

Reseña: Sobre humanos, materiales y de cómo nos transformamos unos a otros

Santiago Torres

Biografía: Las Trimates

Eduardo Casas Hernández

Noticias: Con *aliento* a COVID, Fosfacenos, Nanotecnología aplicada al SARS, Permafrost mortal, Tricapas de grafeno superconductoras y Lucha contra el Sida

Charlas superficiales

Violeta A. Márquez Cruz

Simulación computacional de aleaciones metálicas amorfas

Alejandro de León Piña,

Renela María Valladares Mc Nelis

Catalizadores heterogéneos multi-componentes y su aplicación en la industria de transformación de hidrocarburos

Diego Valencia

Irlanda en la Alta Edad Media

José Luis Álvarez García

Blindajes balísticos compuestos Inspirados en la naturaleza

Yessica Lizbeth Avila Avila,

Ricardo Martínez Villa,

Gabriel Ángel Lara Rodríguez

Corrosión en vidrios metálicos

Andrés Guillermo Soriano Carranza,

Araceli Espinoza Vázquez,

Francisco J. Rodríguez Gómez,

Ignacio Alejandro Figueroa Vargas

Nanocapa SakCu®:

Diseño conceptual y desarrollo

J. M. Bello-Lopez, P. Silva-Bermudez,

G. Prado, C. Ramos-Vilchis, A. Martínez,

R. de la Torre, Gabriela Ibáñez-Cervantes,

Mónica Alethia Cureño-Díaz,

A. Almaguer-Flores, S. E. Rodil

En búsqueda de nuevos materiales superconductores

Doroteo Mendoza López

Producción fotocatalítica de hidrógeno a partir de agua

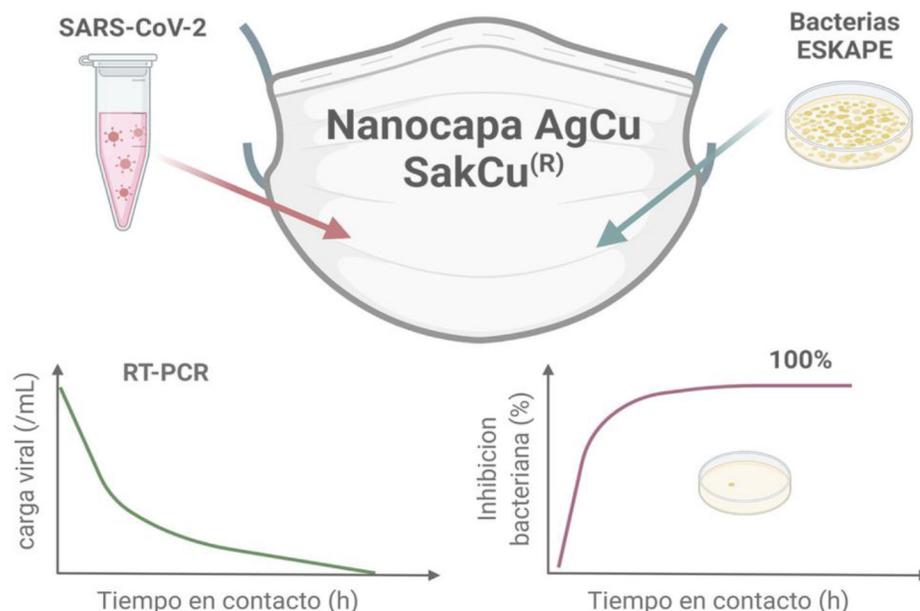
David Ramírez-Ortega, Diana Guerrero-Araque,

Próspero Acevedo-Peña, Rodolfo Zanella

Material de apoyo a la docencia:

Mejores prácticas para impartir clases en línea

Arte: Esculturas caligráficas y caligramas de Elisa Salas





Universidad Nacional Autónoma de México

Enrique Graue Wiechers
Rector

Leonardo Lomelí Vanegas
Secretario General

William Henry Lee Alardín
Coordinador de la Investigación Científica

Instituto de Investigaciones en Materiales

José Israel Betancourt Reyes
Director

Ilich Argel Ibarra Alvarado
Secretario Académico

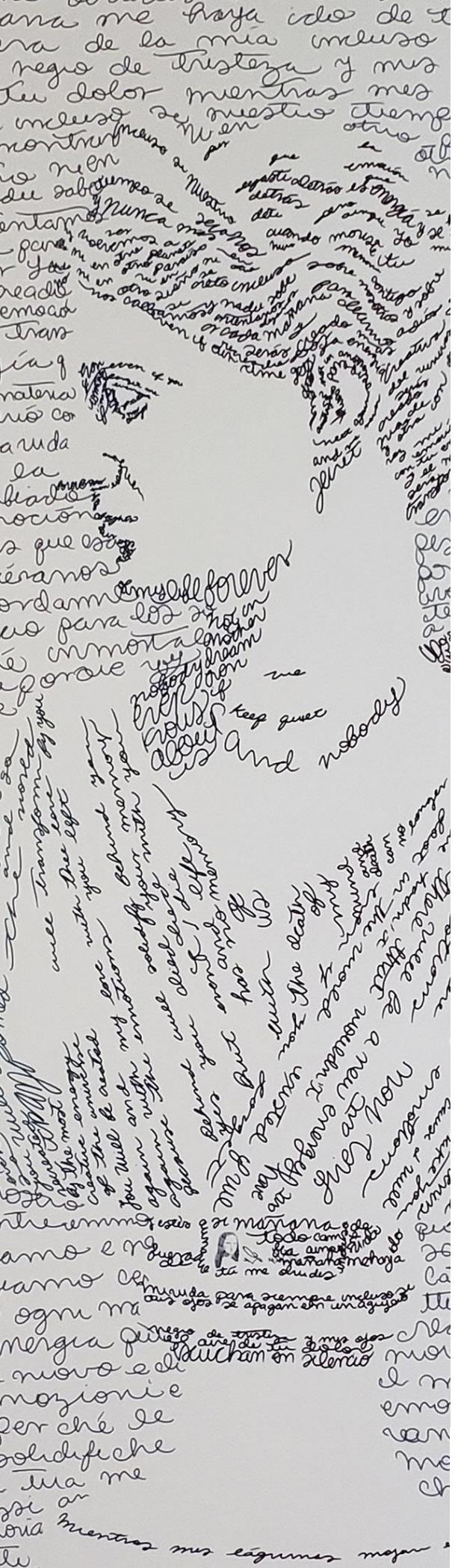
Estrella Ramos Peña
Editora responsable

Astron Rigel Martínez Rosas
Coordinador editorial y de divulgación

Comité Editorial:
Maricela Zapata Arroyo
Yareli Rojas Aguirre
Karina Suárez Alcántara
José Chávez Carvayar
Francisco Morales Leal
Ateet Dutt

Producción:
Editorial IIM
Editor científico: Estrella Ramos Peña
Editor digital: Alberto López Vivas
Esculturas: Elisa Salas
Diseño editorial: Astron Martínez

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.



Presentación

El comité editorial se enorgullece de presentar a ustedes, queridos lectores, el número 35 de nuestra revista. El contenido de este número es abundante y muy variado, algo que agradecemos a las múltiples contribuciones de nuestros colaboradores que comparten con ustedes a través de nuestra revista. De verdad, muchas gracias a todos los autores. Presentamos la reseña del libro *The Alchemy of Us, How Humans and Matter Transformed One Another*, en la cual Santiago Torres, egresado del IIM, nos deleita con una narración que invita a la lectura y nos hace notar la relación intrínseca entre la evolución de los materiales y la sociedad humana. En la biografía encontrarán el retrato de tres mujeres científicas cuyo campo de acción es la Biología del comportamiento, seguramente han escuchado de ellas y de ese ingrediente tan femenino en el que se involucran sentimientos, ciencia y primates. Estamos seguros de que esta sección, escrita por Eduardo Casas, les será especialmente conmovedora y podrán percibir su entrega y pasión por el trabajo experimental.

Contamos con varios artículos interesantísimos: una excelente narración acerca de fenómenos relacionados con la Física de superficies, trabajos relacionados con el modelado molecular de materiales, de la forma en la que se pudo preservar el conocimiento en Irlanda antes de la aparición de las primeras universidades, de catalizadores industriales, corrosión, superconductores, espumas metálicas, producción de hidrógeno a partir de agua y, de forma muy especial y con gran orgullo queremos presentar el artículo del cubrebocas SakCu, que es una mascarilla ya implementada que protege de infecciones virales y microbianas, y contiene una nanocapa metálica que fue desarrollada en nuestro Instituto. Este último está narrado como un diario de navegación; seguramente disfrutarán todas estas lecturas tanto como nosotros. El arte de este número corre a cargo de Elisa Salas, sus caligramas y esculturas en ácido poliláctico son interesantes y muy bellas. Al final incluimos un material de apoyo a la docencia para mejorar su experiencia con las clases a distancia.

No nos queda más que agradecer su interés por nuestra revista, invitándolos a que la lean con detenimiento, la disfruten, compartan y se animen a colaborar con los múltiples proyectos y líneas de investigación que tenemos en nuestro Instituto. ¡Bienvenidos!

Editorial

La revista Materiales Avanzados es una publicación semestral con sede en el Instituto de Investigaciones en Materiales de la UNAM. Universidad Nacional Autónoma de México, Avenida Universidad 3000, Ciudad Universitaria, Coyoacán, C.P. 04510, Circuito exterior s/n, Ciudad Universitaria, Alcaldía Coyoacán, México, Tel. 56 22 45 00. CDMX www.iim.unam.mx/revista, editora responsable: Estrella Ramos eramos@iim.unam.mx Reserva de derechos al uso exclusivo del título ante el Instituto Nacional del Derecho de Autor de la Secretaría de Educación Pública 04-2003-041612533600-102. Certificado de licitud de título 12619, certificado de licitud de contenido 10191, expedidos por la Comisión Calificadora de Publicaciones y Revistas Ilustradas de la Secretaría de Gobernación. ISSN 1665-7071.

