from Massachusetts Institute of Technology (MIT) (October 5, 2019) The science of cornstarch and water [video captures] Youtube. <https://youtu.be/mYTerCbDUzE?si=43E0Als7IzjooxCW> by Creative Commons CC BY license.

conlleva a que: (i) la separación promedio entre las partículas es igual o menor que el tamaño de las partículas, y (ii) las interacciones y fuerzas que actúan entre cada par de partículas contribuyen de forma significativa en la respuesta macroscópica de la suspensión [4]. En estos sistemas, las interacciones relevantes son las fuerzas hidrodinámicas de corto alcance (fuerza de lubricación) y las fuerzas por contacto [1] y, si la suspensión

es coloidal, también se deben considerar las fuerzas Brownianas [6]. Todas estas fuerzas tienen un rol en la formación de la microestructura de la suspensión, lo que lleva a su comportamiento no-Newtoniano.

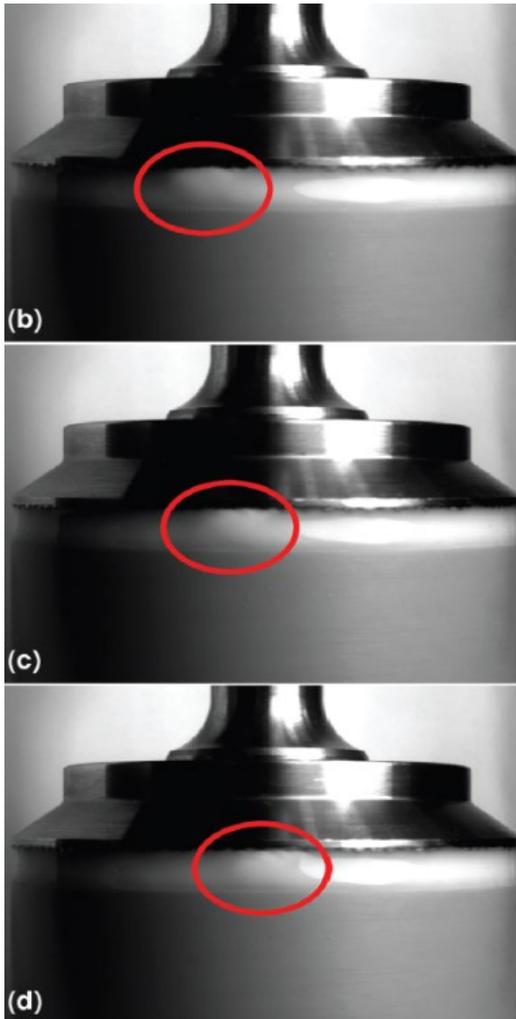


Figura 4. (b)-(d) Fotos de la geometría de cono y plato. El cono (situado en la parte superior de las imágenes) rota a la izquierda, mientras el plato (situado en la parte inferior de las imágenes) se mantiene estático. La deformación de la interfase entre el cono y plato (banda de vorticidad, señalado con una elipse roja) se desplaza a la derecha [11]. Open Access from: M. Hermes, B. Guy, W. Poon, G. Poy, M. Cates, M. Wyart, Unsteady flow and particle migration in dense, non-Brownian suspensions, *J. Rheol.* 60 (2016) 905, <https://doi.org/10.1122/1.4953814> by Creative Commons CC BY license.

Incluso las suspensiones más simples, compuestas por esferas sólidas suspendidas en un líquido Newtoniano, muestran un

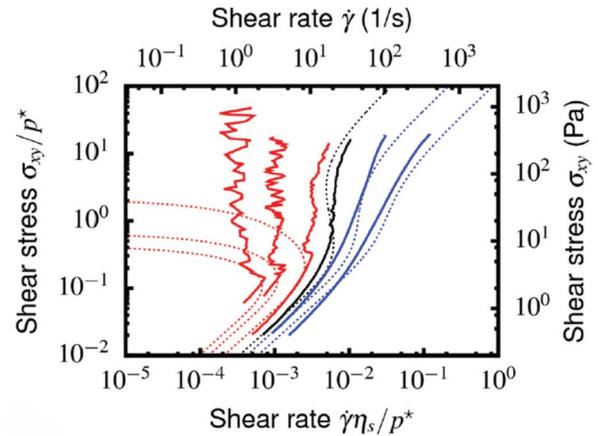


Figura 5. Curva de flujo. Esfuerzo contra rapidez de corte para una suspensión de almidón de maíz en agua para $\Phi=\{0.45,0.46,0.465,0.47,0.50,0.52\}$ de derecha a izquierda [11]. Open Access from: M. Hermes, B. Guy, W. Poon, G. Poy, M. Cates, M. Wyart, Unsteady flow and particle migration in dense, non-Brownian suspensions, *J. Rheol.* 60 (2016) 905, <https://doi.org/10.1122/1.4953814> by Creative Commons CC BY license.

comportamiento no-Newtoniano [23]. Por ejemplo, una solución empleada es la compuesta por almidón de maíz (partículas en suspensión) y agua (matriz de suspensión) con $\Phi > 0.3$ [1, 23] (en casa se puede preparar una mezcla con una parte de almidón de maíz por dos partes de agua). Cuando esta suspensión es deformada, como puede ser apretarla con la mano, se endurece (por efecto del DST) y puede manipularse como si fuera un sólido por un corto periodo de tiempo; una vez que se suelta, esta fluye y escurre entre las manos, es decir, la viscosidad aparente de la suspensión es función de la fuerza aplicada y presenta tanto adelgazamiento al corte como engrosamiento al corte; un ejemplo de este comportamiento se observa en la Fig.3.

¿Cómo se modela la respuesta reológica de las suspensiones concentradas no-Brownianas?

Los trabajos en este rubro se enfocan en la caracterización experimental y el modelado del comportamiento reológico de las sus-

pensiones. Hasta ahora, no hay una teoría con base en el medio continuo que explique lo observado de forma experimental [22], es decir, un análogo de lo que las ecuaciones de Navier-Stokes representan para la dinámica de fluidos simples. De modo que se requiere describir la física que ocurre en la meso-escala (interacciones partícula-partícula y partícula-matriz) [24, 25]. Para este fin, se utilizan herramientas computacionales predictivas que imiten al sistema real. Un marco de estudio se basa en la simulación de sistemas que contienen a las partículas suspendidas en una matriz y, a través de las fuerzas que actúan sobre ellas, en el estudio de la evolución del sistema imponiendo un flujo cortante simple, *i.e.*, calcular la posición y velocidad de cada partícula a diferentes pasos en el tiempo. Un esquema de lo anterior se muestra en la Fig.6.

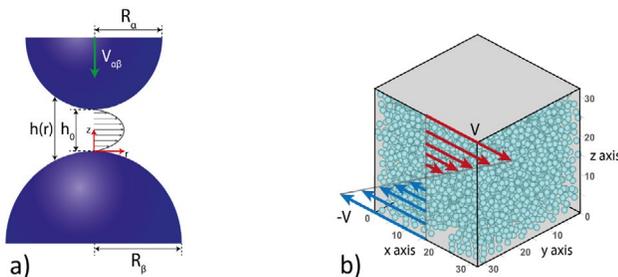


Figura 6. (a) Esquema de la interacción entre dos partículas en suspensión. La partícula de radio R_a se aproxima con velocidad constante, $V_{\alpha\beta}$, a la partícula de radio R_b [26]. (b) Dominio computacional para una suspensión compuesta de 3755 partículas a la cual se le impone un flujo cortante simple, donde la placa superior se mueve a velocidad V y la inferior a velocidad $-V$ [26]. Reprinted from Effects of confinement-induced non-Newtonian lubrication forces on the rheology of a dense suspension, 329, A. Rosales-Romero, A. Vázquez-Quesada, S. Prasanna-Kumar, J. López-Aguilar, M. Ellero, J. Non-Newtonian Fluid Mech., 105248, <https://doi.org/10.1016/j.jnnfm.2024.105248>. Copyright (2024), with permission from Elsevier.

Para describir la fenomenología reológica de suspensiones concentradas no-Brownianas se han propuesto diferentes mecanismos que buscan reproducir su viscosidad aparente y las diferencias de esfuerzos normales, entre los cuales se encuentran las siguientes:

I. Generación de turbulencia entre las partículas [27].

II. Transición entre estructuras ordenadas-desordenadas [28, 29], que fue propuesta al observar cambios en los patrones de difracción cuando ocurría el DST. Este mecanismo plantea una transición en la microestructura en la que, a bajas rapidez de corte, las partículas se encuentran en cierto arreglo que, a rapidez de corte más altas, se pierde, y causa un aumento de la viscosidad.

III. Formación de *hydroclusters* debido a las fuerzas hidrodinámicas [6, 30], que propone que hay un proceso en el cual las partículas forman aglomerados más grandes que ofrecen una mayor resistencia a moverse en la matriz de suspensión en comparación con las partículas individuales.

IV. Transición de fuerzas de lubricación a fuerzas de fricción o contacto [31–33], que propone que el DST es resultado de los múltiples contactos que existen entre las superficies sólidas de las partículas promovidos por una rapidez de corte alta.

V. Efecto de la matriz de suspensión en las interacciones entre pares de partículas [34], en el cual las interacciones entre partículas dependen de la naturaleza del solvente, como pueden ser las interacciones de Van der Waals.

VI. Efecto restrictivo de las partículas a su movimiento [35, 36] cuando la fracción de volumen alcanza un umbral crítico, de modo que las partículas se atascan e impiden el flujo.

Estos mecanismos consideran que, en primera instancia, las fuerzas de lubricación dominan en el régimen diluido y su efecto se reduce a medida que la concentración de sólidos aumenta y, asimismo, la fuerza por contacto domina sobre el sistema. En

particular, cuando la fracción de volumen alcanza el arreglo de empaquetamiento máximo de las partículas, la suspensión deja de fluir [2]. Estudios recientes son capaces de reproducir el DST a través de fuerzas de contacto, la cual está modulada por el coeficiente de fricción [37-40]; sin embargo, este coeficiente de fricción es difícil de medir experimentalmente. Los primeros trabajos se realizaron con simulaciones que consideran un coeficiente de fricción constante [37, 38], aunque en trabajos posteriores se realizaron con coeficientes de fricción variable [39, 40]. No obstante, a pesar de que las fuerzas de fricción son capaces de impulsar el DST, su naturaleza predice esfuerzos normales positivos debido a los efectos de dilatación [35, 41], lo que lleva a que N_1 y N_2 no concuerden con los datos experimentales reportados, pues se sabe que tanto la primera y la segunda diferencias de esfuerzos normales experimentales son negativas [2, 21].

Por otro lado, se conoce que las fuerzas hidrodinámicas o de lubricación convencional no logran ejercer una fuerza suficiente entre las partículas para promover el DST [39, 42]; solo llegan a predecir un ligero incremento en la viscosidad (que se puede interpretar como CST). No obstante, su naturaleza sí es capaz de predecir el signo negativo de N_1 y N_2 .

Investigaciones en *tribología*, la ciencia que se encarga de estudiar qué ocurre entre superficies en movimiento relativo muestran que la fricción y la lubricación provocan un efecto sobre la viscosidad en fluidos sometidos a confinamiento extremo (separaciones del orden de nanómetros entre dos superficies) [43–45]. Este efecto hace que una matriz, nominalmente Newtoniana, tenga un comportamiento no-Newtoniano

en la forma del aumento de la viscosidad bajo separaciones extremadamente pequeñas [44].

Debido a este fenómeno de confinamiento, nuestro grupo propuso recientemente un nuevo mecanismo para la predicción de la respuesta reológica de suspensiones concentradas no-Brownianas de partículas esféricas lisas y rígidas [26], en donde la matriz de suspensión manifiesta una viscosidad dependiente de la rapidez de deformación y de la separación entre partículas, $\eta(\dot{\gamma}, h)$, a través de la combinación de la ecuación constitutiva del fluido bi-viscoso [46] más el efecto de confinamiento descrito en el párrafo anterior. Este nuevo modelo bi-viscoso con funcionalización (FBV, del inglés *Functionalised Bi-Viscous model*) integra los efectos de lubricación (que capturan los esfuerzos normales negativos) y una viscosidad aparente de la matriz que aumenta con el nivel de confinamiento entre pares de partículas cercanas. Para una explicación más detallada del modelo FBV, se invita al lector a revisar el trabajo de Rosales-Romero et al. (2024) [26]. Con este modelo, se ha logrado que la fuerza de lubricación que actúa sobre las partículas aumente, de tal manera que sea suficiente para promover tanto el CST como el DST de forma cualitativa, como se muestra en la Fig.7. Además, como no se recurre a las fuerzas por contacto, se predice que tanto N_1 como N_2 son negativas, como se observa en la Fig.8.

En este marco y para explicar estas respuestas reológicas, en la Fig.9 se compara la fuerza de lubricación con efecto de confinamiento, F_{lub}^{FBV} , contra la fuerza de lubricación Newtoniana (sin efecto de confinamiento), F_{lub}^{New} , con el aumento de la rapidez de corte impuesta en un flujo cor-

tante simple, de modo que se obtiene una fuerza relativa dada por $F_{rel} = F_{lub}^{FBV} / F_{lub}^{New}$. El mecanismo alternativo propuesto para la predicción del engrosamiento al corte discontinuo que se ilustra en la Fig.9 se explica a continuación:

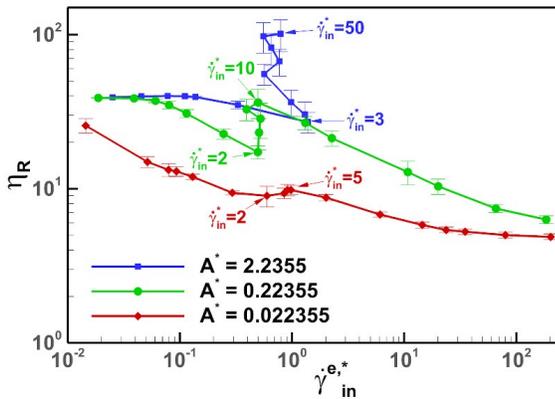


Figura 7. Curva de flujo. Viscosidad adimensional contra rapidez de corte adimensional. Predicciones de FBV: Con $\Phi=0.48$, incremento de la viscosidad por confinamiento adimensional, $\Delta\eta^*=10$, viscosidad aparente macroscópica, $\eta_{bulk}=1$, longitud adimensional en la cual se hace efectiva el confinamiento, $L^*=1$, y con la variación del parámetro adimensional para la rapidez de corte que controla el cambio entre la viscosidad aparente macroscópica y la viscosidad con efecto de confinamiento, $A^*=\{0.022355, 0.22355, 2.2355\}$ [26]. Reprinted from Effects of confinement-induced non-Newtonian lubrication forces on the rheology of a dense suspension, 329, A. Rosales-Romero, A. Vázquez-Quesada, S. Prasanna-Kumar, J. López-Aguilar, M. Ellero, J. Non-Newtonian Fluid Mech., 105248, <https://doi.org/10.1016/j.jnnfm.2024.105248>. Copyright (2024), with permission from Elsevier.