Correo electrónico materialesavanzados@iim.unam.mx

Índice

3 Presentación

8 Reseña: Sobre humanos, materiales y de cómo nos transformamos unos a otros

Santiago Torres

10 Biografía: Las *Trimates*

Eduardo Casas Hernández

20 Noticias: Con *aliento* a COVID, Fosfacenos, Nanotecnología aplicada al SARS, Permafrost mortal, Tricapas de grafeno superconductoras y Lucha contra el Sida

30 Catalizadores heterogéneos multicomponentes y su aplicación en la industria de transformación de hidrocarburos

Diego Valencia

34 Charlas superficiales

Violeta A. Márquez Cruz

42 Simulación computacional de aleaciones metálicas amorfas

Alejandro de León Piña, Renela María Valladares Mc Nelis

48 Irlanda en la Alta Edad Media

José Luis Álvarez García

56 Corrosión en vidrios metálicos

Andrés Guillermo Soriano Carranza, Araceli Espinoza Vázquez, Francisco J. Rodríguez Gómez, Ignacio Alejandro Figueroa Vargas

62 En búsqueda de nuevos materiales superconductores

Doroteo Mendoza López

70 Blindajes balísticos compuestos inspirados en la naturaleza

Yessica Lizbeth Avila Avila, Ricardo Martínez Villa, Gabriel Ángel Lara Rodríguez

78 Nanocapa SakCu®: Diseño conceptual y desarrollo

*J. M. Bello-Lopez, P. Silva-Bermudez, G. Prado,
C. Ramos-Vilchis, A. Martínez, R. de la Torre,
Gabriela Ibáñez-Cervantes, Mónica Alethia Cureño-Díaz,
A. Almaguer-Flores, S. E. Rodil*

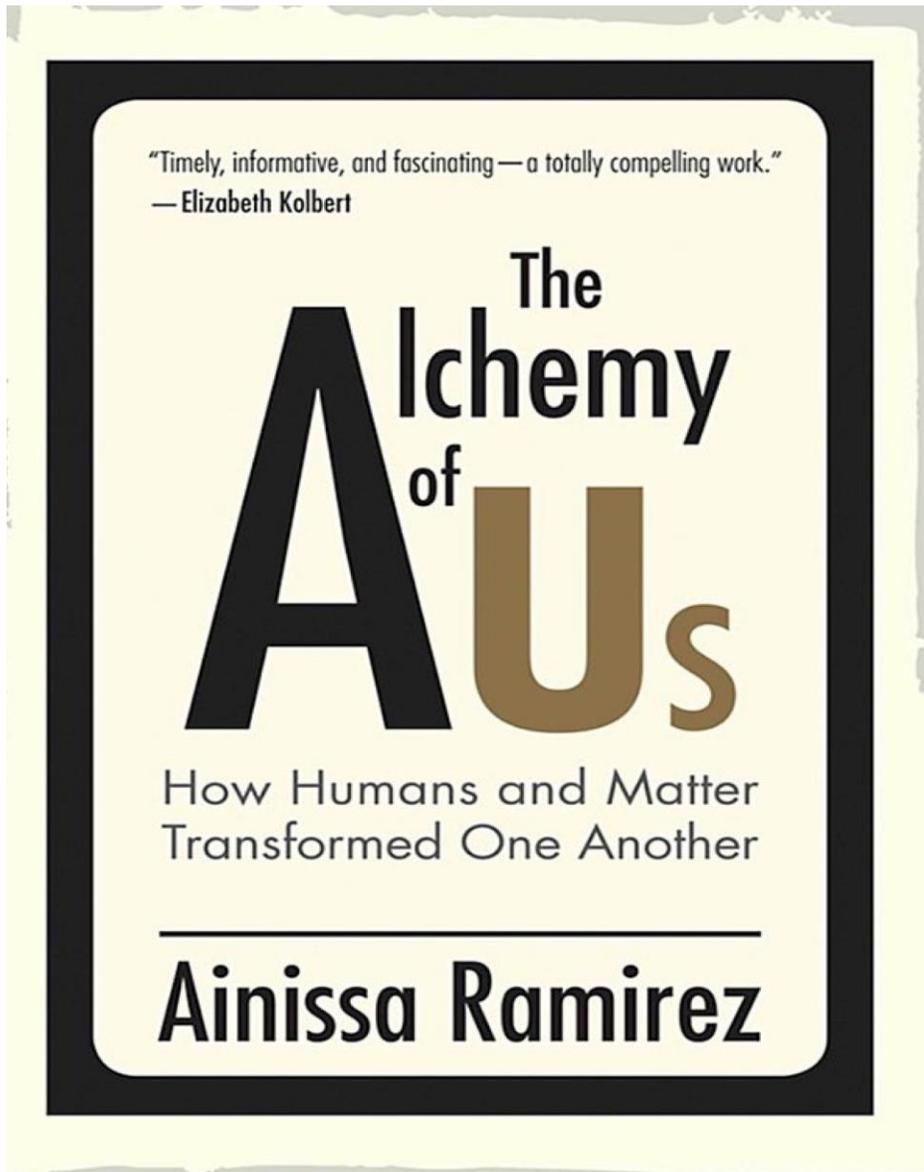
96 Producción fotocatalítica de hidrógeno a partir de agua

*David Ramírez-Ortega, Diana Guerrero-Araque,
Próspero Acevedo-Peña, Rodolfo Zanella*

100 Arte: Esculturas caligráficas y caligramas de Elisa Salas

103 Material de apoyo a la docencia: Mejores prácticas para impartir clases en línea





Reseña

Sobre
humanos,
materiales y
de cómo
nos trans-
formamos
unos a otros

Santiago Torres

Docente de Ciencias en Educación Básica
Activista por los Derechos Político
Electoral de la Comunidad LGBTQ+
en Quinta Roo, México

santioct12@gmail.com

Basta la introducción para darse una idea de lo maravilloso que será este libro. Ainissa, la autora, emplea brillantes analogías entre la Ciencia de los Materiales y su vida en Nueva Jersey. De forma casi autobiográfica narra cómo poco a poco ella se fue maravillando de esta rama científica y, sobre todo, “cómo las personas inventoras fueron dando forma a los materiales, y cómo los materiales fueron dando forma a la cultura”.

Los capítulos del libro llevan por título un *verbo* diferente (transmitir, capturar, descubrir) y a través de estos verbos se nos irá contando cómo la ciencia en general, y la ciencia de materiales en particular, han influenciado cada aspecto de nuestra sociedad. Si gusta de las novelas gustará de esta narrativa en la que se describen con detalle cada uno de los aspectos científicos en los que se desarrollan los diferentes

fragmentos históricos que nos cuentan. Sin perder el hilo secuencial, podemos viajar en el tiempo y transportarnos a épocas diferentes en las cuáles los materiales cobraron una importancia relevante (en torno a los cuales se van desarrollando las tramas). Todo esto sin dejar de lado los aspectos técnicos más interesantes de cada hito científico y cómo su influencia ha forjado aspectos importantes de la sociedad en la que vivimos hoy.

Mi parte favorita del libro es cuando hablan de la muerte del expresidente estadounidense Abraham Lincoln. Se hace una analogía entre la aleación metálica que conforma el acero y este extraordinario personaje de la historia americana; citando a la autora “El acero, una aleación de metal que se oculta a simple vista, sería el gran conector del país (un Abraham Lincoln *en forma material* por decirlo de algún modo)”. También describe a detalle el proceso de producción del acero y su historia de una manera en la que nunca nos lo hubiéramos imaginado, incluyendo varios aspectos del proceso mediante el cual el ingeniero Henry Bessemer ideó aquel proceso siderúrgico conocido por nosotros y que revolucionaría al mundo.

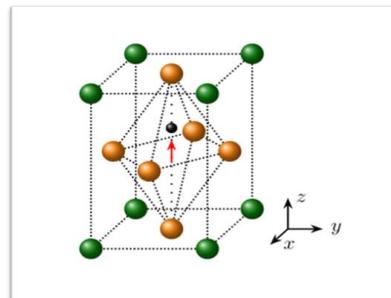
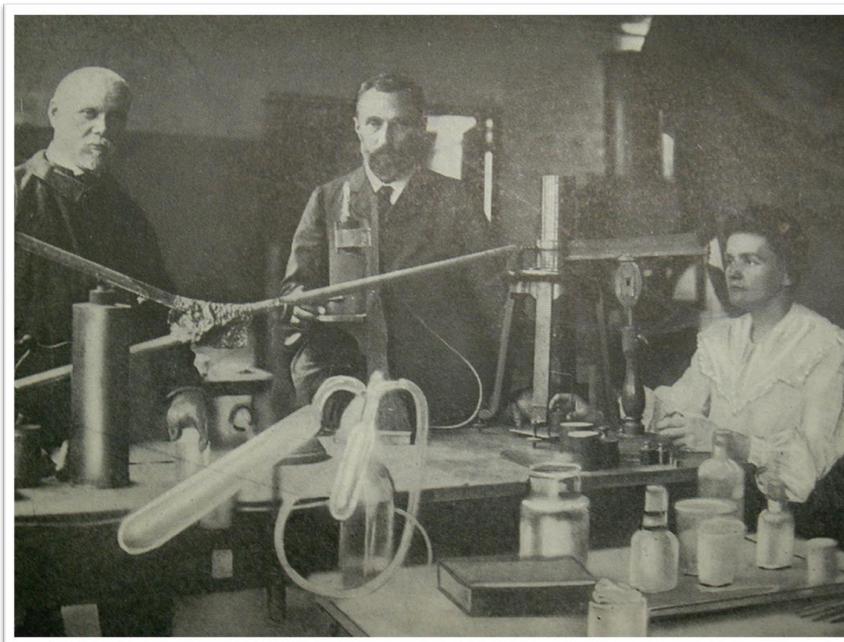
Sobre ciencia básica, una de las cuestiones más interesantes del libro es cuando hablan de los materiales piezoeléctricos. Aquel descubrimiento realizado por los hermanos Jacques y Pierre Curie (foto), a finales del siglo XIX, sorprendió en ese entonces y sigue sorprendiéndonos hasta nuestros días. La autora nos lleva de la mano para conocer interesantes propiedades físicas, termodinámicas y algunas de las aplicaciones que se le han dado a este tipo de materiales a lo largo de la historia.

Leer este libro es sumergirse en la Historia de la ciencia y de los materiales. Aprenderá sobre sus contextos históricos y la fascinante evolución tecnológica. Capítulo tras capítulo se reconstruyen escenas cargadas de sentidos, con detalles científicos que no siempre nos cuentan los historiadores. La narrativa es buena, bastante didáctica al hablar de temas científicos y técnicos, no obstante, se encuentra sesgada exclusivamente a aspectos de la historia estadounidense (si uno no está familiarizado con la historia americana de nuestros vecinos del Norte, quizá necesite un poco más de contexto).

¿Por qué recomiendo el libro? Si formas o formaste parte de la comunidad del Instituto de Materiales como yo, podrás sentirte orgulloso de que lo que estás haciendo ahora, en un futuro, también formará parte de una fascinante historia, iguales a las que se narran en esta edición de divulgación científica. Si no conoces mucho sobre la ciencia de materiales, podrás conocer personajes, inventos y descubrimientos que le dieron forma a algunos hechos icónicos de nuestra historia, y seguro te interesará conocer más allá de lo que leerás en este libro o verás en las clases.

Ramirez, Ainissa. (2020). *The Alchemy of Us, How Humans and Matter Transformed One Another*. Cambridge, Massachusetts, EUA/UK: The MIT Press.