- a) El primer adelgazamiento al corte (a bajas rapidezces de corte) se origina de la transición de fuerzas relativas de entre $4 \leq F_{rel} \leq 10$ a $2 \leq F_{rel} \leq 4$; ver Fig.9a (derecha). Asimismo, el número de interacciones entre partículas, que se muestra como una densidad de pares interaccionando, aumenta levemente y la distancia entre partículas disminuye levemente; ver Fig.9a (izquierda).
- b) Con un aumento de la rapidez de corte impuesto sobre la suspensión, el engrosamiento al corte se desencadena cuando el número de interacciones aumenta de forma drástica, y, a la par, se mantiene una fuer-

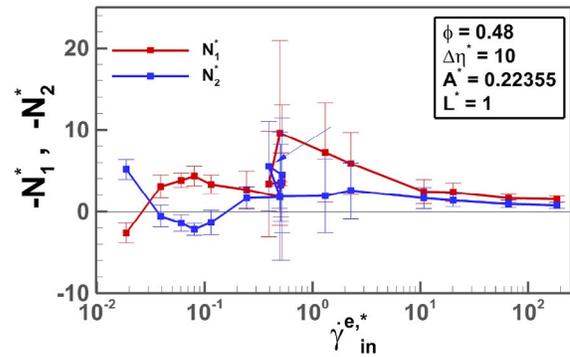
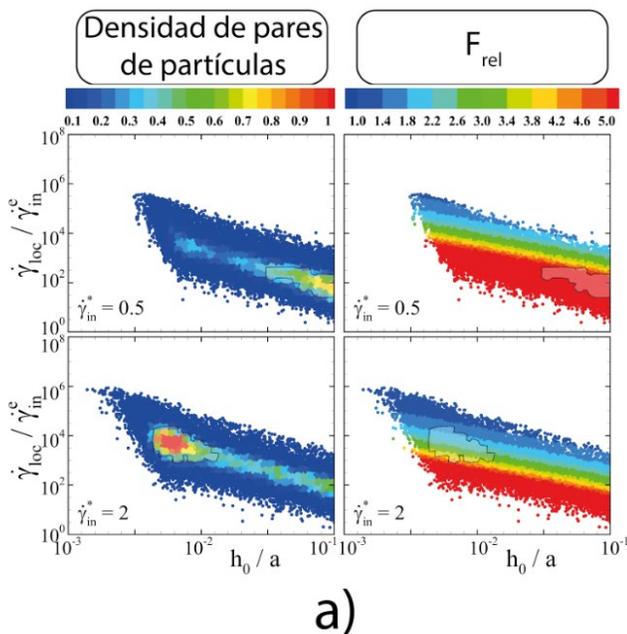


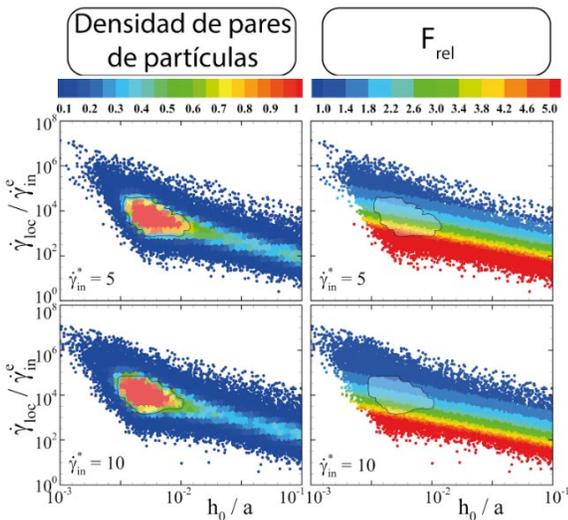
Figura 8. Primera y segunda diferencia de esfuerzos normales adimensionales contra rapidez de corte adimensional. Predicciones de FBV: Con $\Phi=0.48$, incremento de la viscosidad por confinamiento adimensional, $\Delta\eta^*=10$, viscosidad de bulo, $\eta_{bulk}=1$, longitud adimensional en la cual se hace efectiva el confinamiento, $L^*=1$, y con el parámetro adimensional para la rapidez de corte que controla el cambio entre la viscosidad de bulo y la viscosidad con efecto de confinamiento, $A^*=0.22355$ [26]. Reprinted from Effects of confinement-induced non-Newtonian lubrication forces on the rheology of a dense suspension, 329, A. Rosales-Romero, A. Vázquez-Quesada, S. Prasanna-Kumar, J. López-Aguilar, M. Ellero, J. Non-Newtonian Fluid Mech., 105248, <https://doi.org/10.1016/j.jnnfm.2024.105248>. Copyright (2024), with permission from Elsevier.

- za de lubricación aumentada en el rango $2 \leq F_{rel} \leq 4$; ver Fig.9b (derecha). Durante este régimen se mantiene una distancia menor entre las partículas; ver Fig.9b (izquierda). La diferencia que desencadenan los dos tipos de engrosamiento al corte es: cuando se presenta el CST, el número de interacciones disminuye al aumentar aún más la rapidez de corte; en cambio, cuando se presenta el DST, el número de interacciones se mantiene aproximadamente constante.
- c) El segundo adelgazamiento al corte (a altas rapidezces de corte) se manifiesta cuando $F_{rel} \approx 1$, ilustrado en la Fig.9c (derecha), y el número de interacciones entre partículas decrece considerablemente, correspondientemente en Fig.9c (izquierda). En casos extremos del DST, cuando el número de interacciones no se reduce, tampoco se logra obtener este segundo adelgazamiento al corte (ver curva azul de la Fig. 7).

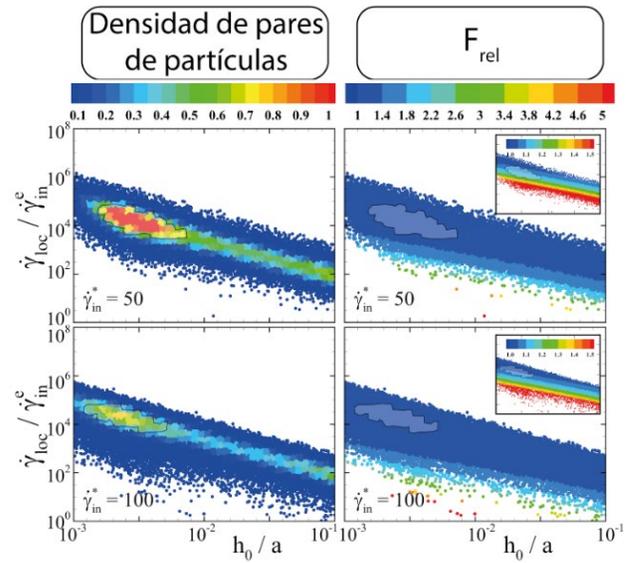
Estos resultados reportados recientemente por Rosales-Romero et al. (2024) [26] sobre la predicción computacional de la reología de suspensiones no-Brownianas de esferas rígidas y lisas representan uno de los últimos avances en la explicación, con base en un mecanismo alternativo tocando elementos esenciales de lubricación y tribología, de las diversas manifestaciones reológicas que acompañan el flujo de estos materiales.



a)



b)



c)

Figura 9. Densidad normalizada de interacciones entre pares de partículas (derecha) y fuerza relativa, F_{rel} (izquierda) usando el modelo FBV con: fracción de volumen, $\Phi=0.48$, incremento de la viscosidad por confinamiento adimensional, $\Delta\eta^*=10$, viscosidad de bulo, $\eta_{bulk}^*=1$, longitud adimensional en la cual se hace efectiva el confinamiento, $L^*=1$, y con la variación del parámetro adimensional para la rapidez de corte que controla el cambio entre la viscosidad de bulo y la viscosidad con efecto de confinamiento, $A^*=0.22355$ [26]. Reprinted from Effects of confinement-induced non-Newtonian lubrication forces on the rheology of a dense suspension, 329, A. Rosales-Romero, A. Vázquez-Quesada, S. Prasanna-Kumar, J. López-Aguilar, M. Ellero, J. Non-Newtonian Fluid Mech., 105248, <https://doi.org/10.1016/j.jnnfm.2024.105248>. Copyright (2024), with permission from Elsevier.

¿Qué queda por hacer?

Aunque el problema del flujo cortante simple de suspensiones no-Brownianas de esferas sólidas suspendidas en un fluido Newtoniano ha sido estudiado de forma extensa y muestra avances significativos en el entendimiento de la fenomenología y la física del problema, todavía no hay un consenso sobre un mecanismo último que explique la respuesta reológica de estos materiales. Además, existe una gran variedad de mezclas de partículas y fluidos no-Newtonianos que siguen sin ser explorados o han sido examinados escasamente. Por ejemplo: (i)

suspensiones con partículas no esféricas [47, 48] que pueden ser ovoides, bastones o amorfos, lisas o rugosas, rígidas o flexibles; (ii) sistemas con suspensiones polidispersas [49], es decir, con partículas con diferentes tamaños; (iii) suspensiones coloidales en las cuales se deben incluir fuerzas Brownianas que tiene un carácter estadístico/aleatorio [6]; (iv) describir teórica o computacionalmente los efectos de inestabilidad como el flujo bandeado en la dirección de la vorticalidad [10, 11]; (v) suspensiones con matrices viscoelásticas, como pueden ser fluidos de Boger (fluidos viscoelásticos con viscosidad de corte constante) [50, 51]; y (vi) efectos del alineamiento [52].

Agradecimientos

JEL-A agradece el soporte al Consejo Nacional de Humanidades, Ciencias y Tecnologías (CONAHCYT, México-proyecto número CF-2023-I-318-Reología computacional de fluidos complejos: determinación de propiedades reológicas extensionales de mucosa y generación de biomarcadores para la prevención y tratamiento de enfermedades respiratorias (COVID-19 y EPOC)), a la UNAM (proyectos número DGAPA-PAPIIT IN106424 y PAIP 5000-9172 Facultad de Química); y al Laboratorio Nacional de Cómputo de Alto Desempeño UNAM (grant number LANCAD-UNAM-DGTIC-388), por el tiempo computacional provisto en la supercomputadora *Miztli*. AR-R agradece al Consejo Nacional de Humanidades, Ciencias y Tecnologías (CONAHCYT, México) por la beca (CVU 778830) para financiar sus estudios de doctorado. ME agradece el apoyo financiero a través del programa BERC 2022–2025 y de la Agencia de Investigación del Estado Español a través de la Acreditación de Excelencia BCAM Severo Ochoa CEX2021-001142-S/MICIN/AEI /10.13039/501100011033.

ME y AV-Q agradecen el apoyo financiero a través del proyecto PID2020-117080RB-C55 ('Microscopic foundations of soft-matter experiments: computational nano- hydrodynamics') con acrónimo 'Compu-Nano-Hydro', y del proyecto PID2020-117080RB-C54 ('Coarse-Graining theory and experimental techniques for multiscale biological systems') patrocinados ambos por AEI – MICIN.

Referencias

- [1] A. Fall, A. Lemaitre, G. Ovarlez, Discontinuous shear thickening in cornstarch suspensions, EPJ Web of Conferences 140 (2017) 09001–4.
- [2] E. Guazzelli, O. Pouliquen, Rheology of dense granular suspensions, J. Fluid Mech. 852 (2018) 10.1017.
- [3] P. Bourriane, V. Niggel, G. Polly, T. Divoux, G. McKinley, Unifying disparate experimental views on shear-thickening suspensions, Soft Condens. Matter (2020).
- [4] J. Stickel, R. Powell, Fluid mechanics and rheology of dense suspensions, Annu. Rev. Fluid Mech. 37 (2005) 129–149.
- [5] J. Lewis, Direct-write assembly of ceramics from colloidal inks, Curr. Opin. Solid State Mater. Sci. 6 (2002) 245–250.
- [6] N. Wagner, J. Brady, Shear thickening in colloidal dispersions, Phys. Today 62 (2009) 27–32.
- [7] X. Zhang, W. Li, X. Gong, The rheology of shear thickening fluid (STF) and the dynamic performance of an STF-filled damper, Smart Mater. Struct. 17 (2008) 035027.
- [8] E. Brown, N. Forman, C. Orellana, H. Zhang, B. Maynor, D. Betts, J. DeSimone, H. Jaeger, Generality of shear thickening in dense suspensions, Nature Mater 9 (2010) 220–224.
- [9] R. Seto, G. Giusteri, Normal stress differences in dense suspensions, J. Fluid Mech. 857 (2018) 200–215.
- [10] B. Saint-Michel, T. Gibaud, S. Manneville, Uncovering instabilities in the spatiotemporal dynamics of a shear-thickening cornstarch suspension, Phys. Rev. X 8 (2018) 031006.
- [11] M. Hermes, B. Guy, W. Poon, G. Poy, M. Cates, M. Wyart, Unsteady flow and particle migration in dense, non-Brownian suspensions, J. Rheol. 60 (2016) 905.
- [12] F. Morrison, Understanding rheology, Oxford University Press, 2001.
- [13] R. Bird, R. Armstrong, O. Hassager, Dynamics of polymeric liquids, Vol. 1, John Wiley & Sons, 1987.
- [14] H. Barnes, J. Hutton, K. Walters, An introduction to rheology, Elsevier, 1989.
- [15] M. Denn, J. Morris, Rheology of non-Brownian suspensions, Annu. Rev. Chem. Biomol. Eng. 5 (2014) 203–228.
- [16] D. Verrelli and A.R. Kilcullen, Normal Stress differences and yield stresses in attractive particle networks, Adv. Condens. Matter Phys., 2016 (2016), 1716598.
- [17] A. Einstein, Eineneue bestimmung der moleküldimensionen, Ann. Phys. 324 (1906) 289–306.
- [18] G. Batchelor, The stress system in a suspension of force-free particles, J. Fluid Mech. 41 (1970) 545–570.