ISBN: 9780262043809





Biografía

Las Trimates

Eduardo Casas Hernández

LAMAT. Comunicación de la ciencia;
Biólogo experimental, Universidad Autónoma Metropolitana
unidad Iztapalapa. Ciudad de México

dino@xanum.uam.mx

De homínidos y primates

¿Te ha ocurrido que en el zoológico o viendo documentales de grandes primates (chimpancés, gorilas y orangutanes) quedas con la sensación de que a estos animales solo les hace falta hablar? En especial cuando los miras a los ojos y te preguntas, ¿qué es lo que estarán pensando? Siendo nuestros parientes más cercanos, desde el punto de vista evolutivo, compartimos fisiología y algunos comportamientos que causan en nosotros gran empatía. ¿Cómo habrán sido nuestros ancestros hace dos millones de años (cuando se separaron del ancestro común de los primates y empezaron a convertirse en seres humanos)? ¿Cuándo adquirieron las habilidades que nos caracterizan a los humanos y surgió la conciencia de nuestra propia existencia?

El paleoantropólogo inglés Louis Leakey dedicó la mayor parte de su vida a desenterrar fósiles de nuestros ancestros en África y aportó un gran conocimiento al estudio de la evolución humana. Sin embargo, si bien contaba con restos óseos e inclusive herramientas, no tenía ninguna evidencia de su comportamiento social, cómo se comunicaban entre sí, cómo colectaban su alimento... y es que como bien apuntaba, “el comportamiento de los homínidos no se fosiliza”. Por eso se planteó estudiar el comportamiento de nuestros parientes actuales, para tratar de entender qué eventos nos llevaron a ser humanos, distinguibles del resto de los animales por la capacidad de “pensar”.

Mientras continuaba con sus investigaciones de campo, formó un equipo abocado al estudio de los grandes primates en su medio natural y la búsqueda de comportamientos y habilidades que nos dieran luz sobre nuestros ancestros. A la larga, el equipo sería conocido como “Las *Trimates*” (o también llamadas “Los Ángeles de Leakey”), un grupo de primatólogas reconocidas internacionalmente: Jane Goodall, Dian Fossey y Biruté Galdikas.



Jane y Flo

Jane Goodall fue la primera de este grupo. Desde pequeña mostró gran interés por los animales y cuando tenía poco más de un año su mamá le regaló un chimpancé de peluche (al que llamó Jubileo, en honor al primero de esa especie nacido en el zoológico de Londres). Jubileo la acompañó en sus viajes la mayor parte de su vida. Jane fue algo diferente a las niñas “normales” de su edad, siempre con una gran curiosidad. Entre sus primeros recuerdos cuenta haberse escondido durante más de 5 horas en el gallinero de su casa para ver cómo una gallina ponía un huevo; por lo mientras, sus padres desesperados la buscaron por todos lados e incluso llamaron a la policía. El Dr. Doolittle y Tarzán eran sus lecturas predilectas, y las disfrutaba encaramada en su árbol favorito. Fue a los ocho años que decidió que quería ir a África.

A los 18 años tomó cursos para ser secretaria y consiguió un trabajo en un estudio de cine que se dedicaba a producir documentales, pero lo cambió por un trabajo de mesera que era mejor pagado. Con este último ahorró lo suficiente para viajar a Kenia y visitar la casa de los padres de una amiga. Ese viaje marcaría su futuro a nivel personal y el de toda la Primatología a nivel mundial.

Ya en África, consiguió un trabajo que le permitiese quedarse allí y tuvo la oportunidad de conocer al Dr. Leakey (que en aquel entonces era el director del Museo de Historia Natural de Kenia). Su gran interés por los animales hizo que el doctor le ofreciera un puesto de secretaria y asistente. Este trabajo le daría la oportunidad de aprender rodeada de naturalistas, y de inmediato lo aceptó. Poco tiempo después, Leakey la invitó a una expedición paleontológica a la Garganta de Olduvai, en Tanzania (donde había trabajado desde 1931, desenterrando restos de ancestros humanos). Durante el viaje se dio cuenta de que Jane era la persona que había estado buscando durante 20 años para desarrollar estudios de campo sobre chimpancés en su hábitat natural: una persona con interés por los animales y su comportamiento, capaz de sobrevivir largo tiempo sin las comodidades del mundo moderno. Y aunque la propia Jane no creía estar preparada para ello, por no contar con una educación formal para la tarea, Leakey consideró que ahí radicaba su gran ventaja. Así podría estudiar a los animales con la mente completamente libre de aquellos prejuicios que, en ocasiones, acompañan la formación académica y universitaria.

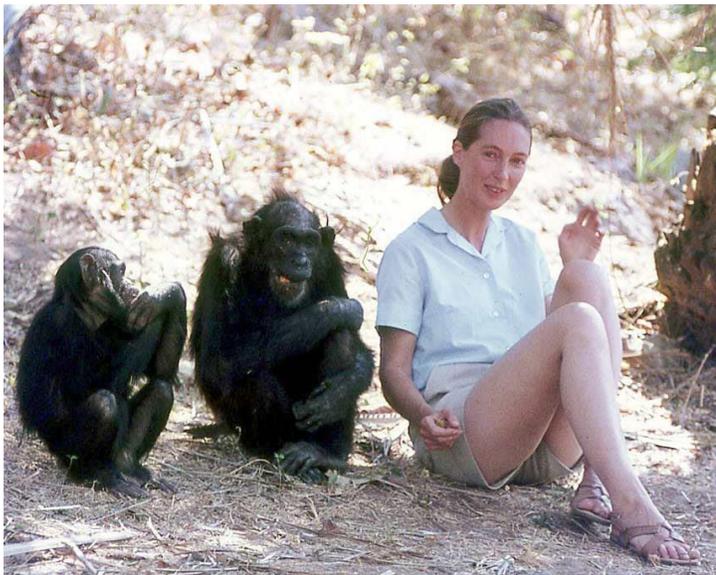
El Dr. Leakey se dio a la tarea de conseguir los apoyos financieros necesarios y todos los permisos legales por parte del gobierno de Tanzania, mientras que Jane se trasladaba a estudiar un grupo de monos en una isla del lago Victoria. Esta enriquecedora estancia le permitió aprender habilidades de campo indispensables, tales como organizar un campamento, elegir la vestimenta adecuada y llevar correctamente una bitácora de notas. También aprendió a relacionarse con los monos, prestando mucha atención a los gestos y movimientos que le permitiesen interactuar con ellos sin que se mostrasen recelosos.

Tiempo después, tras resolver algunos inconvenientes con los pescadores locales y después de un largo tiempo de espera, logró establecer un campamento a orillas del lago Tanganica, en lo que ahora es el Parque Nacional Gombe. Era el año de 1960. Los primeros cinco meses la acompañó su madre, Vanne Goodall, ya que las autoridades no permitían que ningún extranjero permaneciera solo en la selva. Fue ella quien le sirvió de apoyo y fue en este tiempo que Jane descubrió que su vocación definitiva estaba allí.

Desde que inició sus estudios de campo rompió algunas de las reglas básicas establecidas por los etólogos de la época, entre las que se incluían no asignarles nombres propios a los animales ni relacionarse directamente con ellos. Antes era costumbre asignarles un número a los especímenes y era preferible la observación desde una distancia que no permitiese detectar la presencia del investigador por parte del objeto de estudio.

A ella, en cambio, se le ocurrió la idea del “Club de la banana”, una choza en la que dejaba comida para los chimpancés (aunque después tuvo que desmantelarla, por las fieras disputas que en ocasiones se llegaban a presentar entre los primates). Pudo establecer una relación estrecha con estos primates y convertirse, por 22 meses, en el *miembro de la tropa* de más bajo rango. Para reconocerlos empleaba nombres que resaltaban las diferencias entre ellos o que hacían referencia a su comportamiento, sus características o al parecido que tenían con algunos de sus conocidos. McGregor, David Graybeard (el de la barba gris), Goliat, Goblin, Flo y Gremlin fueron algunos de los primeros en ser nombrados.

Mención particular merece la hembra Flo, quien en 1961 aceptó su presencia y le permitió a Jane ver de cerca el cuidado maternal que las chimpancés prodigaban a sus crías. Observó a 5 de las crías desde su nacimiento: Faben, Figan, Fifi, Flint y Flame. También pudo constatar el comportamiento social de estos primates, porque Flo tenía una alta jerarquía dentro del grupo y recibía atenciones especiales por parte de ellos. Cuando la chimpancé murió de vejez, en 1972, algunos periódicos ingleses publicaron obituarios en su memoria, pues para ese entonces se había convertido ya en una celebridad de fama internacional. Desde el principio, los estudios de Jane mostraron características insospechadas acerca del comportamiento de los primates. Estos hicieron que se modificara nuestra forma de ver a los chimpancés y, también, la forma de vernos a nosotros mismos.



Observó que también eran carnívoros, incluso descubrió a una banda de chimpancés cazando crías de jabalí recién nacidos para después compartílos con el resto. El descubrimiento más

importante fue hallar que los chimpancés son capaces de usar y fabricar herramientas. Ellos buscan y seleccionan cuidadosamente las piedras planas que les sirven de yunques y martillos que luego utilizan para abrir nueces silvestres. También son capaces de acondicionar ramitas de árboles (despojándolas de su follaje) para después introducir las en termiteros: las termitas se aferran a la rama y los chimpancés las comen, como quien come una golosina. De hecho, estos insectos constituyen una parte importante de su dieta. En algunas ocasiones pudo observar cómo fabricaban “esponjas” improvisadas (con hojas, que masticaban previamente), mismas que introducían en cavidades de rocas y troncos para poder recuperar el agua contenida en ellos. Hasta ese momento, siempre se había distinguido a los humanos del resto de los animales por ser “los fabricantes de herramientas”. A raíz de los descubrimientos realizados por Jane Goodall, Louis Leakey sugirió que era necesario redefinir el concepto que teníamos de lo que es un ser *humano* o al menos el concepto de *herramienta*, je incluso comenzar a aceptar a los chimpancés como humanos!

Ella también observó el lado agresivo de los chimpancés. Vio cómo cazaban sistemáticamente a primates más pequeños como los colobos y registró las luchas que se producían entre tropas rivales de chimpancés. En algunos sitios fue duramente criticada al compartir públicamente sus observaciones, pues sus estudios proponían que los seres humanos no eran los únicos con rasgos de *personalidad* y tampoco los únicos capaces de mostrar un pensamiento racional y emociones, como la alegría o el dolor.

Continuó su vida académica y en 1966 obtuvo un doctorado por la Universidad de Cambridge con la tesis titulada *Comportamiento de los chimpancés de vida libre*, resumiendo los primeros 5 años de estudio en Gombe. Su trabajo sirvió de modelo y también sentó las bases para las primatólogas Dian Fossey y Biruté Galdikas, cuando fue su turno de estudiar a gorilas y orangutanes, respectivamente.

En 1977 estableció el Instituto Jane Goodall, destinado a apoyar los estudios del centro Gombe de investigación y así, 20 años después de iniciar sus estudios de campo, inició sus labores dedicadas al activismo a favor de la protección de los animales salvajes y sus hábitats, así como por un trato respetuoso hacia todas las especies animales. A la fecha ha recibido innumerables distinciones por su trabajo, pionero en el estudio y la conservación de los grandes primates, labor que hasta la fecha continúa con gran pasión a sus 87 años de edad.

Dian y Digit

Dian Fossey tuvo una infancia marcada por el divorcio de sus padres (a los 6 años) y por el rígido trato que recibió del segundo esposo de su madre, quien nunca le brindó apoyo emocional. Esto la llenó de inseguridades personales que logró subsanar al conectarse estrechamente con los animales, especialmente con los caballos. Incluso llegó a convertirse en una experta amazona ganadora de varias competencias. A sus 19 años, durante unas vacaciones en un rancho de Montana, EUA, reivindicó su amor por los animales y se anotó para tomar un curso de veterinaria en la Universidad de California (en contra de los deseos de su padrastro que pretendía obligarla a estudiar algo relacionado con Economía o Finanzas). A partir de ese momento dejó de recibir apoyo económico de sus padres, por lo que tuvo que desempeñar diversos trabajos como dependienta, laboratorista y obrera. Siguió estudiando y logró terminar una carrera como terapeuta ocupacional, llegando a dedicarse a la atención de niños con discapacidad en un hospital de Louisville, Kentucky.

En 1963 obtuvo un préstamo equivalente a un año de trabajo y con él logró financiar un viaje de siete semanas a África. Sus recuerdos más entrañables fueron en el cráter del Ngorongoro (famoso por su abundancia de vida salvaje), el Monte Mikeno (lugar donde se hicieron los primeros estudios sobre gorilas) y la Garganta de Olduvai. Fue en este último donde se entrevistó con Louis Leakey, quien trabajaba ahí desde 1959 y para esa fecha había logrado importantes descubrimientos sobre los primeros homínidos. Allí pudo externar su interés por el estudio de los gorilas. Leakey le habló sobre los trabajos que Jane Goodall había realizado con los chimpancés de Gombe y también la invitó a visitar las excavaciones más recientes en las que él trabajaba. Pero la mala fortuna siguió a Dian en esa visita y el dolor que la acompañó después de romperse un tobillo la hizo vomitar sobre un fósil de jirafa recién recuperado. Pero las heridas sanan y los restos fosilizados se limpian, y después de esa visita pudo dirigirse a los montes Virunga, en Uganda. Ahí tuvo la oportunidad de ver, por primera vez en su vida, a los gorilas de montaña en su hábitat natural. Este encuentro marcaría el resto de su vida, y se prometió a sí misma regresar para estudiar a estos majestuosos animales. Poco tiempo después tuvo que regresar a Kentucky para trabajar y pagar la deuda de su viaje, pero aprovechó este tiempo para publicar algunos artículos con varias de sus fotografías y relatos en el periódico de amplia circulación *The Courier Journal*.



Cerca de tres años después se reencontró con el doctor Leakey, cuando daba una conferencia en Louisville. Él recordó su visita en Olduvai y el gran interés que Dian tenía por los gorilas. Después de leer las publicaciones que había hecho en el periódico le dijo que ella podría convertirse en “la chica de los gorilas”, y le propuso estudiarlos a largo plazo (del modo que venía haciéndolo Jane Goodall, con los chimpancés en Tanzania). Sin pensarlo dos veces aceptó, y mientras Leakey conseguía los fondos para la empresa, ella se dedicó a aprender la lengua swahili y un curso básico de primatología. También se practicó una apendicectomía, a petición de Leakey (ya que, según él, tendría que trabajar en un lugar remoto y sin servicios médicos para atender tal eventualidad). Unos meses después se enteró de que la operación para quitarle el apéndice no era indispensable, sino que fue la forma de poner a prueba su resolución y compromiso para el arduo trabajo que vendría.

En diciembre de 1966 se encontraba de nuevo en África. De camino al Congo visitó el centro de Investigación en Gombe, donde habló con Jane Goodall y aprendió valiosa información sobre cómo establecer y administrar un campamento en las montañas. Finalmente, se estableció al pie de la cadena de montes Virunga (en la frontera entre el Congo y Rwanda) y con ayuda de un guía y un rastreador local pudo identificar rápidamente tres grupos de gorilas. Gracias a su trabajo como terapeuta de niños autistas, aprendió que podía ganarse su confianza imitando las acciones que ellos hacían, con suaves gruñidos y un comportamiento sumiso. Llegó a reconocer a los gorilas de manera individual, por los rasgos de su nariz (que son únicos, como nuestras huellas digitales). Apenas un año después de que iniciara sus estudios se vio obligada a salir intempestivamente del país, debido a una guerra civil. Un grupo de soldados la apresaron durante dos semanas, pero gracias a la ayuda de algunos conocidos pudo dirigirse a Rwanda con la advertencia de nunca regresar.

En septiembre de 1967 fundó el que sería su campamento definitivo, el Centro Karisoke (por ubicarse entre los montes Karisimni y Bisoke). Ahí se dedicó a estudiar los grupos de gorilas que habitaban en un bosque de bambú a 3000 metros de altura. Prácticamente no habían tenido ningún contacto con seres humanos, salvo por las incursiones de cazadores furtivos que traficaban con especies salvajes.



A Dian le resultó difícil habituar a estos gorilas a su presencia, pero al cabo de un año pudo interactuar con cuatro grupos diferentes, sobre los que reportó importantes descubrimientos. Pudo documentar que las hembras pasaban a otro grupo después de varios años de permanecer con una misma tropa. Esto prevenía la endogamia y permitía el importante intercambio genético entre los grupos. Aprendió a reconocer e imitar la compleja vocalización que empleaban los gorilas para comunicarse entre ellos, y cómo ésta establecía la jerarquía y las relaciones sociales (dentro de un mismo grupo y entre grupos antagónicos). Recopiló también una gran cantidad de información relacionada con la dieta de los gorilas y la fabricación de nidos temporales para dormir (mismos que debían ser contruidos de nuevo cada día). Todo esto la llevó a reconocer a estos primates como “gigantes gentiles, dignos y muy sociables con personalidades individuales y fuertes lazos familiares”.

Ella estableció lazos estrechos y cercanos con diferentes individuos de cada grupo. Especialmente con un macho de 5 años de edad que tenía el dedo de la mano derecha lesionado y por esa razón decidió llamarlo Digit. Era un individuo que no tenía compañeros de su edad dentro del grupo y se sintió atraído hacia Dian casi de inmediato. Ambos generaron una verdadera amistad. La difusión y divulgación de su gran labor (junto con el especial apoyo de la National Geographic) lograron atraer la atención del público hacia los gorilas.

Haciendo pausas periódicas para viajar a Inglaterra logró obtener su doctorado en 1974, reafirmando como la mayor especialista de gorilas en el mundo. Desde el inicio de sus observaciones tuvo que involucrarse en la protección de estos gigantes, puesto que el ganado de las aldeas vecinas invadía con frecuencia el área de los gorilas y éstos eran cazados por los cazadores furtivos que los vendían a zoológicos de todo el mundo o que comerciaban partes de su cuerpo a manera de recuerdos para turistas o remedios. Se involucró entonces en lo que denominó “conservación activa”, practicando métodos poco ortodoxos como el de emplear máscaras para asustar a la gente, destruir las trampas de los cazadores o rociar pintura sobre el ganado para alejarlo. Con esto se hizo de varios enemigos en el campo y algunos detractores académicos que cuestionaban sus métodos de estudio.

Recibió la víspera de Año Nuevo de 1977 con la desoladora noticia del asesinato de Digit, quien fue salvajemente sacrificado por cazadores furtivos. Lo decapitaron y le cortaron las manos para venderlas como ceniceros. El gorila de mayor jerarquía del grupo de Digit murió un año después, y esto la llevó a la creación de la Fundación Digit, para formar patrullas en contra de estos cazadores. Recibió tal atención y apoyo de todas partes del mundo, que en la actualidad dicha fundación continúa con sus labores de protección a los gorilas. La ejemplar vida de Dian tuvo un final trágico. El 27 de diciembre de 1985 fue encontrada sin vida y con signos de violencia en la cabaña del Centro Karisoke. A la fecha no se ha esclarecido quién la asesinó. Fue enterrada al lado de Digit, en el mismo cementerio donde se encuentran sepultados varios de sus amados gorilas.

Después de su muerte, la fundación Digit fue renombrada como “Fundación Internacional para gorilas Dian Fossey” y continuó con la operación del Centro Karisoke, hasta que en 1994 (a causa de la guerra civil en Rwanda), el centro fuera arrasado y desmantelado. Los esfuerzos de Dian no han sido en vano y las poblaciones de gorilas se están recuperando lentamente, en parte gracias al interés de los turistas conscientes que viajan para ver de cerca a los gorilas en su hábitat y de preservarlos.

*“Cuando te das cuenta del valor de toda vida,
te apoyas menos en lo que pasó y te
concentras en la preservación del futuro”*

Dian Fossey

Biruté y Beth

Sus padres (lituanos refugiados de la segunda Guerra Mundial) se mudaron a Canadá después de su nacimiento para poder criarla ahí. Desde niña, Biruté Galdikas viajaba en su mente a selvas lejanas llenas de criaturas exóticas. Es por eso que el primer libro que pidió prestado en la biblioteca de Toronto, cuando tenía tan solo 6 años de edad, fue el de *Las aventuras de Jorge el curioso*, un travieso mono que siempre ponía en aprietos a su dueño. Desde que iba a la escuela primaria sabía que algún día se convertiría en una exploradora y creció con la inspiración de los trabajos de Jane Goodall y Dian Fossey, que mostraba la *National Geographic*. Después su familia se mudó a Los Ángeles y ella se inscribió en la Universidad de California, graduándose en Psicología y Zoología en el año de 1966. Continuó con una maestría en antropología, que completó tres años después.



Recién graduada tuvo la oportunidad de conocer a Louis Leakey y platicarle acerca de su deseo de estudiar a los orangutanes en su entorno natural. Al principio Leakey se mostró renuente, pero ante la insistencia de Biruté accedió a apoyarla (y de esta manera convertirla en la tercera *trimate*), no sin antes hacerle la recomendación de someterse a una apendicectomía. Biruté, quien conocía la anécdota de Dian Fossey, nunca se sometió a la operación.