- [19] B. Guy, M. Hermes, W. Poon, Towards a unified description of the rheology of hard-particle suspensions, *Phys. Rev. Lett.* 115 (2015) 088304.
- [20] M. Smith, R. Besseling, M. Cates, Dilatancy in the flow and fracture of stretched colloidal suspensions, *Nat. Commun.* 1 (2010) 114.
- [21] I. Zarraga, D. Hill, D. Leighton Jr., The characterization of the total stress of concentrated suspensions of noncolloidal spheres in Newtonian fluids, *J. Rheol.* 44 (2000) 185–220.
- [22] C. Ness, R. Seto, R. Mari, The physics of dense suspensions, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* 13 (2022) 97–117.
- [23] E. Brown, H. Jaeger, Shear thickening in concentrated suspensions: phenomenology, mechanisms, and relations to jamming, *Rep. Prog. Phys.* 77 (2014) 046602.
- [24] R. Mari, R. Seto, J. Morris, M. Denn, Discontinuous shear thickening in Brownian suspensions by dynamic simulation, *Proc. Natl. Acad. Sci.* 112 (2015) 15326–15330.
- [25] M. Maxey, Simulation methods for particulate flows and concentrated suspensions, *Annu. Rev. Fluid Mech.* 49 (2017) 171–193.
- [26] A. Rosales-Romero, A. Vázquez-Quesada, S. Prasanna-Kumar, J. López-Aguilar, M. Ellero, Effects of confinement-induced non-Newtonian lubrication forces on the rheology of a dense suspension, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 329 (2024) 105248.
- [27] E. Andrade, J. Fox, The mechanism of dilatancy, *Proc. Phys. Soc. B* 62 (1949) 483.
- [28] R. Hoffman, Discontinuous and dilatant viscosity behavior in concentrated suspensions. I. Observation of a flow instability, *Trans. Soc. Rheol.* 16 (1972) 155.
- [29] A. Metzner, M. Whitlock, Flow behavior of concentrated (dilatant) suspensions, *T. Soc. Rheol.* 2 (1958) 239–254.
- [30] J. Brady, G. Bossis, The rheology of concentrated suspensions of spheres in simple shear flow by numerical simulation, *J. Fluid Mech.* 155 (1985) 105–129.
- [31] R. Seto, R. Mari, J. Morris, M. Denn, Discontinuous shear thickening of frictional hard-sphere suspensions, *Phys. Rev. Lett.* 111 (2013) 218301.
- [32] R. Mari, R. Seto, J. Morris, M. Denn, Shear thickening frictionless and frictional rheologies in non-Brownian suspensions, *J. Rheol.* 58 (6) (2014) 1693–1724.
- [33] C. Clavaud, A. Bérut, B. Metzger, Y. Forterre, Revealing the frictional transition in shear-thickening suspensions, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 114 (20) (2017) 5147–5152.
- [34] A. Colin, A. Le, A. Izzet, G. Ovarlez, Solvents govern rheology and jamming of polymeric bead suspensions, *J. Colloid Interface Sci.* 629 (2023) 438–450.
- [35] M. Wyart, M. Cates, Discontinuous shear thickening without inertia in dense non-Brownian suspensions, *Phys. Rev. Lett.* 112 (2014) 098302.
- [36] B. Guy, J. Richards, D. Hodgson, E. Blanco, W. Poon, Constraint-based approach to granular dispersion rheology, *Phys. Rev. Lett.* 121 (2018) 128001.
- [37] N. Lin, C. Ness, M. Cates, J. Sun, I. Cohen, Tunable shear thickening in suspensions, *Proc. Natl. Acad. Sci.* 113 (2016) 10774–10778.
- [38] J. Morris, Lubricated-to-frictional shear thickening scenario in dense suspensions, *Phys. Rev. Fluids* 3 (2018) 110508.
- [39] R. More, A. Ardekani, Unifying disparate rate-dependent rheological regimes in non-Brownian suspensions, *Phys. Rev. E* 103 (2021) 062610.
- [40] J. Ruiz-Lopez, S. Prasanna Kumar, A. Vazquez-Quesada, J. de Vicente, E. Marco, Tribological variable-friction coefficient models for the simulations of dense suspensions of rough poly-disperse particles, *J. Rheol.* 67 (2023) 541–558.
- [41] H. Barnes, Shear thickening (“dilatancy”) in suspensions of non-aggregating solid particles dispersed in Newtonian liquids, *J. Rheol.* 33 (1989) 329–366.
- [42] J. Brady, G. Bossis, Stokesian dynamics, *Annu. Rev. Fluid Mech.* 20 (1988) 111–157.
- [43] J. Klein, E. Kumacheva, Confinement-induced phase transitions in simple liquids, *Science* 269 (1995) 816–819.
- [44] G. Luengo, J. Israelachvili, S. Granick, Generalized effects in confined fluids: new friction map for boundary lubrication, *Wear* 200 (1996) 328–335.
- [45] G. Luengo, F. Schmitt, R. Hill, J. Israelachvili, Thin film rheology and tribology of confined polymer melts: contrasts with bulk properties, *Macromolecules* 30 (1997) 2482–2494.
- [46] A. Vázquez-Quesada, M. Ellero, Analytical solution for the lubrication force between two spheres in a bi-viscous fluid, *Phys. Fluids* 28 (2016) 073101.
- [47] E. Bertevas, X. Fan, R. Tanner, Simulation of the rheological properties of suspensions of oblate spheroidal particles in a Newtonian fluid, *Rheol. Acta* 49 (2009) 53–73.
- [47] A. Kumar, M. Graham, Margination, and segregation in confined flows of blood and other multicomponent suspensions, *Soft Matter* 8 (2012) 10536.
- [49] S. Pednekar, J. Chun, J. Morris, Bidisperse and polydisperse suspension rheology at large solid fraction, *J. Rheol.* 62 (2018) 513–526.
- [50] R. Scirocco, J. Vermant, J. Mewis, Shear thickening in filled Boger fluids, *J. Rheol.* 16 (2020) 9519.
- [51] S. Dai, R. Tanner, Rheology of non-colloidal suspensions with viscoelastic matrices, *Soft Matter* 16 (2020) 9519.
- [52] G. D’Avino, F. Greco, P. Maffettone, Particle migration due to viscoelasticity of the suspending liquid and its relevance in microfluidic devices, *Annu. Rev. Fluid Mech.* 49 (2017) 341–360.

Redes poliméricas semi-interpenetradas: una alternativa atractiva en la ingeniería de tejidos y en la remediación ambiental

Jorge Alejandro Benítez-Martínez, Itzel Marisol Garnica-Palafox, Francisco Manuel Sánchez-Arévalo
Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, Cd. Universitaria, México, 04510, Ciudad de México, México
jbenitez1393@gmail.com, marisol.garnica@gmail.com, fsanchez@materiales.unam.mx

Resumen:

En este trabajo se demostró que las redes poliméricas semi-interpenetradas basadas en PDMS, CS, PVA y GEN fueron viables para dos aplicaciones. La primera enfocada hacia la ingeniería de tejidos y la segunda hacia la remediación ambiental. En la aplicación biológica se demostró que las redes poliméricas presentaron buena viabilidad celular, incluso mejor que la del material control. En la aplicación ambiental, las redes poliméricas fueron capaces de remover entre el 85 y 95% de colorantes orgánicos aniónicos disueltos en agua.

Palabras clave:

Redes poliméricas semi-interpenetradas, quitosano, polidimetilsiloxano, poli(alcohol vinílico), genipin.

En la actualidad, los polímeros se encuentran presentes en muchos aspectos de nuestra vida cotidiana y cada día hacemos uso de ellos sin darnos cuenta. Su aplicación abarca industrias como la textil, la alimentaria, las telecomunicaciones, la construcción

e incluso la medioambiental, la médica, la farmacéutica, entre otras.

Los polímeros están conformados por un conjunto de cadenas. Estas a su vez están formadas por la unión de pequeñas unidades básicas repetidas, llamadas monómeros. Una forma común de visualizar estas cadenas es imaginarlas como espaguetis plegados o alargados, tal como se muestra en la figura 1 a). Cuando estas cadenas se unen entre sí mediante enlaces químicos y/o fuerzas electrostáticas (i.e. enlaces covalentes, enlaces de coordinación, enlaces iónicos, puentes de hidrógeno o fuerzas de Van der Waals), dan lugar a las denominadas redes poliméricas (ver figura 1 b).

De acuerdo con la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada¹ (IUPAC, por sus siglas en inglés), las redes poliméricas

¹ La IUPAC es el organismo internacional que representa a la química y las ciencias y tecnologías afines, esta organización se encarga de la estandarización a nivel global de pesos, medidas, nombres y símbolos en química.

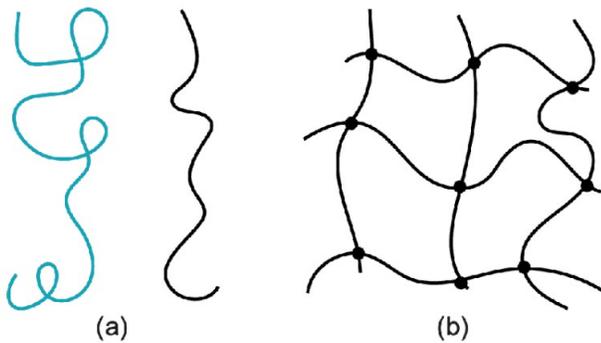


Figura 1. Representación esquemática de la conformación de algunos polímeros: a) Cadenas poliméricas, b) Red polimérica.

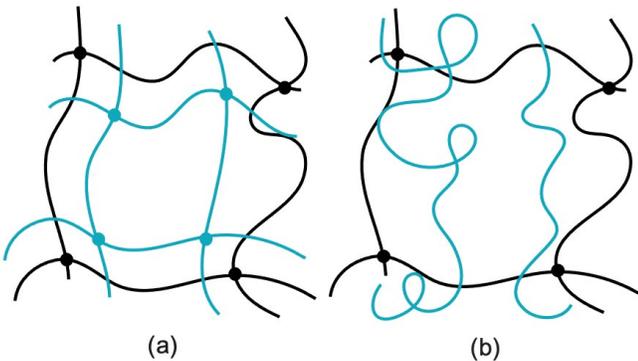


Figura 2. Representación esquemática de redes poliméricas: a) Red polimérica interpenetrada, b) Red polimérica semi-interpenetrada.

pueden clasificarse como interpenetradas (IPNs) o semi-interpenetradas (semi-IPNs).

Las primeras conforman polímeros en los cuales dos o más redes se entrelazan, como se muestra en la figura 2 a). Mientras que las redes poliméricas semi-interpenetradas (semi-IPNs), se componen de al menos un polímero en forma de red y otro polímero cuyas cadenas no se encuentran unidas (ver figura 2 b).

Comparado con otros tipos de estructuras poliméricas, las IPNs y semi-IPNs se caracterizan por poseer alta resistencia mecánica, buena resistencia química a solventes y

gran capacidad de sorción² de líquidos. Lo anterior las hace atractivas para el desarrollo de aplicaciones en el área de la medicina y como materiales para la remediación ambiental; particularmente, para el tratamiento de aguas residuales. Para alcanzar dichas aplicaciones se requiere la combinación de diferentes polímeros cuyas propiedades físicas y químicas actúen sinérgicamente, potenciando así las características deseadas de las IPNs o semi-IPNs de acuerdo con una aplicación particular. Un ejemplo de lo anterior es la combinación que se logra al mezclar el quitosano (CS), el poli(alcohol vinílico) (PVA), el genipin (GEN) y el poli(dimetilsiloxano) (PDMS). Con dicha combinación se logran características únicas que las hacen ideales para una amplia gama de aplicaciones.

En este sentido, debido a su alta disponibilidad, bajo costo y facilidad de obtención, en los últimos años se ha estudiado el uso del quitosano como un polímero para la formación de redes poliméricas semi-interpenetradas. El CS es un polisacárido lineal formado por glucosamina y N-acetil glucosamina, las cuales se unen entre sí mediante enlaces glucosídicos β [1-4]; en la figura 3 a) se muestra su unidad básica. Este biopolímero se obtiene de la desacetilación³ de la quitina, carbohidrato que se encuentra presente en el citoesqueleto de crustáceos como el camarón. Debido a los grupos amino (NH_2) presentes en su estructura, este polímero interacciona fácilmente con estructuras con cargas negativas como

² Proceso físico y/o químico mediante el cual interactúa un átomo, molécula o partícula con la superficie sólida en una interfaz sólido-líquido o sólido-gas. La sorción incluye la absorción, la adsorción, la quimisorción y la fisisorción [17].

³ Reacción química que consiste en la eliminación de un grupo acetilo.

lípidos y proteínas. Adicionalmente, el CS presenta propiedades antimicóticas, antibacterianas, antimicrobianas, hemostáticas, y anticoagulantes. Las propiedades físicas y mecánicas de este polímero pueden ser fácilmente modificadas por la adición y/o combinación con otros polímeros, dependiendo de la propiedad que se requiera modificar y en función del tipo de aplicación.

En el área de la captura de colorantes, el quitosano se ha mezclado con la gelatina -un polímero derivado de la colágena- a fin de obtener un material capaz de permanecer en medios ácidos sin que se disuelva [2], [3]. Además, se han modificado sus propiedades mecánicas al entrecruzarlo con el genipin⁴ (GEN) (figura 3 b), un entrecruzante natural capaz de reaccionar con las aminas primarias del CS para formar una red polimérica mecánicamente estable y resistente a medios ácidos.

De igual forma, el CS se ha entrecruzado con epíclorhidrina y mezclado con poli(acrilamida), con el fin de tener materiales estables en disoluciones acuosas [3].

En el área de la regeneración de tejidos, particularmente en la regeneración de piel, el quitosano se ha utilizado ampliamente (solo o mezclado con otros polímeros) debido a sus excelentes propiedades antibacterianas, antiinflamatorias y antifúngicas [4,5].

Se ha demostrado que para que un material se pueda utilizar como sustituto dérmico, es necesario que presente pro-

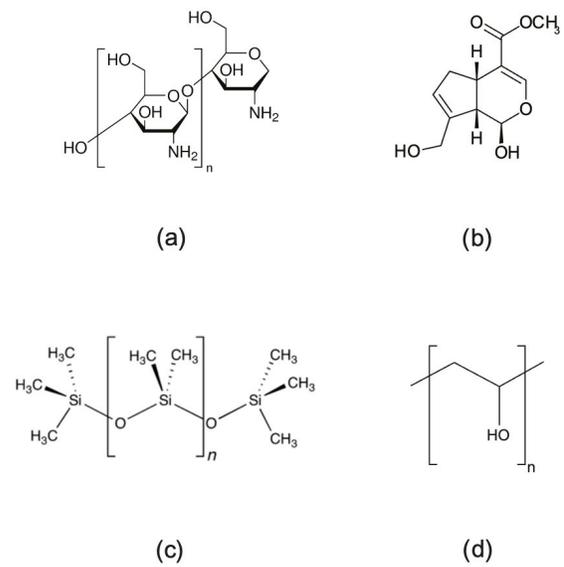


Figura 3. Estructura química de los tres polímeros y del entrecruzante utilizado. a) molécula del CS, b) molécula del GEN, c) molécula del PDMS, d) molécula del PVA.

iedades mecánicas similares a las del tejido nato [6-8], en este caso, a la piel. En este sentido, el uso del quitosano combinado con otros polímeros sintéticos (e.g. PDMS y PVA) y/o agentes entrecruzantes (e.g. genipin o glutaraldehído -GEN o GA-), ha permitido formar redes poliméricas semi-IPNs con propiedades mecánicas muy cercanas a las de dicho tejido, perfilándose así como materiales potenciales para su aplicación en la regeneración de piel.

El PDMS es un polímero sintético, lineal, basado en cadenas de silicio-oxígeno y grupos orgánicos (CH₃) enlazados al silicio, como se aprecia en la figura 3 c). Dicho polímero es biocompatible, químicamente inerte, con excelentes propiedades mecánicas (como la elasticidad) que lo hacen adecuado para su uso como sustituto dérmico. Por otro lado, el PVA es un polímero sintético, no tóxico, cuya estructura está formada por grupos hidroxilo (OH) unidos a átomos de carbono,

⁴ El genipin (GEN) es una glicona (ver figura 3 b) que se encuentra en el extracto de la *Gardenia Jasminoides* Ellis.

como se muestra en la figura 3 d). Este polímero es biocompatible y tiene una gran capacidad de hinchamiento, lo que lo hace útil en la ingeniería de tejidos.