En 1971 visitó a Jane Goodall en el Centro Gombe, vio a Leakey en Kenya y finalmente viajó junto con su esposo a la reserva de vida salvaje de Tanjung Puting, en la parte indonesia de la Isla de Borneo. Antes de partir, recibió múltiples comentarios en el sentido de que le sería imposible estudiar a

los orangutanes salvajes, porque a diferencia de los chimpancés y gorilas, los orangutanes eran demasiado recelosos y difíciles de observar. A esto se le añade la complejidad de que los orangutanes viven en las copas de los árboles, dentro de pantanos profundos. Esto no la detuvo y con mucho trabajo y gran determinación logró establecer el “Campo Leakey”, nombrado en honor a su mentor, quien murió en 1972 y a quien vio por última vez antes de partir hacia Borneo. Tres semanas después de su llegada conoció a su primera orangutana, Akmad. Había sido capturada por taladores ilegales y posteriormente incautada por las autoridades, así que le fue entregada para mantenerla en el campo Leakey para su rehabilitación y posterior liberación.

Trabajó arduamente por más de dos meses, rastreando orangutanes a través de peligrosos pantanos insalubres y con el agua siempre hasta la cintura (por lo menos), hasta que logró avistar a Beth, una madre orangutana que cargaba a su pequeña cría, Bert. Tuvo la oportunidad de seguirlos a lo largo de cinco días continuos. Esta detallada observación, la primera de su tipo realizada con animales en estado de vida libre, fue trascendente. Le mostró a Biruté que, con un poco de dedicación y esfuerzo, era posible estudiar a estos esquivos primates, contra toda opinión experta que había recibido antes de embarcarse en su odisea.

En 1975 escribió su primer artículo de portada para la revista *National Geographic*. Con este llegó la atención mundial hacia su trabajo, pero sobre todo hacia los orangutanes y las precarias condiciones de su hábitat natural. Documentó asiduamente la ecología y comportamiento de los animales en vida libre, registrando los 400 tipos de alimentos consumidos por ellos, además de la organización social y los patrones de apareamiento que los caracterizan. Fue la primera en constatar el largo intervalo que transcurre para que los orangutanes tengan crías (7.7 años en promedio), este es uno de los factores que pone a la especie en serio peligro de extinción.

Su trabajo no solo fue de índole académico y se extendió a la preservación del hábitat de los orangutanes (que actualmente disminuye a una velocidad sorprendente). Se enfocó también a la concientización y educación de la población local en materia ambiental. Sus esfuerzos lograron el decreto de la formación del Parque Nacional de Tanjung Puting y el establecimiento de la Fundación Internacional del Orangután, en 1986, que se dedica a la recuperación de simios capturados (huérfanos en su mayoría) y su rehabilitación para la posterior reinserción en su medio natural. Biruté es reconocida internacionalmente por conducir el estudio continuo más prolongado de cualquier mamífero salvaje en el mundo, ¡40 años continuos y contando!

Durante la rehabilitación y reinserción se ha puesto de manifiesto la gran inteligencia que tienen estos animales. La mayor entre los grandes primates, fomentada, principalmente, por su facilidad para la imitación que les permite aprender y eventualmente enseñar labores que son relativamente complicadas. Una de las “alumnas” más destacados fue Supinah, orangutana que llegó al campamento Leakey en 1981, después de ser confiscada por el gobierno de Indonesia. Supinah logró imitar tareas tan complicadas como trasvasar líquidos entre distintos recipientes, manipular una brocha para pintar una cerca, colgar una hamaca y manipular un bote atado en el borde del río. Llegó incluso a intentar encender una fogata, imitando a sus cuidadores.

Biruté Galdikas ha recibido innumerables reconocimientos internacionales, incluyendo el premio “Kalparatu” (la mayor condecoración otorgada por el gobierno de Indonesia). Aunque también ha sido duramente criticada, en especial por sus métodos de rehabilitación (que, según sus detractores, resultan sumamente cuestionables). Lo cierto es que la situación actual de los orangutanes es mucho más complicada que cuando ella inició sus estudios en los años setenta. La caza furtiva, la desaparición acelerada de la selva a causa de la deforestación, el crecimiento descontrolado de los plántos de palma y el incremento de las actividades mineras son los mayores riesgos. Se calcula que en los próximos veinte años las poblaciones viables de orangutanes fuera de los parques y reservas naturales habrán desaparecido.



El legado de las Trimates

¿Qué llevó a Dian Fossey a vivir a 3000 metros de altura sobre un volcán extinto (donde el mal de montaña y la depresión eran tan comunes como la lluvia y la niebla)? ¿A Jane Goodall a arrastrarse sobre su pecho mientras seguía el rastro de los chimpancés? ¿A Biruté Galdikas a sumergirse en pantanos infestados de sanguijuelas, bitácora en mano y con el agua hasta el cuello? Sin duda, su amor por los animales y por el conocimiento científico, impulsado, también en parte, por la curiosidad de Louis Leakey para tratar de conocer el comportamiento de nuestros ancestros.

Bien lo reconoció Leakey desde un principio, se trataba de un trabajo que solo podían llevar a cabo estas increíbles mujeres en particular, que compartían dos características importantes. La primera era que ninguna de ellas tenía una amplia formación como naturalista, esto les permitiría estar libres de los prejuicios clásicos que suelen tener los especialistas académicos. En segundo lugar, su gran carácter humano: paciencia, persistencia, percepción, entrega y la gran empatía de las mujeres por sus sujetos de estudio, tratándolos como individuos cuyas historias de vida influían en la estructura del grupo. “No era cuestión de paciencia. Era un amor innato por el lugar en el que se está y por las bestias que se estudian”. Ellas sacrificaron su bienestar, comodidad e incluso su familia y su propia vida para lograr alcanzar sus más profundos sueños.

La pionera, Jane, desarrolló su trabajo de campo por alrededor de 20 años. Dian solo pudo hacerlo durante 13 y Biruté ha completado ya más de 40. Todas lograron establecer un acuerdo con sus animales de estudio, y dichos términos y condiciones no fueron establecidos por los humanos: la relación se desarrolló siempre bajo los términos de los animales mismos. Las biografías de estas grandes científicas nos hacen recordar que compartimos el planeta con especies maravillosas que merecen nuestro mayor reconocimiento y respeto. Especies que son, en cierta medida, demasiado parecidas a nosotros.

“Las selvas tropicales son la cosa más compleja que un humano ordinario puede experimentar en este planeta.

Una caminata en la selva, es una caminata dentro de la mente de Dios”.

Biruté Galdikas

Para saber más de las *Trimates*

Para leer:

Favili E, Cavallo F. Cuentos de buenas noches para niñas rebeldes. Editorial Planeta Mexicana, México. 2018.

Fossey D. Gorilas en la niebla. 13 años viviendo entre los gorilas. Biblioteca científica Salvat, No. 2. Salvat Editores, Barcelona. 1985.

Galdikas B. Reflections of Eden: My Years with the Orangutans of Borneo. Back Bay Books. 1996.

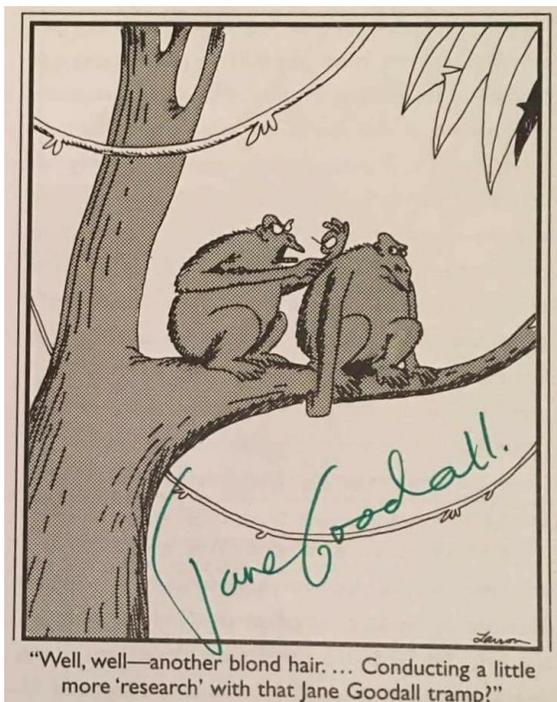
Goodall J. En la senda del hombre. Vida y costumbres de los chimpancés. Biblioteca científica Salvat, No. 23. Salvat Editores, Barcelona. 1986.

Montgomey S. Walking with the great apes. Jane Goodall, Dian Fossey, Biruté Galdikas. Chelsea Green Pub. Vermont, USA. 1991.

Morell V. Called "Trimates", three bold women shaped their field. Science 260 (5106): 420-425. 1993.

Ottaviani J, Wicks M. Primates. The fearless science of Jane Goodall, Dian Fossey and Biruté Galdikas. Square Fish. 2015.

Peterson D. Jane Goodall: the woman who redefined man. Houghton Muffin Co. Boston, USA. 2006.



Para ver:

Jane. Director: Brett Morgen. 2017. 90 minutos.

Documental biográfico acerca de Jane Goodall, con especial énfasis en su trabajo de campo.

Gorilas en la niebla. Director: Michael Apted. 1988. 129 minutos.

Película dramática basada en el libro homónimo de Dian Fossey, relatando su vida estudiando a los gorilas.

The last Trimate. Director: Stephen Van Mil. 2008. 52 minutos.

Documental sobre el trabajo de Biruté Galdikas con los orangutanes de la isla de Borneo.

Para investigar sobre su trabajo y su legado:

<https://janegoodall.org/>

<https://gorillafund.org/>

<https://orangutan.org>

“Solo si entendemos, nos puede importar.

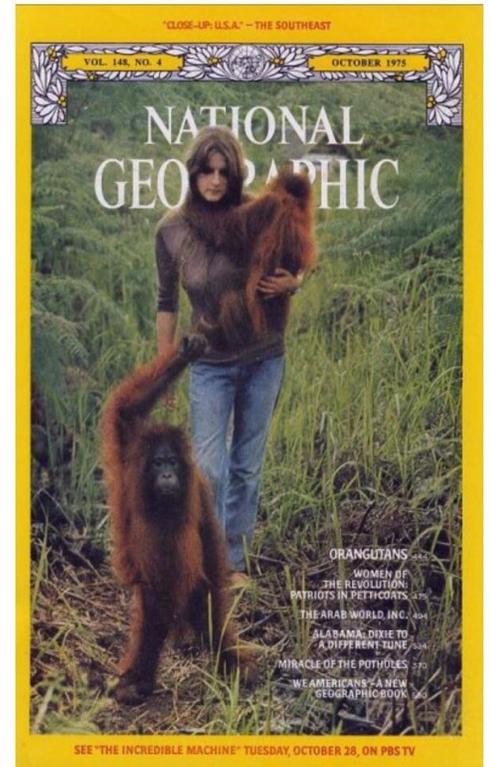
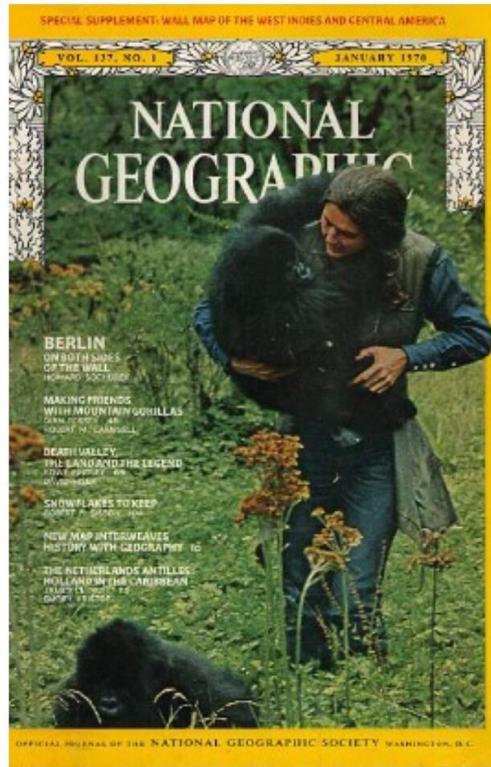
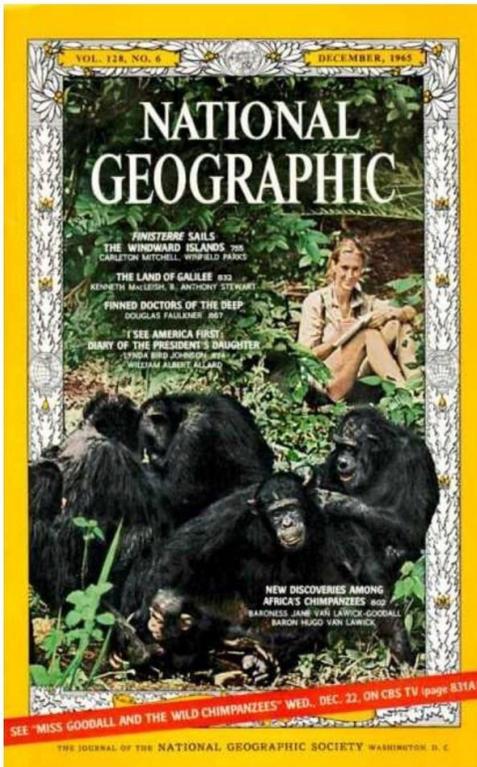
Solo si nos importa, podemos ayudar.

Solo si ayudamos, ellos se salvarán”

Jane Goodall

*“El comportamiento de los homínidos
no se fosiliza”*

Louis Leakey



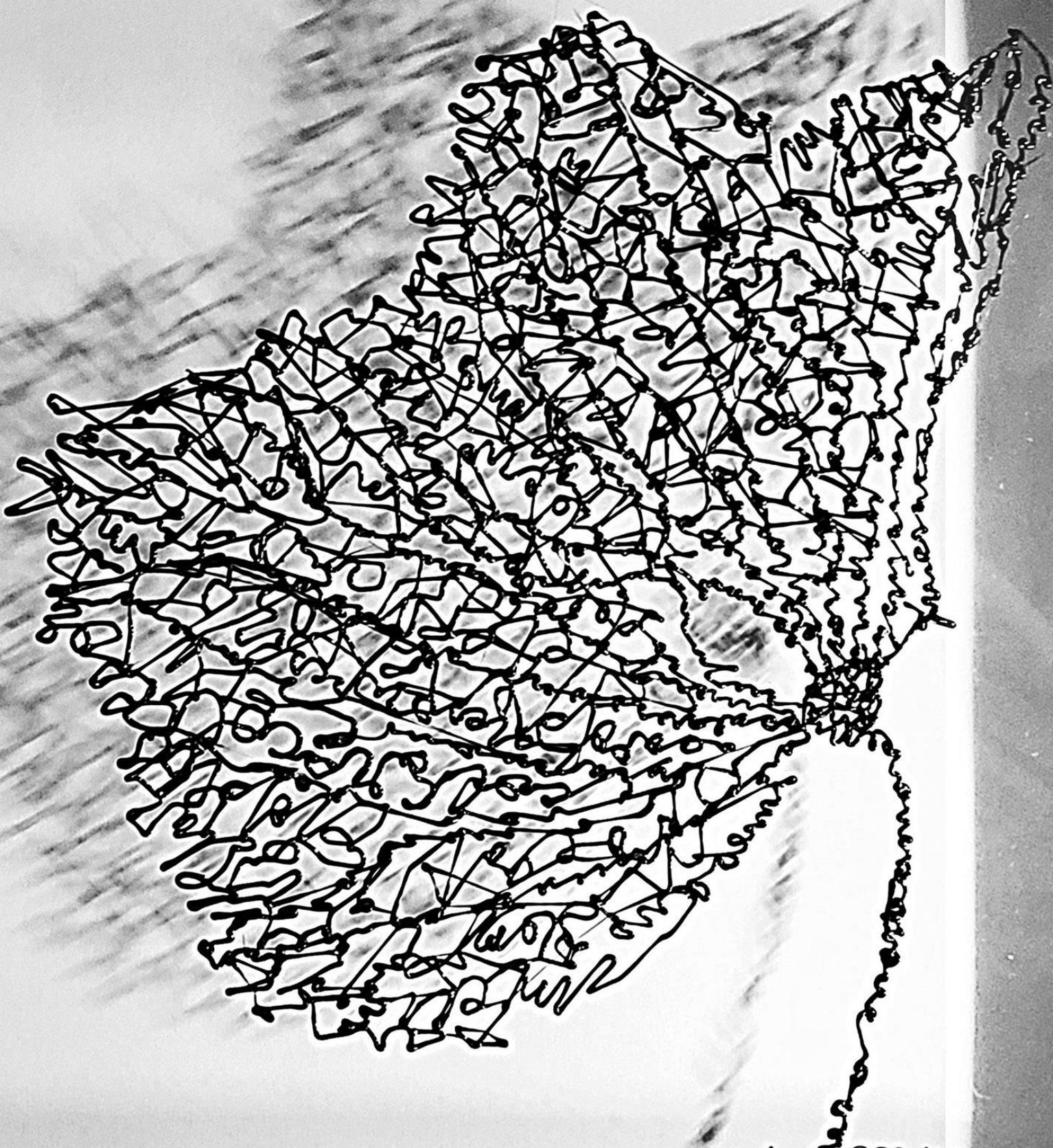
Valerie Jane Morris Godall (Londres, Inglaterra, 3 de abril de 1934). Primatóloga especialista en chimpancés, activista a favor de la conservación y del bienestar animal. Casada dos veces, tiene un hijo. Fue la primera *Trimate*. Tesis doctoral: Comportamiento de los chimpancés de vida libre. Universidad de Cambridge, Inglaterra.

Louis Seymour Bazett Leakey (Kabete, África Oriental Británica, ahora Kenya, 7 de agosto de 1903 – Londres, Inglaterra, 1 de octubre de 1972). Arqueólogo y paleoantropólogo, pionero del estudio de la evolución de los humanos en África. Casado dos veces, 5 hijos. Tutor y mecenas de decenas de estudiantes, principalmente de la Universidad de Cambridge, Inglaterra.

Dian Fossey (San Francisco, California, 16 de enero de 1932 – Parque Nacional de los Volcanes, Rwanda, 26 de diciembre de 1985). Etóloga y primatóloga, especialista en gorilas. Segunda *Trimate*. Tesis doctoral: El comportamiento del gorila de montaña. Universidad de Cambridge, Inglaterra.



Biruté Marija Filomena Galdikas (Wiesbaden, Alemania, 10 de mayo de 1946). Antropóloga, primatóloga especialista en orangutanes, etóloga, activista en conservación. Casada dos veces, 3 hijos. Tercera *Trimate*. Tesis doctoral: Adaptación de los orangutanes a la Reserva Tanjung Puting, Borneo Central. Universidad Simon Fraser, Canadá.



M. Clissa 2020



Noticias

Con *aliento* a COVID, Fosfacenos, Nanotecnología aplicada al SARS, Permafrost mortal, Tricapas de grafeno superconductoras y Lucha contra el Sida

Test de aliento para detectar COVID-19 en 60 segundos

Por: Yareli Rojas-Aguirre

Las más de 200 000 personas que atraviesan el cruce fronterizo de Malasia a Singapur deben presentar, desde el pasado mes de mayo del presente año, la *huella molecular de su aliento*, además de sus visas de trabajo y pasaportes. ¡Así es! Cada persona que pasa por el cruce fronterizo en auto debe bajar la ventanilla y exhalar a través de un sistema, similar al que detecta aliento etílico a un conductor que ha bebido alcohol. El sistema creado por la *spin-off* Breathonix, de la Universidad Nacional de Singapur, utiliza boquillas desechables y está diseñado para evitar la contaminación cruzada. Tras soplar en el dispositivo, el sistema (conectado a un espectrómetro de gases-masas) evalúa los compuestos químicos del aliento para determinar si una persona está infectada o no. La prueba reporta una precisión del 90 % y cualquier persona que dé positivo deberá someterse a una prueba confirmatoria de reacción en cadena de la polimerasa (PCR) para COVID-19.

La tecnología se basa en que la infección por el virus SARS-CoV-2 desencadena una serie de cambios metabólicos que alteran las proporciones de los compuestos orgánicos volátiles que exhalamos. Durante años se ha considerado que el aliento puede dar pistas sobre una enfermedad, y que los médicos podrían utilizarlo como una guía de detección temprana para diversas enfermedades. Por ejemplo, el aliento con ligero olor a barniz de uñas de una persona con diabetes (debido a las cetonas producidas por el particular metabolismo de ácidos grasos) o el aliento a pescado rancio de una persona con falla hepática (debido al metanotiol y disulfuro de dimetilo).

En cuanto a infecciones virales, durante la epidemia de influenza causada por el virus H1N1 se encontró que pueden producirse cambios en el aliento de una persona debido a la respuesta inmune generada por el virus. Dichos cambios se atribuyeron

a los compuestos 2,3-butanediona; 2,8-dimetilundecano, y *n*-propilacetato. Para el caso de COVID-19, investigadores de la Universidad de Beijing encontraron que los pacientes hospitalizados a causa de esta infección exhalan más butanoato de etilo y menos butiraldehído y alcohol isopropílico que las personas sanas.

Además de Breathonix, las compañías Scentech Medical y TeraGroup, en Israel, y Owlstone Medical en el Reino Unido, se encuentran analizando la efectividad de otros prototipos similares. Lo que hace a esta prueba sumamente atractiva es la posibilidad de detectar a personas asintomáticas o personas con síntomas leves. Además, esta tecnología tiene un costo promedio de 7 dólares y medio. Gracias a mejores espectrómetros de masa portables y el avance en pruebas de diagnóstico a través del aliento, esta prueba podría haber llegado para quedarse.