En este contexto, en el 2015, Morales-Hurtado y colaboradores [8] estudiaron la red polimérica basada en PDMS y PVA entrecruzado con GA. En este estudio se demostró que la hidrofiliidad del PDMS aumentaba en función del contenido de PVA; también se reportó que esta IPNs posee propiedades mecánicas similares a la piel del antebrazo humano [9]. Por otro lado, en el 2019, Chen y colaboradores [9] utilizaron la red polimérica semi-interpenetrada basada en PDMS/quitosano carboxilo con el fin de obtener un material que pudiera servir como modelo para entender el comportamiento mecánico de la piel [10]. Sin embargo, debido a la falta de ensayos biológicos y al uso de GA como entrecruzante, estos materiales aún no se podrían considerar para una aplicación como cubierta dérmica o andamio celular (*scaffold*) en la regeneración de piel.

Actualmente, en el Instituto de Investigaciones en Materiales de la Universidad Nacional Autónoma de México (IIM, UNAM) se estudian las redes poliméricas semi-interpenetradas basadas en CS/PVA/GEN y PDMS/CS/PVA/GEN, tanto para aplicaciones en regeneración de tejidos como en la captura de colorantes.

En el 2016, Garnica-Palafox y colaboradores [10] investigaron la red polimérica semi-IPNs de CS/PVA/GEN. En este trabajo se determinó que al mezclar el PVA con el quitosano entrecruzado con GEN, el CS incrementa hasta 10 veces

su módulo de elasticidad. Además, en el 2020, a esta misma mezcla se le realizaron ensayos de viabilidad celular con fibroblastos, mostrando resultados favorables para su uso como *scaffold* en la regeneración de piel [11].

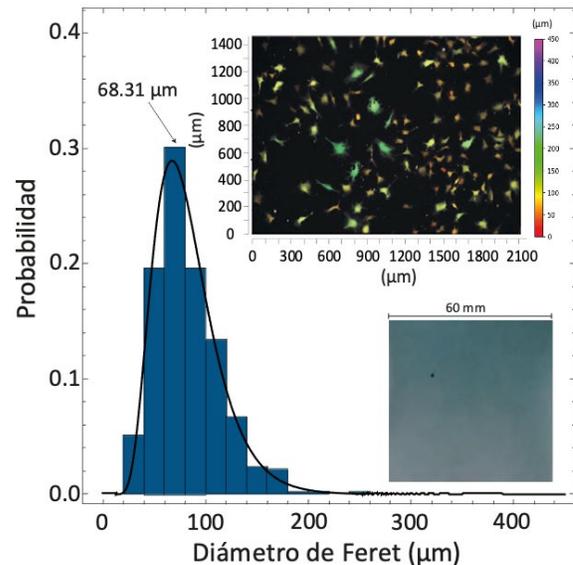


Figura 4. Análisis estadísticos del diámetro de Feret para el ensayo vivo/muerto en la red polimérica semi-interpenetrada. La imagen en la esquina inferior derecha corresponde a una fotografía de las membranas de PDMS/CS/PVA/GEN estudiadas. La imagen en la esquina superior derecha muestra los fibroblastos adheridos a la superficie de estas membranas. El color de las células corresponde a su diámetro de Feret en micras de acuerdo con la escala de color falso mostrada a su derecha.

En el 2021, Benítez-Martínez y colaboradores [12] estudiaron la red semi-IPNs compuesta por 7 partes de PDMS y 3 partes de la mezcla CS/PVA/GEN [12]. En este estudio se demostró que la semi-IPN desarrollada no presentó efectos citotóxicos en las células sembradas en las membranas de PDMS/CS/PVA/GEN. Adicionalmente, se determinó que dicha red polimérica semi-interpenetrada mostró un módulo elástico de 0.8 ± 0.14

MPa, valor similar al reportado para la piel humana en la zona del antebrazo (0.5 - 0.85 MPa), según estudios previos [13], [14]. Es importante destacar que, la zona del antebrazo es una de las zonas en donde se reporta una mayor incidencia de quemaduras [15].

El tamaño de las células adheridas a la superficie del material es uno de los principales indicadores de una adhesión exitosa. En la literatura se sugiere que, cuanto mayor sea la longitud de los fibroblastos, su adhesión al sustrato será mejor, teniendo una mayor capacidad de proliferar (i.e. replicarse). Con el fin de investigar si las semi-IPNs tienen la capacidad de promover la adhesión y proliferación celular, sobre la superficie de las membranas de PDMS/CS/PVA/GEN se sembraron fibroblastos de ratón (línea celular 3T3-L1) y tras 24 horas de cultivo se contabilizó el número de células adheridas a las membranas. A partir de este análisis se realizaron estudios estadísticos del diámetro máximo de Feret, utilizando el software "CellProfiler". En la figura 4 se muestran los resultados obtenidos. Como se puede apreciar, tanto la gráfica central como la micrografía de la esquina superior derecha muestran que la mayoría de las células tuvieron un diámetro de Feret⁵ máximo de 68.31 μm . Asimismo, el conteo de las células adheridas evidenció una densidad celular de 46 ± 3 células por milímetro cuadrados para la semi-IPNs, mientras que, para el material control (PDMS) fue de 30 ± 3 células por milímetro cuadrado.

Estos resultados, en conjunto, indican que la semi-IPNs compuesta por 7 partes de PDMS y 3 partes de la mezcla CS/PVA/

⁵ El diámetro de Feret corresponde a la distancia mínima o máxima entre dos líneas paralelas entre sí, tangentes a los bordes que definen la geometría irregular del objeto.

GEN es un candidato potencial para su uso en las áreas de ingeniería de tejidos, recubrimiento de heridas cutáneas, sustituto dérmico e, incluso, para la fabricación de dispositivos *Lab-on-a-chip*.

En el área de la captura de colorantes, la semi-IPNs conformada a base de CS/GEN y PVA, demostró ser un candidato potencial para la captura del colorante azul ácido 113 y anaranjado de metilo [16]. Estos dos colorantes son de los más utilizados en la industria textil y ambos presentan riesgos para la salud humana y el medio ambiente.

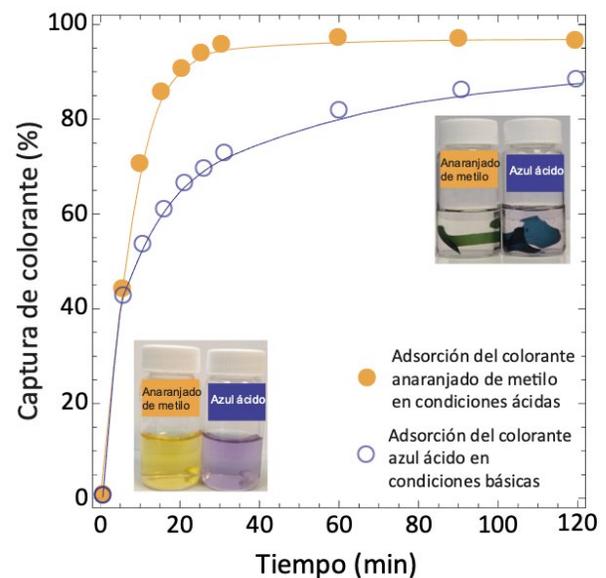


Figura 5. Porcentaje de captura de los colorantes, anaranjado de metilo y azul ácido 113, conforme se incrementa el tiempo de contacto con los hidrogeles de CS/PVA/GEN.

En la figura 5 se muestran las curvas de adsorción para cada uno de estos colorantes. Estos estudios se llevaron a cabo utilizando muestras del hidrogel de CS/PVA/GEN con un área de 3.85 cm^2 y las disoluciones de anaranjado de metilo ($\text{pH} = 6.2 \pm 0.2$) y azul ácido 113 ($\text{pH} = 10 \pm 0.4$) a una concentración inicial de

10⁻⁵ M. Con el fin de ajustar el pH de las soluciones, se utilizó una disolución de hidróxido de sodio (NaOH) con una concentración de 0.05 M. Como se puede observar, la semi-IPNs compuesta por CS/PVA/GEN alcanzó más del 95% y 85% de eficiencia de remoción del colorante anaranjado de metilo y azul ácido 113, respectivamente, dentro de las primeras dos horas.

Perspectiva a futuro

Hasta ahora se han logrado importantes avances en la aplicación de las semi-IPNs basadas en CS/PVA/GEN y PDMS/CS/PVA/GEN en áreas como la ingeniería de tejidos o la remediación ambiental; sin embargo, todavía hay mucho trabajo por hacer. Por ejemplo, en el campo de la medicina se está buscando la proporción óptima de los diferentes polímeros que componen la red para mejorar sus propiedades biológicas, sin sacrificar las propiedades mecánicas. Además, se está explorando el uso de estos materiales para la liberación controlada de fármacos, mediante la adición de nanopartículas que provean al material de una respuesta (mecánica o química) ante estímulos térmicos. Por otro lado, para mejorar la eficiencia de captura y reutilización de colorantes, se está trabajando en el desarrollo de elementos 3D. Además, todavía queda mucho por explorar en la aplicación de estas redes semi-interpenetradas en la eliminación de otros contaminantes químicos del agua, como algunos derivados del petróleo e incluso metales pesados.

Agradecimientos:

Este trabajo se llevó a cabo con recursos otorgados por el programa PAPIIT

DGAPA-UNAM IN101624, IN102421. Benítez Martínez, agradece al CONACYT por la beca otorgada para sus estudios de doctorado.

Referencias

- [1] L. Cui, J. Jia, Y. Guo, Y. Liu, and P. Zhu, "Preparation and characterization of IPN hydrogels composed of chitosan and gelatin cross-linked by genipin," *Carbohydr Polym*, vol. 99, pp. 31–38, 2014, doi: <https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2013.08.048>.
- [2] L. Cui et al., "Fabrication of interpenetrating polymer network chitosan/gelatin porous materials and study on dye adsorption properties," *Carbohydr Polym*, vol. 132, pp. 330–337, 2015, doi: <https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2015.06.017>.
- [3] F. S. Al-Mubaddel, M. O. Aijaz, S. Haider, A. Haider, W. A. Almasry, and A. S. Al-Fatesh, "Synthesis of chitosan based semi-IPN hydrogels using epichlorohydrine as crosslinker to study the adsorption kinetics of Rhodamine B," *Desalination Water Treat*, vol. 57, no. 37, pp. 17523–17536, 2016, doi: [10.1080/19443994.2015.1085915](https://doi.org/10.1080/19443994.2015.1085915).
- [4] M. O. G. Ferreira et al., "Chitosan Hydrogel in combination with Nerolidol for healing wounds," *Carbohydr Polym*, vol. 152, pp. 409–418, 2016, doi: <https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2016.07.037>.
- [5] R. Nathoo, N. Howe, and G. Cohen, "Skin substitutes: an overview of the key players in wound management," *J Clin Aesthet Dermatol*, vol. 7, no. 10, p. 44, 2014.
- [6] J. A. Juárez-Moreno, A. Ávila-Ortega, A. I. Oliva, F. Avilés, and J. V. Cauich-Rodríguez, "Effect of wettability and surface roughness on the adhesion properties of collagen on PDMS films treated by capacitively coupled oxygen plasma," *Appl Surf Sci*, vol. 349, pp. 763–773, 2015, doi: <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2015.05.063>.
- [7] H. Debels, M. Hamdi, K. Abberton, and W. Morrison, "Dermal matrices and bioengineered skin substitutes: a critical review of current options," *Plast Reconstr Surg Glob Open*, vol. 3, no. 1, 2015.
- [8] M. Morales-Hurtado, X. Zeng, P. Gonzalez-Rodriguez, J. E. Ten Elshof, and E. van der Heide, "A new water absorbable mechanical Epidermal skin equivalent: The combination of hydrophobic PDMS and hydrophilic PVA hydrogel," *J Mech Behav Biomed Mater*, vol. 46, pp. 305–317, 2015, doi: <https://doi.org/10.1016/j.jmbbm.2015.02.014>.
- [9] J. Chen, H. Yang, J. Li, J. Chen, Y. Zhang, and X. Zeng, "The development of an artificial skin model and its frictional interaction with wound dressings," *J Mech Behav Biomed Mater*, vol. 94, pp. 308–316, 2019, doi: <https://doi.org/10.1016/j.jmbbm.2019.03.013>.
- [10] I. M. Garnica-Palafox and F. M. Sánchez-Arévalo, "Influence of natural and synthetic crosslinking reagents on the structural and mechanical properties of chitosan-based hybrid hydrogels," *Carbohydr Polym*, vol. 151, pp. 1073–1081, 2016, doi: <https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2016.06.036>.
- [11] I. M. Garnica-Palafox, H. O. Estrella-Monroy, N. A. Váz-

quez-Torres, M. Álvarez-Camacho, A. E. Castell-Rodríguez, and F. M. Sánchez-Arévalo, "Influence of multi-walled carbon nanotubes on the physico-chemical and biological responses of chitosan-based hybrid hydrogels," *Carbohydr Polym*, vol. 236, p. 115971, 2020, doi: <https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2020.115971>.

[12] J. A. Benítez-Martínez, I. M. Garnica-Palafox, G. Vázquez-Victorio, M. Hautefeuille, and F. M. Sánchez-Arévalo, "Semi-interpenetrating polymeric networks based on poly (dimethylsiloxane)-chitosan-poly (vinyl alcohol) crosslinked with genipin with possible use in biomedical applications," *J Mater Sci*, vol. 56, pp. 5936–5955, 2021.

[13] P. G. Agache, C. Monneur, J. L. Leveque, and J. De Rigal, "Mechanical properties and Young's modulus of human skin in vivo," *Arch Dermatol Res*, vol. 269, pp. 221–232, 1980.

[14] A. Delalleau, G. Josse, J. M. Lagarde, H. Zahouani, and J. M. Bergheau, "Characterization of the mechanical properties of skin by inverse analysis combined with an extensometry test," *Wear*, vol. 264, no. 5–6, pp. 405–410, 2008, doi: [10.1016/j.wear.2006.08.033](https://doi.org/10.1016/j.wear.2006.08.033).

[15] Secretaría de Salud, "Cuenta México con centro de alta especialidad para atender quemaduras graves.," <https://www.gob.mx/salud/prensa/170-cuenta-mexico-con-centro-de-alta-especialidad-para-atender-quemaduras-graves>, Apr. 27, 2021.

[16] I. M. Garnica-Palafox, H. O. Estrella-Monroy, J. A. Benítez-Martínez, M. Bizarro, and F. M. Sánchez-Arévalo, "Influence of genipin and multi-walled carbon nanotubes on the dye capture response of CS/PVA hybrid hydrogels," *J Polym Environ*, pp. 1–20, 2022.

[17] Sociedad nuclear española, "Sorción." <https://www.sne.es/diccionario-nuclear/sorcion/> (accessed Jun. 20, 2023).