Referencias

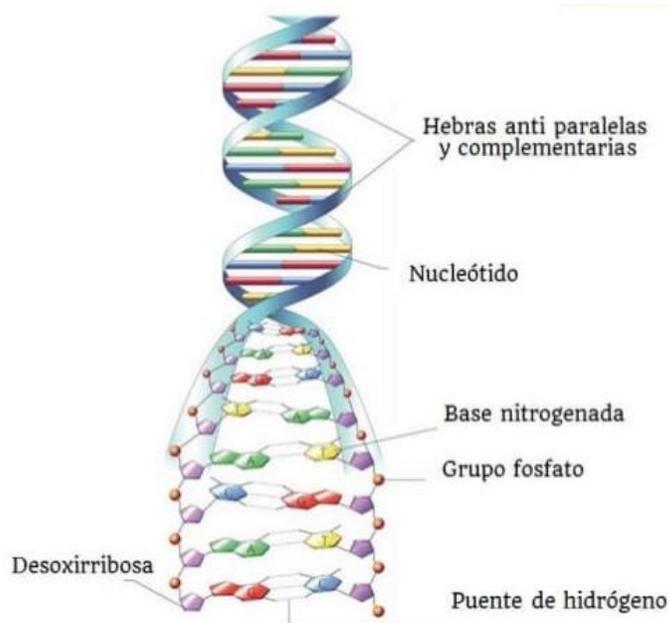
- Berna, A. Z., Akaho, E. H., Harris, R. M., Congdon, M., Korn, E., Neher, S., . . . Odom John, A. R. (2021). Reproducible breath metabolite changes in children with SARS-CoV-2 infection. *ACS Infectious Diseases*, 7(9), 2596-2603. doi:10.1021/acscinfed.1c00248
- Davis, C. E., Schivo, M., & Kenyon, N. J. (2021). A breath of fresh air – the potential for COVID-19 breath diagnostics. *EBioMedicine*, 63 doi:10.1016/j.ebiom.2020.103183
- Giovannini, G., Haick, H., & Garoli, D. (2021). Detecting COVID-19 from breath: A game changer for a big challenge. *ACS Sensors*, 6(4), 1408-1417. doi:10.1021/acssensors.1c00312
- Lamote, K., Janssens, E., Schillebeeckx, E., Lapperre, T. S., De Winter, B. Y., & Van Meerbeeck, J. P. (2020). The scent of COVID-19: Viral (semi-)volatiles as fast diagnostic biomarkers? *Journal of Breath Research*, 14(4) doi:10.1088/1752-7163/aba105
- Mougang, Y. K., Di Zazzo, L., Minieri, M., Capuano, R., Catini, A., Legramante, J. M., . . . Di Natale, C. (2021). Sensor array and gas chromatographic detection of the blood serum volatolomic signature of COVID-19. *IScience*, 24(8) doi:10.1016/j.isci.2021.102851
- Ruszkiewicz, D. M., Sanders, D., O'Brien, R., Hempel, F., Reed, M. J., Riepe, A. C., . . . Eddleston, M. (2020). Diagnosis of COVID-19 by analysis of breath with gas chromatography-ion mobility spectrometry - a feasibility study. *EClinicalMedicine*, 29-30 doi:10.1016/j.eclinm.2020.100609
- Zamora-Mendoza, B. N., Díaz de León-Martínez, L., Rodríguez-Aguilar, M., Mizaikoff, B., & Flores-Ramírez, R. (2022). Chemometric analysis of the global pattern of volatile organic compounds in the exhaled breath of patients with COVID-19, post-COVID and healthy subjects. proof of concept for post-COVID assessment. *Talanta*, 236 doi:10.1016/j.talanta.2021.122832
- <https://www.medicaldevice-network.com/news/breathonix-breath-test-singapore/>
- <https://cen.acs.org/analytical-chemistry/diagnostics/can-breath-based-covid-tests-sniff-out-infections/>
- <https://breathonix.com/covid-19/>

Fosfacenos: ¿compuestos de fósforo que se parecen al benceno?

Por: Estrella Ramos

En esta sección de noticias hablaré sobre un grupo de compuestos que, si bien es cierto que no son exactamente nuevos, nos gustaría mencionar. Apelando a sus conocimientos de Química inorgánica, les invitamos a jugar con la versatilidad de los enlaces químicos y ver cómo su correcto entendimiento y manejo pueden ser el punto de partida para el diseño de nuevos materiales.

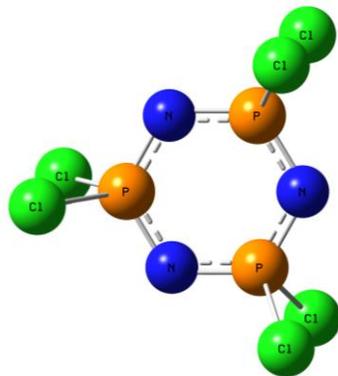
Uno de los compuestos de fósforo más conocidos por nosotros es el fosfato (PO_4^{3-})*, pues desempeña un papel esencial en los procesos de intercambio y transferencia de energía, tales como el metabolismo, la fotosíntesis, la función nerviosa y la acción muscular. También está presente en los ácidos nucleicos (que podríamos decir que son las moléculas de la vida) y forma parte del **ATP** (Adenosín Trifosfato o Trifosfato de Adenosina), que es la molécula portadora de la energía primaria para todas las formas de vida (bacterias, levaduras, mohos, algas, vegetales, células animales). Los esqueletos de los animales están formados por fosfato de calcio**. En la imagen puede verse la cadena de ADN, los grupos fosfato forman el *barandal* de “la escalera”:



El fósforo también puede enlazarse con el nitrógeno. Incluso podemos pensar en el nitrógeno como un “análogo” del oxígeno y, de esta manera, podemos pensar en compuestos que son análogos formales de los fosfatos (en los cuales el O se sustituye por N). Los compuestos formados por fósforo y

nitrógeno se conocen como **fosfazanos**, si el enlace P-N es sencillo (P-N), y **fosfacenos**, si es doble (P=N). Los fosfacenos pueden ser compuestos cíclicos, abiertos o poliméricos. En la imagen de abajo, uno cíclico:

En la actualidad, estos compuestos constituyen una de las familias de polímeros (que recuerdan a las siliconas) más versátiles en cuanto a sus aplicaciones. Para tener una idea del impacto científico que tienen los fosfacenos, una búsqueda en SciFinder*** reveló que, en promedio, se publican alrededor de 12 artículos relacionados con fosfacenos por mes.



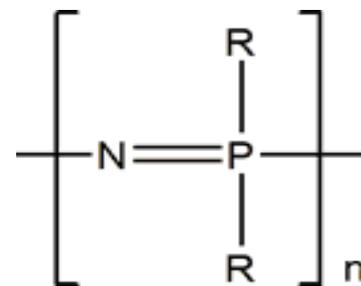
Los fosfacenos se encuentran en la interfase entre la química inorgánica y la química orgánica. Los inicios de estos compuestos se remontan a 1800, cuando se hacía reaccionar pentacloruro de fósforo con amoníaco o cloruro de amonio, generándose así los compuestos $(NPCl_2)_3$ y $(NPCl_2)_4$.

Mucho se discute acerca de la alternancia de enlaces sencillos y dobles P-N en los fosfacenos cíclicos. Uno podría pensar que se trata de un detalle sin importancia. No obstante, aquellos más versados en Química sabrán que si los enlaces son todos iguales, es posible hablar de cierta *aromaticidad* y que esta se traduce en una serie de propiedades físicas y químicas. La posible aromaticidad de los fosfacenos explica el porqué de la similitud con el benceno, sin embargo, en estos pueden llevarse a cabo reacciones de adición nucleofílica-eliminación (A_N-E) que no ocurren en el benceno no sustituido. El fenómeno de la aromaticidad es complejo y hay compuestos más aromáticos que otros. Se han desarrollado diferentes alternativas para hacer evaluaciones experimentales del mismo, mencionaremos aquí algunas de las condiciones que deben cumplirse para que un compuesto sea aromático:

- Estructuras cíclicas
- Planaridad del anillo (aunque no ocurre siempre)
- Enlaces de la misma longitud (en este caso, hablamos de los enlaces P-N)
- Excepcional estabilidad química

El monómero (unidad que se repite) en un polímero de fosfaceno es el $[NPR_2]$, en donde R puede ser F, Cl, Br o ciertos grupos orgánicos.

Si hace cuentas encontrará que, en la distribución de los electrones de estas unidades, tanto el fósforo como el nitrógeno contribuyen con 5 e⁻ de valencia. El nitrógeno tiene un par libre y el fósforo usa todos sus electrones para enlazarse con cuatro vecinos (dos nitrógenos y dos grupos R).



Los polímeros de fosfaceno son flexibles. Para explicar este comportamiento macroscópico en términos de la estructura electrónica del compuesto, debemos recordar que el fósforo puede expandir su nube de densidad electrónica hacia los orbitales 3d desocupados que posee. Es de esta manera que la torsión del enlace P-N no afecta notoriamente el enlace. Se piensa también que el enlace π no se encuentra deslocalizado en toda la estructura, esto daría una explicación a que los fosfacenos sean incoloros y aislantes eléctricos.

Las propiedades tan variadas de los diferentes tipos de polifosfacenos radica en la diversidad de grupos R que pueden ser enlazados como sustituyentes. Esto da como resultado materiales que pueden ser ya sea cristalinos o amorfos, solubles o insolubles en agua, de alta Tg o de baja Tg (flexibilidad a alta o baja temperatura), resistentes al fuego y a disolventes, biocompatibles, etc.

Se propone su uso como retardantes de flama, pero no se limitan a esa posibilidad. Las empresas que los producen afirman que sus materiales ofrecen una resistencia superior a la humedad y al calor, y que son especialmente adecuados para aplicaciones electrónicas. Las aplicaciones comerciales de los fosfacenos son notables, y para ilustrarlo, citaré los detalles que ofrece Otsuka Chemical Co. Ltd, una empresa japonesa dedicada al desarrollo de fosfacenos libres de halógenos y amigables con el medio ambiente.

Ventajas: química verde no halógena, excelente resistencia a la hidrólisis, resistencia superior al calor, se pueden utilizar en una variedad de plásticos de ingeniería, se derriten con calor y se disuelve en diferentes disolventes. Posibles aplicaciones: placas de circuitos, selladores funcionales, componentes de alta frecuencia, molduras de resina (PC, PPE, PET, PBT, HDPE, por mencionar algunos), adhesivos y aditivos para pinturas.

*Existen otros, con estructuras tipo jaula. Ejemplos de estas moléculas son el fósforo blanco, P_4 , y uno de los pentóxidos de fósforo, P_4O_{10} . Las estructuras tipo red son comunes;

por ejemplo, los cristales de fósforo negro, en los que los átomos están enlazados unos con otros.