Maltodextrinas modificadas: estructura, fuentes, aplicaciones e importancia en la industria alimentaria

Mónica Reyes-Reyes¹, Lucila Concepción Núñez-Bretón², Barbara Cooper-Bribiesca³, Francisco Erik González-Jiménez⁴, Betsabe Yulieth Valencia Rios⁵, O. Manero², Liliana Alamilla-Beltran¹

¹ Escuela Nacional de Ciencias Biológicas, IPN. Wilfrido Massieu S/N, U.P. Adolfo López Mateos, 07738, Gustavo A. Madero, Ciudad de México, CDMX

² Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM. Departamento de Reología y Mecánica de Materiales, Circuito Exterior S/N, Circuito de la Investigación Científica, Cd. Universitaria, Coyoacán, 04510, Ciudad de México, México

³ Escuela Nacional Preparatoria Plantel 2, UNAM. Circuito Interior Avenida Río Churubusco 1418, Carlos Zapata Vela, Iztacalco, 08040, Ciudad de México, CDMX

⁴ Facultad de Ciencias Químicas, UV. Oriente 6 1009, Rafael Alvarado, 94340 Orizaba, Veracruz, México

⁵ Universidad Tecnológica de la Sierra Sur de Oaxaca, Magnolias S/N, San Idelfonso Sola, C.P. Villa Sola de Vega, Oaxaca 71400, México

mreyesr101@gmail.com

Resumen

Desde hace unas décadas hay un creciente interés por consumir alimentos funcionales, estos productos impactan de manera benéfica a la salud del consumidor, incrementándose así la demanda para que los ingredientes y aditivos alimenticios posean características tecnofuncionales. La población actual busca que los alimentos que van a consumir le aporten, en conjunto, una combinación de características organolépticas aceptables a los sentidos y que, a su vez, las propiedades químicas y fisicoquímicas proporcionen beneficios a la salud. Dentro de esta gama de ingredientes se encuentran las maltodextrinas y los compuestos derivados del almidón, que se emplean como aditivos y que pueden cumplir con este objetivo gracias a su naturaleza química

y estructural (pues son agentes que pueden modificar texturas además de otras aplicaciones en la industria alimentaria). Aunado a esto, se ha demostrado que la modificación del almidón mejora las propiedades físicas y funcionales de los almidones nativos; es por ello que la investigación se ha orientado a obtener maltodextrinas modificadas, para potenciar su aplicación en la industria al formular o reformular alimentos. En los últimos años se han realizado estudios respecto a la generación/producción y funcionalidad de maltodextrinas modificadas, obteniéndolas a partir de dos vías: hidrólisis de almidones modificados y modificación de maltodextrinas previamente obtenidas por la hidrólisis de almidón. Las principales modificaciones efectuadas en maltodextrinas son químicas, específicamente la esterificación y acetila-

ción empleando ácidos orgánicos, ácidos inorgánicos, anhídridos o cloruros de acilo. Este artículo brinda información general respecto a la estructura, obtención y aplicaciones de las maltodextrinas modificadas. Palabras clave: almidón modificado, hidrólisis, maltodextrinas modificadas, equivalentes de dextrosa.

Maltodextrinas

Las maltodextrinas ($C_6H_{10}O_5$) $_n \cdot H_2O$ (Figura 1) son definidas como *mezclas nutritivas y purificadas de polímeros de sacáridos obtenidos por hidrólisis parcial de almidón comestible* [1], esta hidrólisis puede ser ácida o enzimática. El almidón es un polisacárido constituido por un gran número de unidades de glucosa unidas entre sí mediante enlaces glucosídicos, formando dos estructuras (amilosa y amilopectina). La primera es un polímero lineal con enlaces $\alpha(1-4)$, el cual no es soluble en agua; mientras que la amilopectina es un polímero ramificado con 94-96 % de enlaces $\alpha(1-4)$ y un 4-6 % de uniones $\alpha(1-6)$, estas ramificaciones se presentan aproximadamente cada 15 a 25 unidades de glucosa. La amilopectina es parcialmente soluble en agua caliente [2].

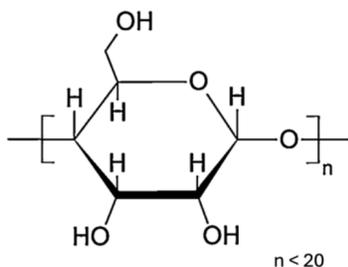


Figura 1. Estructura química de maltodextrinas ($n < 20$). n: número de unidades de glucosa (Modificada de [3])

En el caso de la hidrólisis ácida, la ventaja es que se lleva a cabo de manera muy rápida, pero presenta las siguientes limitaciones: problemas de decoloración, mal sabor, altas concentraciones de sales en el producto

terminado, entre otros. Una alternativa que se ha empleado para contrarrestar estos problemas es la obtención de maltodextrinas empleando hidrólisis enzimática. El nivel de hidrólisis se determina en relación con el valor de equivalente de dextrosa (DE) [4], el cual es definido como el contenido de azúcares reductores directos (ARD) expresado en porcentaje de glucosa en base seca [5]. De acuerdo con la FDA (Administración de Alimentos y Medicamentos) las maltodextrinas son una mezcla de carbohidratos con bajo poder edulcorante con diferentes grados de polimerización, presentan DE menores a 20 (Tabla 1), mientras que los carbohidratos que presentan DE mayores a 20 son clasificados como jarabes, así como un valor de DE igual a 0 indica que es un almidón y valores de DE iguales a 100 indican unidades libres de glucosa [7].

Maltodextrinas modificadas

Como se mencionó anteriormente, las maltodextrinas se pueden obtener o producir a partir de cualquier almidón, independientemente de su fuente de extracción. De igual manera se pueden emplear almidones modificados como materia prima, generando así maltodextrinas modificadas (MM) (Figura 2). Un almidón modificado es aquel que ha sufrido alguna transformación física (calor, presión, entre otras), química (oxidación, esterificación, entrecruzamiento, entre otras) o enzimática. Estas modificaciones hacen que las propiedades de los almidones nativos cambien o mejoren, principalmente las propiedades reológicas, funcionales y químicas [1], por lo tanto, una MM presentará cambios en estas propiedades en comparación con una maltodextrina "normal o nativa". Otro método para obtener MM (Figura 2) consiste en obtener maltodextrinas de almidones nativos y posteriormente modificarlos.

Tabla 1. Propiedades de las maltodextrinas [6]

Equivalente de dextrosa DE	Glucosa	Maltosa	Sacáridos superiores	Poder edulcorante (sacarosa=100)
10	0.7	2.8	96.5	2
15	1.3	4.7	94	3.3
18	1.6	5.7	92.7	4

Como base para la modificación y obtención de MM se han tomado algunas reacciones y compuestos químicos evaluados previamente en la modificación de almidones, debido a las propiedades que le imparten a las moléculas después de reacciones de esterificación (acetilación). La modificación con anhídrido acético ((CH₃CO)₂O), le proporcionó a almidones de diversas fuentes (maíz, papa, plátano, arroz, yuca) mejoras en propiedades tales como la disminución de la temperatura de gelatinización y retrogradación, mejoramiento del perfil de viscosidad, aumento de solubilidad, disminución de sinéresis, mejora del poder de hinchamiento, entre otros.

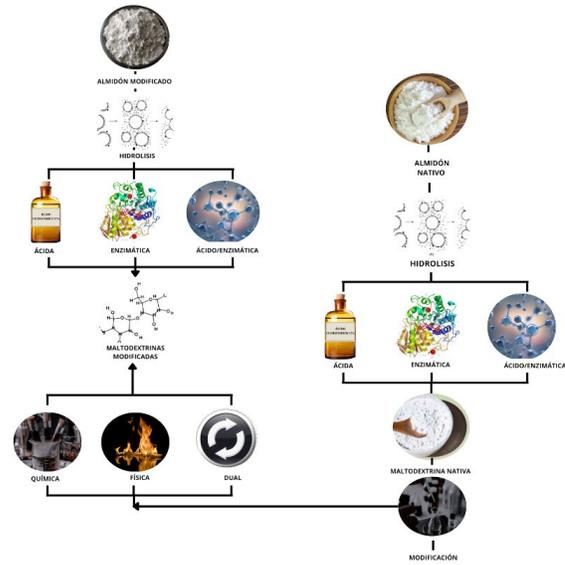


Figura 2. Diagrama de obtención de maltodextrinas modificadas

El anhídrido dodecenil succínico (DDSA) (C₁₆H₂₆O₃) y el octenil succínico (OSA) se han empleado para que los almidones au-

menten la capacidad de emulsificación y solubilidad, así como la disminución del tiempo de gelatinización [8,9]. En la Figura

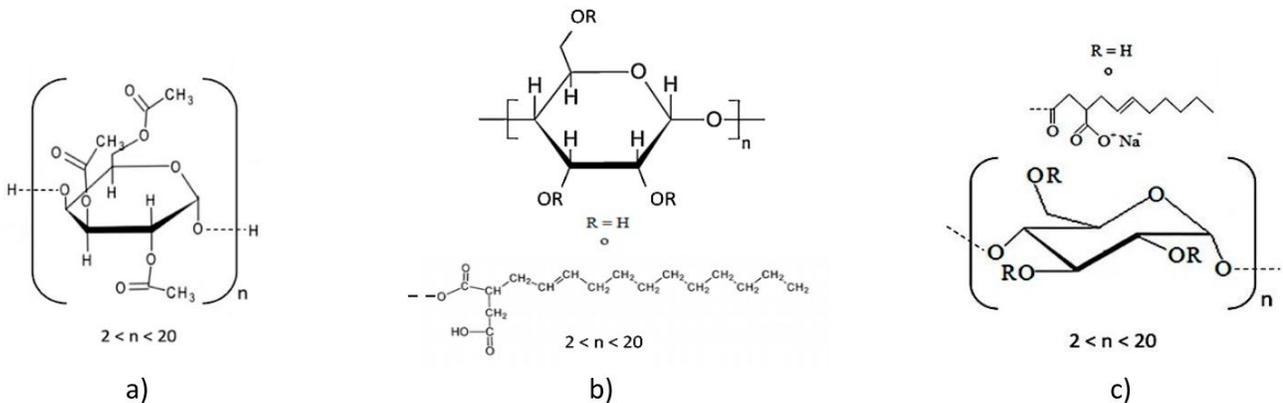


Figura 3. Posibles estructuras químicas de MM: a) MM con anhídrido acético, b) MM con DDSA, c) MM con OSA (Modificada [10, 11,12])

Maltodextrina modificada	Fuente de almidón/modificación	Propiedades evaluadas/Funcionalidad	Resultados	Referencia
Mal-OSA	Almidón de maíz/esterificación	Emulsionantes	Mejoramiento de las propiedades emulsionantes.	[13]
Mal-OSA	Maltodextrina comercial/esterificación	Microencapsulación	Al emplearlo como material de pared en la microencapsulación de aceite se redujo el 60 % del índice de peróxido en comparación a una maltodextrina sin modificar.	[14]
Mal-Ac	Almidones de papa modificados (acetilados)	Espumantes y reológicas	Modificaron la formación de espuma y las propiedades reológicas.	[15]
Mal-Ao	Maltodextrina de tapioca/esterificación	Emulsificantes Estabilizantes	Mejoran las propiedades emulsificantes y estabilizantes en comparación a las maltodextrinas nativas.	[16]

Mal: maltodextrinas, OSA: anhídrido octenil succínico, Ac: acetilados y Ao: ácidos orgánicos.

Tabla 2. Comparación de algunas investigaciones en cuanto a obtención y análisis de maltodextrinas modificadas

3 se muestra la posible estructura química que presentan las maltodextrinas modificadas obtenidas mediante estos métodos.

Derivado de ello, se han desarrollado diversas investigaciones evaluando las propiedades de las maltodextrinas modificadas (Tabla 2).

Fuentes de obtención de maltodextrinas modificadas

Tanto las maltodextrinas como los almidones son reconocidos como ingredientes alimentarios seguros (GRAS) [1]. Las maltodextrinas más comercializadas en el mercado de la industria alimentaria son las provenientes del almidón de maíz, trigo, papa y yuca. Por lo que su consumo es seguro y está regulado por la FDA y la Autoridad Europea de Seguridad Alimentaria (EFSA), clasificadas como aditivos alimentarios, mostrando el código E1400 [17]. Debido a su funcionalidad, se continúa con la búsqueda de nuevas fuen-

tes de almidón y, por ende, de maltodextrinas para estudiar y evaluar sus propiedades, y así poder aprovechar nuevas fuentes de estos carbohidratos y su implementación en el desarrollo de productos alimenticios y la biofuncionalidad que le pueda aportar al consumidor. Una alternativa de ello es la obtención de maltodextrinas modificadas, ya sea por vía química, física o enzimática.

Aplicaciones de las maltodextrinas nativas y modificadas

La industria alimentaria representa la mayor parte de la demanda de maltodextrinas (Figura 4), debido a que son empleadas principalmente como sustitutos de azúcar, para disminuir el nivel de dulzor de algunos rellenos o de bebidas dirigidas a sectores específicos de la población. También actúan como estabilizadores, espesantes y agentes de volumen en alimentos, aumentan el contenido de sólidos de los alimentos,

fungen como protectores de compuestos bioactivos formando microcápsulas, las cuales posteriormente son adicionadas a matrices alimenticias para obtener alimentos funcionales [1, 17].

Todas estas aplicaciones son posibles gracias a los atributos inherentes de las maltodextrinas, las cuales son dependientes del DE. Entre estos atributos encontramos su buena dispersabilidad y solubilidad; viscosidad, textura suave y sensación agradable al paladar; sabor suave; control de la humedad; inhibición de la cristalización; formación de películas; fácil digestibilidad; fácil secado por aspersión; encapsulación de sabores y aromas, y poca o ninguna dulzura [1]. Las aplicaciones más comunes de las maltodextrinas nativas se muestran en la Tabla 3.

Conclusiones

Las maltodextrinas modificadas se pueden obtener a partir de almidón nativo y/o modificado por medios químicos, enzimáticos o su combinación. Estos compuestos presentan propiedades químicas, físicas, funcionales y aplicaciones específicas como espesantes, emulsificantes, estabilizadores, modificantes del tiempo y la temperatura de gelatinización y retrogradación, coadyuvantes al incremento del perfil de viscosidad y poder de hinchamiento, así como en la disminución de la sinéresis. Actúan como material de pared para la microencapsulación de compuestos activos, entre otros. Todas estas propiedades son aprovechadas para la formulación de nuevos alimentos tecnofuncionales o la reformulación de productos ya existentes en el mercado para mejorar la calidad organoléptica y nutricional que repercute en un beneficio en la salud del consumidor.

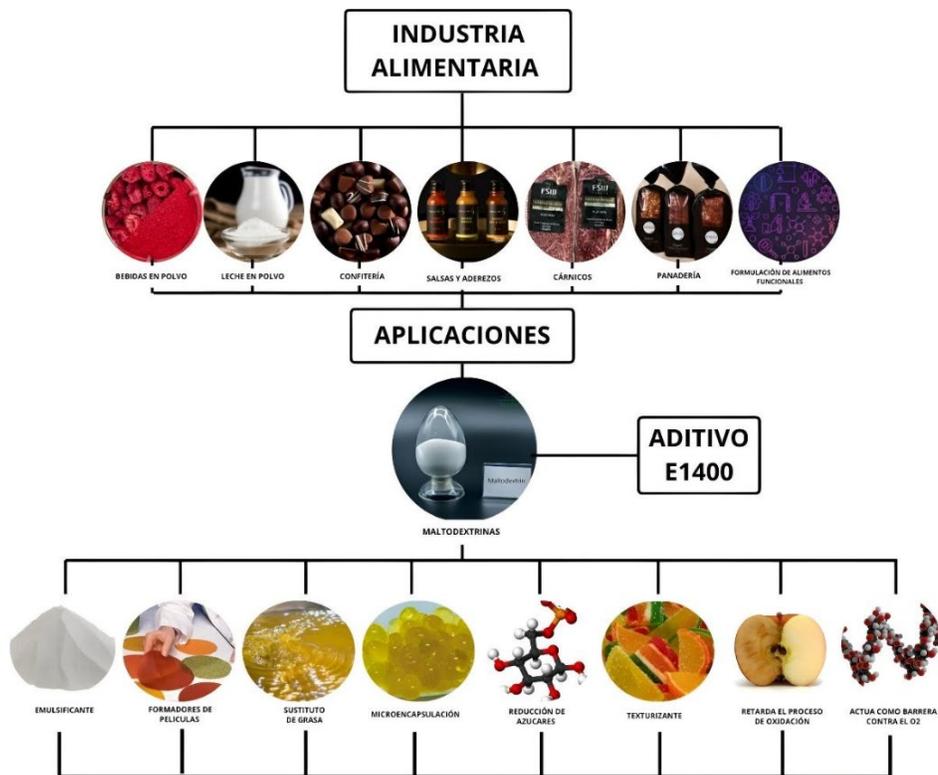


Figura 4. Aplicaciones en la Industria Alimentaria de las maltodextrinas modificadas

Agentes aglomerantes Análogos o sucedáneos de carnes congeladas. Barras de granola.	Sustitutos de grasa Rellenos de pastelería. Queso crema. Postres congelados. Dulces sin grasa. Yogurt.
Vehículo o transportador de: Endulzantes/sabores artificiales. Mezclas secas: bebidas en polvo, salsas, aderezos.	Control de humedad Cárnicos. Panadería.
Cubiertas Cacahuates tostados (barrera de oxígeno).	Bebidas nutricionales Fórmulas para adultos. Productos dietéticos Fórmulas infantiles.
Inhibidores de cristalización Confitería. Alimentos congelados y ensaladas.	Formador de películas Botanas. Extruidos.

Tabla 3. Algunas aplicaciones de maltodextrinas nativas (Modificado de [1])

Referencias

- [1] BeMiller, J. N. (2019). Chapter 7 - Starches: Conversions, Modifications, and Uses, Editor(s): James N. BeMiller, Carbohydrate Chemistry for Food Scientists (Third Edition), AACC International Press, pp 191-221. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-812069-9.00007-8>.
- [2] Castro, N., Durrieu, V., Raynaud, C., & Rouilly, A. (2016). Influence of DE-value on the physicochemical properties of maltodextrin for melt extrusion processes. *Carbohydrate Polymers*, 144: 464-473. <https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2016.03.004>.
- [3] Morán, J., Vázquez, A., & Cyras, V. (2013). Bio-nanocomposites based on derivatized potato starch and cellulose, preparation and characterization. *Journal of Materials Science*. 48. 7196-7203. <https://doi.org/10.1007/s10853-013-7536-x>.
- [4] Nurhadi, B., Roos, Y.H., & Maidannyk, V. (2016). Physical properties of maltodextrin DE 10: Water sorption, water plasticization and enthalpy relaxation. *Journal of Food Engineering*, 174: 68-74. <https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2015.11.018>.
- [5] Soto, J.L., García, L., González, J., Bernardino-Nicanor, A., & González-Cruz, L. (2012). Influence of starch source in the required hydrolysis time for the production of maltodextrins with different dextrose equivalent. *African Journal of Biotechnology*. 11: 13428-13435. <https://doi.org/10.5897/AJB12.2257>.
- [6] Tiefenbacher, K.F. (2017). Chapter Two - Technology of Main Ingredients—Water and Flours, Editor(s): Karl F. Tiefenbacher, Wafer and Waffle, Academic Press, pp. 15-121, <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-809438-9.00002-8>.
- [7] Wandrey, C., Bartkowiak, A., Harding, S.E. (2010). Materials for Encapsulation. In: Zuidam, N., Nedovic, V. (eds) *Encapsulation Technologies for Active Food Ingredients and Food Processing*. Springer, New York, NY, pp. 31-100, https://doi.org/10.1007/978-1-4419-1008-0_3.
- [8] Perea Flores, M. D. J., Martínez Luna, K. L., Núñez Bretón, L. C., Sarria Guzmán, Y., Jiménez Guzmán, J., Alamilla Beltrán, L., & Vivar-Vera, G. González-Jiménez, F. E. (2021). Modification by lipophilic substitution of Mexican Oxalis

tuberosa starch and its effect on functional and microstructural properties. *Journal of Food Measurement and Characterization*, 16, 1062–1072. <https://doi.org/10.1007/s11694-021-01233-w>.

[9] Núñez-Bretón, L. C., Torres-González, C. E., Del Ángel-Zumaya, J. A., Peredo-Lovillo, A., Rivera-Villanueva, J. M., Perea-Flores, M. D. J., Guzmán-Gerónimo, R. I., Manero, O., & González-Jiménez, F. E. (2024). Functionalization of starches from Mexican Oxalis tuberosa using dual chemical modification. *Food Hydrocolloids*, 149, 109500. <https://doi.org/10.1016/j.foodhyd.2023.109500>.

[10] Xu, Y., Miladinov, V., & Hanna, M. (2004). Synthesis and Characterization of Starch Acetates with High Substitution 1. *Cereal Chemistry*, 81. 735-740. <https://doi.org/10.1094/CCHEM.2004.81.6.735>.

[11] Abdul Khalil, H. P. S., Chow, W. C., Rozman, H. D., Ismail, H., Ahmad, M. N., & Kumar, R. N. (2001). The effect of anhydride modification of sago starch on the tensile and water absorption properties of sago-filled linear low-density polyethylene (Lldpe). *Polymer-Plastics Technology and Engineering*, 40:3, 249-263. <https://doi.org/10.1081/PPT-100000246>.

[12] Ačkar, Đ., Babić, J., Jozinović, A., Miličević, B., Jokić, S., Miličević, R., Rajić, M., & Šubarić, D. (2015). Starch Modification by Organic Acids and Their Derivatives: A Review. *Molecules*. 20(10):19554-19570. <https://doi.org/10.3390/molecules201019554>.

[13] Sotelo-Bautista, M., González-Soto, R. A., & Bello-Pérez, L. A. (2018). Propiedades emulsionantes de una maltodextrina modificada con anhídrido octenil succínico (OSA). *Investigación y Desarrollo en Ciencia y Tecnología de Alimentos*. 3: 461-466.

[14] Sotelo-Bautista, M., Bello-Perez, L.A., Gonzalez-Soto, R.A., Yañez-Fernandez, J., & Alvarez-Ramirez, J. (2020). OSA-maltodextrin as wall material for encapsulation of essential avocado oil by spray drying. *Journal of Dispersion Science and Technology*, 41(2): 235-242. <https://doi.org/10.1080/01932691.2018.1562939>.

[15] Pycia, K., Gałkowska, & D., Juszczak, L. (2017). Maltodextrins produced from chemically modified starches as agents affecting stability and rheological properties of albumin foam, *LWT*, 80: 394-400. <https://doi.org/10.1016/j.lwt.2017.03.002>.

[16] Udomrati, S., & Gohtani, S. (2014). Enzymatic esterification of tapioca maltodextrin fatty acid ester. *Carbohydrate Polymers*, Volume 99:379-384, <https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2013.07.081>.

[17] Hofman, D. L., van Buul, V. J., & Brouns, F. J. P. H. (2015). Nutrition, Health, and Regulatory Aspects of Digestible Maltodextrins. *Critical Reviews in Food Science and Nutrition*, 56(12), 2091–2100. <https://doi.org/10.1080/10408398.2014.940415>.

Materiales para la remoción de contaminantes emergentes presentes en agua

Sayra Orozco¹, Jaime Espino¹, Michel Rivero²

¹ Posgrado en Ingeniería Química, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo.

² Instituto de Investigaciones en Materiales, Unidad Morelia – UNAM

mrivero@materiales.unam.mx, sayra.orozco@umich.mx

Resumen

La gestión inadecuada del recurso hídrico ha conllevado a la contaminación del agua. Dentro de los contaminantes presentes en el agua se encuentran el grupo de los contaminantes emergentes que representan un riesgo potencial para la salud y los ecosistemas. En este trabajo, primeramente, se definen los contaminantes emergentes, se presentan las fuentes de dichos contaminantes y cómo estamos expuestos a ellos. En la segunda sección se presenta la fotocatalisis heterogénea como un método avanzado de oxidación para la degradación y mineralización de contaminantes emergentes. Posteriormente, se discuten resultados obtenidos para la degradación y mineralización de un fármaco (acetaminofén) empleando óxidos de galio dopados con hierro y cobre. Los resultados obtenidos mostraron que Ga_2O_3 tiene actividad catalítica bajo iluminación UV-A, alcanzando un 80 % de degradación y un 42 % de mineralización. Los materiales $\text{Cu}/\text{Ga}_2\text{O}_3$ y $\text{Fe}/\text{Ga}_2\text{O}_3$ tienen actividad catalítica en la región visible, alcanzando una degradación de un 80 % del AC y mineralizaciones que alcanzan 61.5 y 58 %, respectivamente.

Palabras clave

Contaminantes emergentes; salud; remediación ambiental; nanocatalizadores, degradación-mineralización.

Contaminantes emergentes en agua, recurso natural en riesgo

El consumo desmesurado de agua, el desarrollo industrial y la agricultura intensiva han conducido a problemas de escasez, desperdicio y contaminación del recurso hídrico, que aunado con la ausencia de una gestión adecuada del agua residual agravan la situación. Es tal la relevancia de este tema que está incluido entre los Objetivos de Desarrollo Sustentable de la ONU y está interrelacionado con varios de ellos. En México, la descarga de aguas residuales, tratadas y/o sin tratamiento previo, de uso doméstico, industrial y agropecuario en cuerpos de agua (río, lagos y mares) es una actividad constante que pone en grave peligro la salud de la población y la integridad de los ecosistemas. Por esta razón, uno de los objetivos prioritarios del Programa Nacional Hídrico 2020-2024 es “Reducir la contaminación del recurso por descargas de aguas residuales”

[PNH, 2019]. El agua descargada en los cuerpos de agua contiene un gran número de contaminantes y otras sustancias tóxicas. De acuerdo con la RAE, un contaminante “es una sustancia que altera nocivamente la pureza o las condiciones normales de un medio por agentes químicos o físicos”. Entre estos contaminantes se incluyen bacterias (como *Escherichia coli*), algas, metales pesados (como cromo, mercurio, arsénico o plomo), agentes tóxicos (como pesticidas, solventes, plaguicidas), entre otros. Estos contaminantes pueden causar desde enfermedades gastrointestinales hasta enfermedades crónicas, dependiendo del tipo de contaminante, el tipo de contacto con el contaminante (cutáneo, inhalación, vía oral) y la concentración de este. Sin embargo, se han identificado otras sustancias químicas que no se monitorean habitualmente en el medio ambiente, pero que tienen el potencial de entrar en este y causar efectos adversos, conocidos o sospechosos, en la ecología y/o la salud humana. Estas sustancias se conocen como **contaminantes emergentes** (CE) e incluyen tensoactivos (como el jabón), retardadores de flama, productos farmacéuticos (analgésicos, antiinflamatorios, antibióticos, hormonas, entre otros) y de cuidado personal (cosméticos, protectores solares, perfumes), solventes (como el benceno, tolueno, xileno, tetracloroetileno, entre otros), biocidas, plaguicidas, entre muchos otros compuestos [Olatunde y col., 2020; Norman SusDat, 2023]. Muchas de estas sustancias (tanto contaminantes como CE) son persistentes a tratamientos biológicos y químicos del agua, es decir, son recalcitrantes. En cualquier caso, los contaminantes causan el deterioro de la calidad del agua y conllevan graves problemas de salud, cuando esta se consume de forma directa (agua potable) o indirecta (a través

de la cadena trófica). Los CE, presentes en el agua a baja concentración (nano a miligramo por cada litro), son bioacumulables y tienen alto potencial para alterar el metabolismo endocrino del cuerpo humano y de las especies.

Un ejemplo de lo anterior es la presencia de fármacos en mantos acuíferos, ya que los fármacos no son completamente metabolizados por los seres vivos (tanto personas como animales), por lo que una cantidad de sustancia activa se desecha a través de la orina y heces, y entra a las aguas residuales domésticas. Los CE presentan un gran reto para su eliminación debido a su gran diversidad (ya que generalmente se encuentran en mezclas), a sus características no biodegradables y a la dificultad para su identificación y evaluación. Aunado a esto, las plantas de tratamiento de aguas residuales (PTAR) no poseen la tecnología que permita la eliminación completa de los CE, por lo que el agua tratada contiene CE en bajas concentraciones (o compuestos derivados de los contaminantes que son aún más tóxicos) y no cumple con las características adecuadas para su reúso o descarga en mantos acuíferos. Sin embargo, en muchas ocasiones esta agua puede ser empleada para riego agrícola. De esta forma, los CE se bioacumulan en los cultivos y regresan eventualmente a la cadena alimenticia, como se esquematiza en la Figura 1.

La descarga de aguas residuales (conteniendo mezclas de CE) en mantos acuíferos pone en riesgo a los ecosistemas. Un ejemplo de esto es que los CE son fácilmente absorbidos por los peces a través de distintos mecanismos: respiración acuática, transferencia maternal en reservas lipídicas de huevos y por la osmorregulación. La exposición cons-

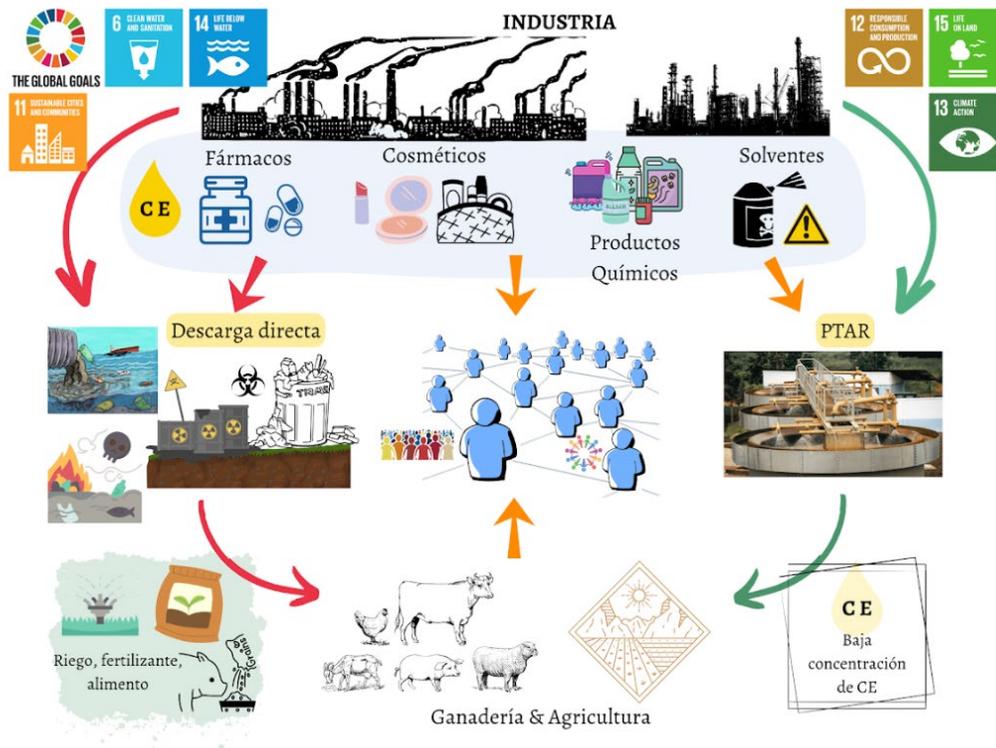


Figura 1. Ciclo de los CE

tante de los CE puede causar alteraciones en la composición de sustancias nutritivas para los embriones (inducción vitelogénica anormal), alteración en la determinación del sexo, decremento en las velocidades de crecimiento, reproducción retardada y alteraciones en el comportamiento de los peces. La penetración y acumulación de CE en ecosistemas acuáticos ocurre a bajas concentraciones de CE (ng/L a mg/L) y pueden tener impactos en los consumidores finales. Los CE son altamente persistentes en los medios acuáticos y tienen el potencial de causar desórdenes metabólicos y reproductivos para los humanos, generando impactos importantes en la salud.

En México se han identificado 174 distintos CE en aguas residuales, superficiales y subterráneas por estudios desarrollados en el periodo de 2007-2021 [Vázquez-Tapia y col., 2022]. Dentro de los compuestos identifica-

dos destacan fármacos, hormonas, plastificantes, productos para el cuidado personal, edulcorantes, drogas y pesticidas. En aguas residuales se han identificado ibuprofeno, naproxeno, diclofenaco, acetaminofén, gemfibrozil, carbamazepina, triclosán, atenolol y 4-nitrofenol. De estos fármacos, el acetaminofén y naproxeno son empleados para el dolor y de venta libre, y se encontraron las concentraciones de 67.2 µg/L y 18.6 µg/L, respectivamente.

Tecnologías para la eliminación de EC

Existen diferentes tecnologías para la remoción o degradación de CE presentes en el agua. Estas tecnologías incluyen la nano y microfiltración, osmosis, adsorción y los procesos avanzados de oxidación [Orozco-Bandala, 2022]. Sin embargo, son tecnologías costosas y su incorporación en plantas de tratamiento resulta poco rentable para los

prestadores de servicios en las condiciones actuales. Es entonces necesario el desarrollo de tecnologías emergentes para la eliminación de CE, incrementando la calidad del agua tratada para que esta pueda ser reusada optimizando su uso, sin poner en peligro la salud humana y de los ecosistemas. Dentro de las tecnologías emergentes se incluyen los procesos avanzados de oxidación, PAOs.

Los PAOs son aquellos que involucran la formación de radicales hidroxilos ($\text{HO}\cdot$), que son especies altamente oxidantes y que pueden generarse por diferentes medios, como ozono (O_3), ozono/radiación UV (O_3/UV), fotólisis de agua ($\text{H}_2\text{O}/\text{UV}$) y del peróxido de hidrógeno ($\text{H}_2\text{O}_2/\text{UV}$), agentes químicos y medios catalíticos. Dentro de los PAOs se encuentra la fotocatalisis heterogénea, que se basa en la activación mediante iluminación (o foto-activación) de un material semiconductor (en nuestro caso utilizamos como catalizador Ga_2O_3). Al absorber una cantidad de energía mayor o igual a su banda de energía prohibida (E_{bp}), en el catalizador se promueve un electrón (e^-) de la banda de valencia (BV) a la banda de conducción (BC), generando un hueco (h^+) en la banda de valencia. El par electrón-hueco participa en reacciones de óxido-reducción para formar radicales hidroxilos, que son capaces de oxidar los CE hasta la mineralización, es decir, hasta la formación de dióxido de carbono, agua y algún ácido mineral, como se muestra en la Figura 2(a). Actualmente existe un gran esfuerzo de la comunidad científica internacional por desarrollar nanofotocatalizadores que puedan ser activados mediante la radiación solar, es decir, reducir la banda de energía prohibida de los materiales sintetizados (por ejemplo, mediante la incorporación de otros elementos o dopado,

ver Figura 2(b)). Esto podría conllevar a la reducción de costos, ya que no se requerirán de fuentes de iluminación artificial (lámparas). A continuación, se muestran materiales de Ga_2O_3 y Ga_2O_3 dopados con hierro y cobre (relación atómica Ga:M de 95:5) para la degradación fotocatalítica del fármaco acetaminofén.

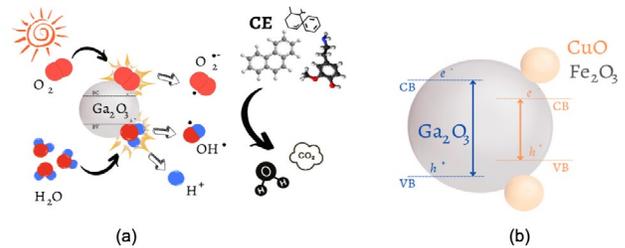


Figura 2. (a) Proceso de fotocatalisis heterogénea con el semiconductor Ga_2O_3 y (b) Ga_2O_3 dopado con iones de Cu y Fe

Materiales a base de galio para mejoramiento ambiental

Existen una gran variedad de materiales con propiedades fotocatalíticas que se han empleado para la degradación de CE. Un ejemplo de materiales fotocatalíticos son los óxidos de galio (Ga_2O_3), que poseen propiedades fotocatalíticas y han sido probados satisfactoriamente para la degradación de contaminantes [Orozco y col. 2022, Orozco y col. 2023]. En la Figuras 3(a), 3(b) y 3(c) se muestra una micrografía de los óxidos de galio (Ga_2O_3), óxidos de galio dopados con Cu ($\text{Cu}/\text{Ga}_2\text{O}_3$) y óxidos de galio dopados con Fe ($\text{Fe}/\text{Ga}_2\text{O}_3$), respectivamente. Los óxidos de galio sin dopar y con dopaje fueron sintetizados a partir de metal líquido de galio

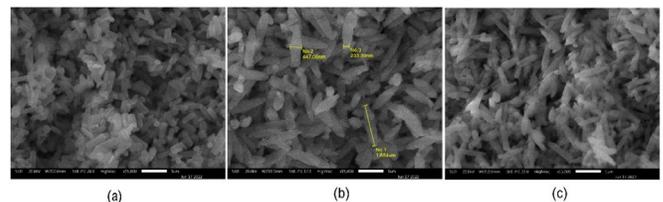


Figura 3. Morfología de los materiales para remediación ambiental (a) Ga_2O_3 , (b) $\text{Cu}/\text{Ga}_2\text{O}_3$ y (c) $\text{Fe}/\text{Ga}_2\text{O}_3$

recuperado de aplicaciones en el área de magnetohidrodinámica y microfluídica que se investigan en el IIM Unidad Morelia. La síntesis se realizó mediante un transductor ultrasónico. Los oxi-hidróxidos de galio obtenidos se secaron y se sometieron a un tratamiento térmico a 950 °C por 3 horas para obtener la fase cristalina β , que corresponde a su fase más estable. Los β -Ga₂O₃ presentan una forma de nanobarras (con dimensiones aproximadas de 160×600 nm), como se puede ver en la Figura 3(a). Los óxidos de galio dopados con Cu y Fe (Cu/Ga₂O₃ y Fe/Ga₂O₃) conservan la morfología de nanobarras con punta alargada y de mayor tamaño (aproximadamente 450×1650 nm), ver Figura 3(b) y 3(c).

Los materiales fotocatalíticos de Ga₂O₃, Cu/Ga₂O₃ y Fe/Ga₂O₃ fueron aplicados en la degradación de un CE, el acetaminofén (AC), a una concentración de 12 mg L⁻¹. El proceso de degradación fotocatalítica con el material Ga₂O₃ se llevó a cabo con una fuente de iluminación que simula la emisión del espectro de la radiación solar (320-700 nm, ver recuadro en la Figura 4(a)) de baja potencia (13 W) y bajo condiciones óptimas [Orozco y col. 2023]. Los resultados de

degradación fotocatalítica se muestran en la Figura 4(a). Como se puede observar la degradación fue de aproximadamente un 80 %, con un 42 % de mineralización. Esto demuestra la eficacia del proceso de fotocatalisis heterogénea, ya que no solo se degrada el CE, sino que se transforma en productos inocuos al ambiente, como son CO₂ y H₂O. De igual manera, los materiales Ga₂O₃, Cu/Ga₂O₃ y Fe/Ga₂O₃ fueron aplicados también para la degradación del AC, pero en este caso bajo iluminación visible (400-700 nm, ver recuadro en la Figura 4(b)). Los resultados demuestran que los óxidos de galio, con una E_{bp} =4.56 eV, no tienen actividad fotocatalítica en la región visible del espectro, ya que la degradación de AC fue del 2 %. Por el contrario, los materiales de Ga₂O₃ dopados con Cu y Fe (E_{bp} =3.75 y 3.68 eV, respectivamente) tienen actividad catalítica, logrando la degradación de un 80 % del AC y mineralizaciones que alcanzan 61.5 y 58 %, respectivamente.

Comentarios finales

La presencia de los CE en aguas tratadas y/o sin tratamiento previo constituyen un riesgo para la salud de la población y de

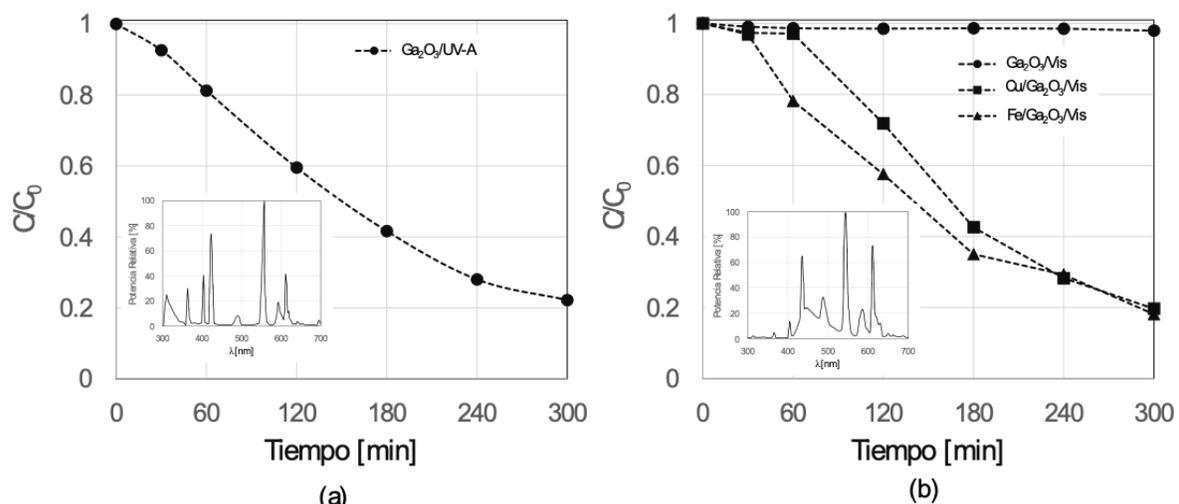


Figura 4. Degradación fotocatalítica del CE de acetaminofén bajo condiciones de iluminación (a) UV-A y (b) visible

los ecosistemas, ya que, si bien se tienen indicios de los efectos que estos implican para la salud, aún es incierto su potencial toxicidad. Por lo tanto, es importante la investigación de procesos para su eliminación y que además estos procesos resulten viables desde el punto de vista técnico, económico y ambiental, para que sea posible su integración en PTAR. La fotocatalisis heterogénea es un proceso ya aplicado a nivel industrial y que ha demostrado alta eficacia, no solo para degradar, sino para la transformación de moléculas altamente complejas y recalcitrantes a CO_2 y H_2O [Solwater]. Es importante mencionar que el desarrollo de materiales es crucial para que el proceso de fotocatalisis se lleve a cabo con energía solar y que resulte viable en términos económicos y ambientales. Finalmente, los óxidos de galio dopados con metales como Cu y Fe permitirán el uso eficaz de la radiación solar, ya que se pueden activar con luz visible y mostraron un porcentaje superior de mineralización que los materiales sin dopar.

Referencias

PNH. 2019, Programa Nacional Hídrico 2020-2024. Disponible: <https://www.gob.mx/conagua/articulos/consulta-para-el-del-programa-nacional-hidrico-2019-2024-190499>

Olatunde, O.C., Kuvarega, A.T., Onwudiwe, D.C. 2020 Photo enhanced degradation of contaminants of emerging concern in waste water, *Emerging Contaminants* 6, 283-302. <https://doi.org/10.1016/j.emcon.2020.07.006>

Norman-SusDat. 2023. Network of reference laboratories, research centers and related organizations for monitoring of emerging environmental substances. Disponible: <https://www.norman-network.com/nds/susdat/>

Orozco, S., Bandala, E. 2022. "Remediación Ambiental" en "Temas selectos en ciencia de materiales y nanotecnología". Capítulo 3. ISBN: 978-607-30-6216-9. <https://www.iim.unam.mx/temasselectos/>

Vázquez-Tapia, Ivón, Salazar Martínez, Tania, Acosta-Castro, Mariana, Meléndez-Castolo, Andrea, Mahlkecht, Jürguen, Cervantes-Avilés, Pabel, Capparelli, Mariana, Mora, Abraham. 2022 Occurrence of emerging organic contaminants and endocrine disruptors in different water compartments

in Mexico- A Review. *Chemosphere*, 308:136285 V and Visible Light. *Frontiers Environmental Science* 10:884758. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2022.136285>

Orozco, S., Rivero, M., Montiel, E., Espino Valencia J., 2022. Gallium Oxides Photocatalysts Doped with Fe Ions for Discoloration of Rhodamine Under UV and Visible Light. *Frontiers Environmental Science* 10:884758. <https://doi.org/10.3389/fenvs.2022.884758>

Orozco, S., Espino Valencia J. Rivero, M., 2023. Effect of copper salt on the synthesis of copper-doped gallium metal liquid based photocatalyst (Cu/Ga₂O₃), and its application in acetaminophen photodegradation. *Catalysis Communications* 183:106779. <https://doi.org/10.1016/j.cattcom.2023.106779>

Tratamiento Solar de Agua (Solwater) Plataforma Solar de Almería. Disponible en: https://www.psa.es/es/instalaciones/tratamiento_de_agua/solwater.php

Apoyo a la docencia: El Sol está compuesto de colores: espectroscopía

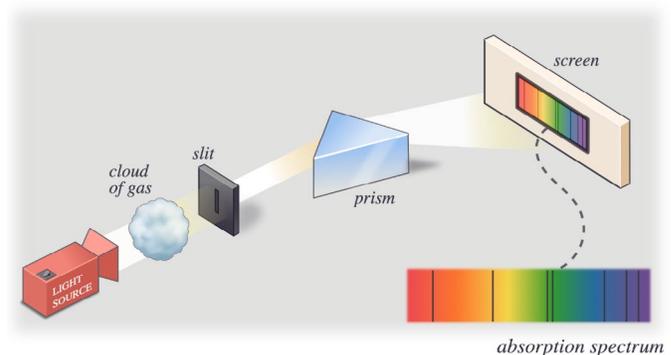
Karla Mónica Tufiño Villegas

Facultad de Química, UNAM. Circuito escolar S/N, Ciudad Universitaria, Coyoacán, CDMX 04510 México
kmtv2608@gmail.com

El color del Sol puede ser blanco, amarillo, naranja, rojo... todo depende del ojo –o telescopio– con el que se mire. Esto (en sí mismo) ya es un buen tema de discusión, pero la cuestión a examinar ahora es otra: Hay colores que nos pueden decir de qué está hecho el Sol. Y no solo el Sol, sino muchos otros cuerpos en el universo y sustancias en nuestro planeta.

¿Por qué vemos los arcoíris? ¿Por qué el cielo es azul? Estas son preguntas que pueden responderse gracias a la rama de la ciencia llamada espectroscopía, la cual se dedica a estudiar la luz y su interacción con la materia [1].

Su principal herramienta es un instrumento llamado espectroscopio: la luz que emite algún objeto pasa a través de este y genera un espectro, algo así como un arcoíris. Cada sustancia genera uno, con espacios “vacíos” en diferentes regiones. Con esto se identifican los elementos químicos y son como su huella dactilar, ya que el espectro es propio para cada uno de ellos. Esto también puede ayudarnos a estudiar muchos fenómenos e incluso a construir telescopios que vean cada vez más lejos.



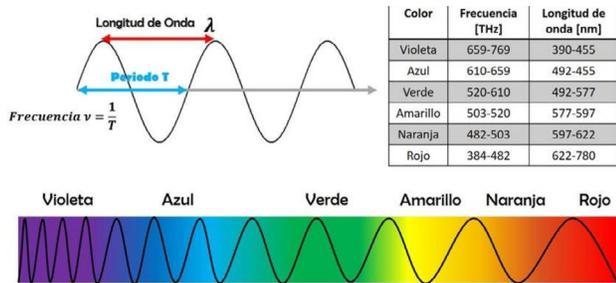
Funcionamiento de un espectroscopio.

Koski, K. Three kinds of spectra. [Imagen]. LibreTexts Chemistry, UC Davis.

¿A qué se debe?

La luz es parte del espectro electromagnético, que es el conjunto de radiaciones con un campo eléctrico y magnético que emiten energía. Dicho de otra manera, son las diferentes frecuencias de la energía que provienen de fuentes de todo tipo: las microondas, los rayos x, las ondas de radio, la luz ultravioleta “UV” (que sabemos que el Sol emite y hay que protegerse de ella, por ejemplo, al exponerse al Sol por mucho tiempo o al mirar un eclipse solar) y la luz infrarroja “IR” (como aquellos termómetros infrarrojo tan populares durante la reciente pandemia) y hasta los mismos colores.

Los colores son parte de la región visible de este espectro. Cada color tiene una frecuencia distinta. Con esto podemos entender el concepto de longitud de onda, que es la distancia entre cada punto equivalente en una onda (distancia entre dos de los puntos más altos o entre dos de los puntos más bajos). Hay colores que son de mayor energía, ya que viajan a mayor frecuencia que otros (como el azul) y por eso sus ondas tienen poco espacio entre ellas: puedes meter más ondas de estas en un determinado tiempo, ya que no tardan mucho en volver a su punto inicial. Por el otro lado, el color rojo viaja a menor frecuencia y sus ondas son más extendidas, ya que son de energía más baja.



Representación del espectro electromagnético en la región de luz visible. [Imagen]. Ibarra-Villalon, H. E. (2019)

La luz blanca está compuesta por colores, tal como Isaac Newton lo descubrió al hacerla pasar por un prisma de geometría determinada y ver cómo se descomponía en colores [2].

Gracias al uso de estos instrumentos ópticos y a los estudios que permitieron realizar se logró conocer, por ejemplo, que el Sol está compuesto en gran parte por helio [3]. En 1868, el astrónomo Pierre Janssen observó un eclipse solar a través de un espectroscopio y pudo identificar un espectro que no había sido registrado antes. Lo llamó helio, precisamente porque era un elemento observable en la luz del Sol (y porque en la mitología griega Helios era la deidad solar).

Nos queda entonces claro que estudiar la luz es útil para diversas áreas de la ciencia como la física, la astronomía, la química e incluso la biología. La interacción de la luz y la materia influyen en nuestra percepción del mundo y, aunque cierta región del espectro electromagnético es visible para los humanos, no quiere decir que sea de la misma manera para otras especies. Algunas abejas, por ejemplo, ven al mundo en colores diferentes a los humanos [4]. La ciencia ha estudiado cómo las flores reflejan cierto tipo de radiación UV, y que polinizadores como las abejas o algunas aves suelen ver mejor este tipo de radiación. Pero los insectos como las mariposas, polillas, moscos y muchos otros ven, cada uno, un espectro diferente de la región que abarca desde el UV, todos los colores (desde el violeta hasta el rojo) y hasta el IR.



Diferencia de cómo percibimos nosotros los colores y cómo lo hacen las abejas. [Imagen]. RTVE.

Eso no quiere decir que la capacidad de nuestros ojos para observar el mundo sea limitada, simplemente nos permite ver lo que, para nosotros y nosotras es útil ver (así como para las abejas y demás insectos).

Al participar en observaciones solares como vocal en Nibiru (la sociedad astronómica de la Facultad de Ciencias de la UNAM)

Llevamos telescopios, siempre con un filtro especial para poder ver el Sol. Frecuentemente, el público observador se lleva una sorpresa al ver que el Sol “no es una esfera ardiente (como vemos en algunas imágenes de internet)”. A veces nos preguntan si eso que están viendo en realidad es el Sol o si es el de las imágenes de internet, “ya que se ven muy diferentes”. Les digo que ambas imágenes son reales, “ambos son el mismo Sol”. Lo que cambia es la forma a través de la cual lo observamos: telescopio, lentes con filtros especiales, cámara, etc. Incluso si lo observamos con el mismo telescopio, pero con filtros hechos de materiales diferentes, se pueden apreciar diferentes longitudes de onda y diferentes detalles.

En la foto se aprecia el Sol de manera muy similar a como lo hacemos en las observaciones abiertas al público. Los filtros que menciono están hechos de diferentes materiales (y de esto dependerá poder observar manchas, llamaradas solares u otros fenómenos que ocurren en la superficie de nuestra estrella).



Foto del Sol tomada con telescopio Seestar S50. Tomada por Uriel Yafté Sánchez Almaguer

Cuando hacemos observaciones (ya sean solares o nocturnas) u otro tipo de actividades, surgen este tipo de preguntas que hacen que una misma se cuestione lo que conoce. Por eso me gusta hacer divulgación en espacios públicos, cualquiera puede participar y llevarse un poquito de conocimiento nuevo.

Construye un espectroscopio en casa

Materiales:

- CD o DVD (que ya no uses)
- Cinta adhesiva transparente
- Un cutter (manejar con cuidado)
- Tubo de cartón de cualquier tamaño (puedes utilizar el del papel de baño o el de las servitoallas)
- Tijeras
- Cartulina (de preferencia negra)
- Un lápiz
- Cinta adhesiva negra
- Regla

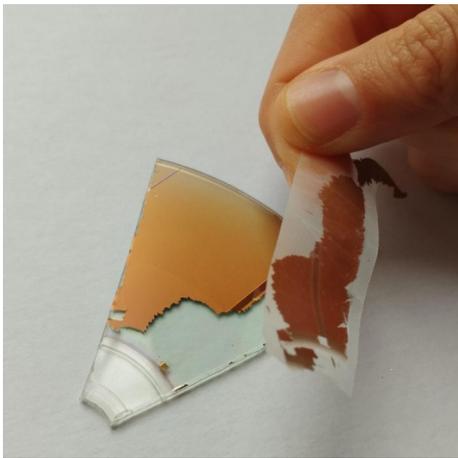
Procedimiento [5]:

Puedes pedir ayuda si se te dificulta recortar, ya que los CDs pueden ser filosos una vez cortados.

1) Toma el CD o DVD y haz un corte, de la orilla hacia adentro.



2) Separa (con tus manos y con mucho cuidado) las dos capas del disco, tendrás una capa metálica y una transparente. En caso de que el CD no se separe de esta manera, toma un cutter y raspa un poco la parte metálica. Una vez que puedas ver a través de él, toma cinta adhesiva transparente y pégala sobre lo que acabas de raspar. Pégalo muy bien y luego despégalo, de esta manera irás quitando poco a poco la capa metálica y tendrás solo la parte transparente.



3) En la capa transparente haz dos cortes, tal como si fueras a cortar el disco en 4 o 6 partes, pero en realidad cortarás solamente una. Este recorte debe tener la forma de una rebanada de pizza.

4) Para crear dos tapas para el tubo, traza en una cartulina la base del rollo de cartón por duplicado.

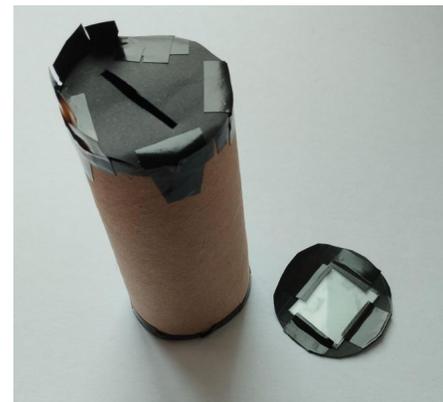
5) Con la cinta adhesiva negra forra el interior del tubo de cartón, esto es con la finalidad de que sea lo más oscuro posible.

6) Utilizando una regla y el cutter, corta una pequeña línea en una de las tapas de cartulina. Debe ser muy delgada, pero aún debe permitir el paso de la luz.

7) En medio de la otra tapa recorta un cuadro, previamente trazado con la regla. Debe ser lo más grande que se pueda sin romper la tapa.



8) Toma el pedazo que recortaste del CD o DVD y asegúrate de que encaje con el tamaño de la tapa para el tubo (y el cuadro que recortaste en una de ellas).



9) Pega el pedazo del CD o DVD a la tapa usando cinta adhesiva transparente.

10) Pega la tapa con la pequeña línea (o rendija) al tubo de cartón usando cinta adhesiva negra.

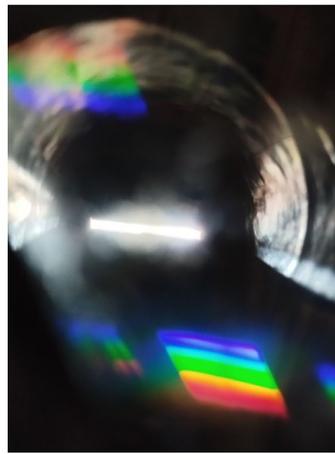
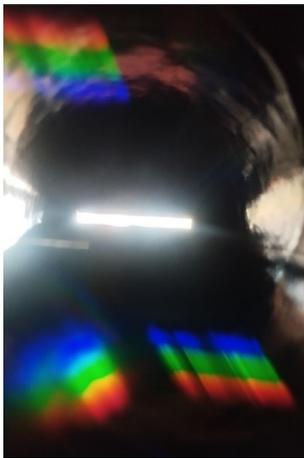
11) Colócate frente a una lámpara o alguna otra fuente de luz (pero que no sea el Sol) y sostén el tubo de manera que la rendija esté en posición horizontal. Esta tapa quedará más lejos de tu ojo (la otra base del tubo es la que colocarás frente a tu ojo). Toma la tapa con el CD y ponla en la base del tubo que tienes frente a tu ojo.

12) Prueba en qué posición se ve mejor el espectro. Se verán líneas de colores, intenta alinearlas para que se vean del mayor tamaño posible.

13) Cuando la encuentres, pega la tapa al tubo en esa posición.



¡Listo! Has construido tu propio espectroscopio casero. Prueba observando a diferentes objetos que emitan luz a través de este instrumento. Nunca intentes ver al Sol directamente. Lo que sí puedes hacer es observar en superficies que reflejen su luz.



¿Qué está sucediendo?

En este caso, el CD actúa como una rejilla de difracción [6]. La difracción es el fenómeno en el cual la luz se desvía por irregularidades en una superficie. El CD dispersa –o descompone– la radiación que vemos en forma de luz, y como la luz está compuesta por diferentes longitudes de onda, colores, o regiones del espectro visible, podemos ver cómo cada fuente de luz tiene diferentes espectros.

Como anteriormente discutimos, este tipo de instrumentos, entre más sofisticados, permiten estudiar más cosas dentro de nuestro mundo, ¡y también fuera de él! Esta es una herramienta con usos tan amplios y en tan diversas ramas de la ciencia... nos enseña que algo tan cotidiano, como lo son la luz y los colores, esconden mucha información esencial para nuestro entendimiento de incontables fenómenos.

Referencias

- [1] Cantellano, M. A. G., & Zetina, L. M. M. (2015). La espectroscopia y su tecnología: Un repaso histórico y su importancia para el siglo XXI. *Latin-American Journal of Physics Education*, 9(4), 13.
- [2] Guerlac, H. (1986). Can there Be Colors in the Dark? *Physical Color Theory before Newton*. *Journal of the History of Ideas*, 47(1), 3–20. <https://doi.org/10.2307/2709592>
- [3] Arkharov, A. M. (1995). Helium: History of its discovery, technology of its liquefaction, areas of its application. *Chemical and Petroleum Engineering*, 31, 50-60.
- [4] Peter G. Kevan, Lars Chittka, Adrian G. Dyer; Limits to the salience of ultraviolet: lessons from colour vision in bees and birds. *J Exp Biol* 15 July 2001; 204 (14): 2571–2580. doi: <https://doi.org/10.1242/jeb.204.14.2571>
- [5] Cambridge University Astronomy (2021). Build your own spectroscope (kids crafting activity) | Cambridge Festival 2021 [Video]. Youtube https://www.youtube.com/watch?v=fW4aMOSVv_8&ab_channel=CambridgeUniversityAstronomy
- [6] Veras, G., Silva, E. C., Lyra, W. S., Soares, S. F. C., Guerreiro, T. B., & Santos, S. R. B. (2009). A portable, inexpensive and microcontrolled spectrophotometer based on white LED as light source and CD media as diffraction grid. *Talanta*, 77(3), 1155-1159.
- [7] Morán, L. (2023) ¿De qué color es nuestro sol? Ciencia UNAM.
- [8] Koski, K. *The Dawn of the Quantum Theory*. UC Davis.
- [9] Ibarra-Villalon, H. E. (2019) ¿Por qué el cielo es azul?.
- [10] D.S. (2010) Una base de datos refleja el mecanismo de visión ultravioleta de las abejas. RTVE.es.

Su opinión es importante para nosotros. Puede hacernos llegar comentarios, dudas y aportaciones por medio de las vías institucionales y al correo electrónico: revista@materiales.unam.mx

Le haremos llegar sus preguntas a los respectivos autores. Si tiene interés en publicar con nosotros, le invitamos a conocer los lineamientos editoriales en nuestra página: <https://revista.iim.unam.mx/>



Instituto de
Investigaciones
en Materiales