**Algunos tienen médula ósea, que es un tejido esponjoso que se encuentra en el interior de algunos de los huesos del cuerpo como las crestas ilíacas (hueso de la cadera), el esternón o los huesos del cráneo. En el lenguaje coloquial se le llama *tuétano* y en México es un componente de un guisado muy conocido llamado caldo de res, por cierto, últimamente está de moda comerse el tuétano en tacos (guisado que es considerado un platillo de lujo).

***Sistema de información integrado que comprende prácticamente toda la información científica y técnica que un investigador necesita en las áreas de Química, Biología, Bioquímica, Ingeniería, Física, Materiales, etc

Referencias

<https://www.otsukac.co.jp/en/products/flamm-retardant/phosphazene/>
Inorg. Chem. 2005, 44, 23, 8407–8417,
<https://doi.org/10.1021/ic0511266>
Polyhedron Volume 6, Issue 2, 1987, Pages 119-157

Tratamiento y control de COVID-19 con Nanotecnología

Por: M. González Garnica

Junio, marzo y agosto del 2020 fueron meses cruciales para la propagación del virus SARS-CoV-2 proveniente de Wuhan, China. En diciembre del 2019 surgió este problema de salud global que ha generado decrementos poblacionales en los diferentes países del planeta. Derivado de ello, las distintas ramas de la ciencia han concentrado esfuerzos para la búsqueda de tratamientos y control para el COVID-19. La Nanotecnología, por ejemplo, realiza estudios partiendo de que los principales mecanismos de deposición de partículas en el tracto respiratorio dependen del tamaño de las mismas. La impactación y sedimentación son importantes en partículas grandes, pero para partículas de menos de 160 nm de diámetro[1] la difusión representa el mecanismo principal. Las partículas nanométricas brindan, entonces, una amplia gama de oportunidades para combatir el COVID-19, además de nuevas soluciones para problemas clínicos. La nanotecnología tiene un inmenso potencial para ayudar en el desarrollo de entrega de medicamentos COVID-19, debido a sus ventajas como la morfología y el pequeño tamaño de las nanopartículas[1], que permiten la entrega del fármaco a sitios fisiológicamente inaccesibles. La proporción de nanopartículas aumenta, además, la carga del fármaco y por ende su capacidad

de cruzar membranas con cargas negativas (debido a la modificación de la carga superficial de estas). Así mismo, poseen una actividad antiviral intrínseca (como las partículas nanométricas obtenidas del Au, Ag[1] y Fe[2]).

El rendimiento terapéutico COVID-19 puede mejorarse mediante varias vertientes de administración de fármacos particulados: encapsulación de agentes en el núcleo para aumentar la estabilidad[1], direccionamiento específico a través de restos de direccionamiento[1] y funcionalización con polímeros PEG[1], para disminuir la cantidad de fármaco necesaria para producir efecto. Autoras como Yasmin Abo-zeid et al. [2] han publicado los resultados de sus novedosas investigaciones para la mejora de terapias antivirales, así como del control o limitación de la propagación de infecciones virales. La investigación de la posible actividad antiviral de nanopartículas de óxido de hierro (IONPs)[2] en SARS-CoV-2 y HCV mediante estudios de acoplamiento molecular, demuestran que tanto el Fe₂O₃ como el Fe₃O₄ interactúan eficientemente con las glicoproteínas del E1 y E2 del SARS-CoV-2 SI-EBD y del VHC[2]. Se observó la formación de un complejo estable con cambios conformacionales en proteínas estructurales virales y se pretende llegar a la posterior inactivación del virus[2]. Diversas soluciones continúan proponiéndose como medida avanzada para el control del virus y otras infecciones nosocomiales.



Referencias

- [1] V. Bhavana, P. Thakor, S. B. Singh, and N. K. Mehra, "COVID-19: Pathophysiology, treatment options, nanotechnology approaches, and research agenda to combating the SARS-CoV2 pandemic," *Life Sci.*, vol. 261, no. August, p. 118336, 2020, doi: 10.1016/j.lfs.2020.118336.
[2] Y. Abo-zeid, N. S. Ismail, G. R. McLean, and N. M. Hamdy, "A molecular docking study repurposes FDA approved iron oxide nanoparticles to treat and control COVID-19 infection," *Eur. J. Pharm. Sci.*, vol. 153, no. April, p. 105465, 2020, doi: 10.1016/j.ejps.2020.105465.

El derretimiento de glaciares y la descongelación del permafrost podrían liberar virus antiguos

Por: Maricela Zapata Arroyo

El permafrost se derrite, virus y bacterias resurgen por el deshielo

El *permafrost* es un ecosistema congelado en el tiempo. Está formado por rocas, arena, tierra y se encuentra repleto de restos de vida muerta. Desde restos prehistóricos hasta plantas antiguas. Prácticamente todo lo que alguna vez caminó o creció en ese tipo de suelo se ha conservado en las extensiones congeladas bajo su superficie, durante miles de años. Y no solo aparece sobre la superficie, sino que también puede encontrarse bajo las profundidades de los océanos. Según los científicos, el permafrost afecta alrededor del 25 por ciento del hemisferio norte.

Básicamente, el permafrost actúa como un adhesivo al pegar las capas de rocas y minerales que componen la superficie de nuestro planeta. Su derretimiento puede cambiar drásticamente el paisaje: los lagos pueden vaciarse, los ríos pueden cambiar de dirección y las costas pueden desintegrarse. El permafrost también puede conservar una serie de microorganismos y virus en estado viable, porque es frío, oscuro y no contiene oxígeno.



El cambio climático está derritiendo la capa de suelo permanentemente congelada en las regiones polares permafrost, liberando virus y bacterias antiguos que han permanecido latentes durante miles de años y que ahora vuelven a la vida.

¿Podrían los virus antiguos ser un riesgo para la salud pública?

“Tal vez”, respondió al diario Newsweek el profesor de genómica y bioinformática Jean-Michel Claverie, de la Universidad Aix-Marsella, en Francia. “Podrían ser virus antiguos que ya conocemos —como la viruela— y que pensamos erróneamente que ya estaban erradicados”, añadió. “También podrían ser virus que provocaron extinciones animales —o humanas— en el pasado, y de los que la medicina moderna no tiene consciencia. Lo mismo aplica para las bacterias, como las que provocan el ántrax”.

Las esporas de ántrax podrían permanecer viables en el permafrost hasta por 2 500 años. Según los expertos, las esporas de *Bacillus anthracis* se forman como parte de una reacción natural dentro del suelo. Es cuando los humanos entran en contacto con esta bacteria que pueden desarrollar desagradables ampollas, además de complicaciones posteriores en el caso de no recibir ayuda médica. Y aunque algunas comunidades han pasado décadas sin brotes de ántrax, el deshielo del permafrost está volviendo a liberar esta infección.

Virus y bacterias resurgen por el deshielo del permafrost provocado por el cambio climático

La longevidad de los virus deriva del hecho de que, técnicamente, no son seres vivos. Para activarse y reproducirse deben primero penetrar la célula de un organismo vivo. Fuera de la célula son partículas metabólicamente inertes llamadas *viriones*, “que podemos imaginar como semillas del virus activado” como apunta el profesor Claverie. Esto significa que no pueden morir en el sentido típico. Los viriones pueden ser ya sea infecciosos, cuando están listos para “germinar”, o inactivos, cuando se encuentran demasiado dañados para infectar o germinar. Dicho deterioro puede darse rápidamente fuera de una célula; por ejemplo, la luz hace un daño increíble al ADN (o ARN) del virus. La pérdida de humedad también puede provocar daños e incluso su inactivación. Sin embargo,

si las condiciones son propicias para su “supervivencia”, pueden permanecer infecciosos por períodos extensos. “Frío, oscuridad y nada de oxígeno [anóxico] es lo ideal”, dijo Claverie. Esto hace del permafrost y los sedimentos oceánicos profundos —fríos, oscuros y anóxicos— ambientes excelentes para los virus.

Las esporas de ántrax pueden sobrevivir por períodos extensos en estado latente. En la imagen: la cepa Sterne de la bacteria *Bacillus anthracis*, bajo una magnificación alta de 12,483X. Foto: SMITH COLLECTION/GADO/GETTY. Rosie McCall:



El cambio climático alterará drásticamente el mundo que habitamos, particularmente a largo plazo. Y aunque todavía no hemos visto el impacto que tendrá el derretimiento del permafrost en el mundo en su conjunto, este fenómeno ya ha tenido un efecto notable en los paisajes helados de la Tierra.

Referencias

<https://greedyfinance.com/index.php/es/2021/07/20/los-cientificos-dicen-que-hay-una-bomba-de-tiempo-geologica-escondida-bajo-alaska-y-podria-ser-catastrofica-2/22/>

<https://newsweekespanol.com/2020/02/derretimiento-glaci-res-permafrost-podrian-liberar-virus/>

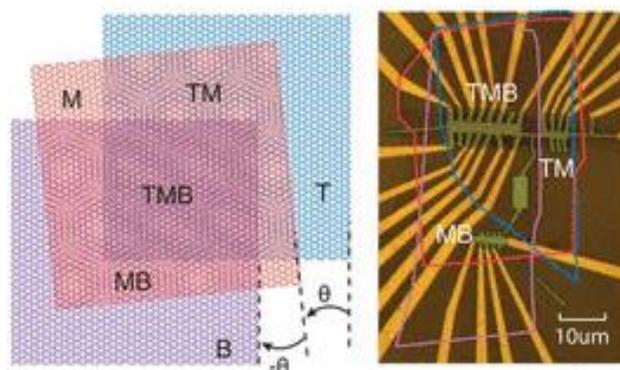
Superconductividad controlada en tricapas de grafeno (giradas un ángulo mágico)

Por: Francisco Morales

En el número 29 de Materiales Avanzados publicamos la noticia sobre la observación de superconductividad en dos capas de grafeno giradas un ángulo de $\theta \sim 1.1^\circ$, el “ángulo mágico” (con una temperatura de transición al estado superconductor $T_C = 1.7$ K). La observación de superconductividad en bicapas de grafeno ha promovido de manera importante el estudio de las bicapas en otros sistemas, como por ejemplo WSe_2 y WS_2 . Recientemente, Hao y colaboradores reportaron que tres capas de grafeno, giradas una respecto a la otra por el ángulo mágico $\theta \sim 1.56^\circ$, también presentan superconductividad.

Es importante señalar que la temperatura crítica depende del llenado de las bandas electrónicas, lo cual determina un *domo* al graficar T_C como función de la concentración de portadores de carga y tiene una T_C máxima de 2.1 K. Esta dependencia de T_C con respecto a la concentración de portadores se ha observado, por ejemplo, en las cerámicas superconductoras.

La modificación del llenado de las bandas en las tricapas de grafeno giradas (γ , por lo tanto, la variación de T_C) se puede lograr mediante el “dopado” con huecos o electrones. El “dopado” se controla mediante la aplicación de un campo eléctrico entre las capas externas de la tricapa. Una de las conclusiones de este artículo sugiere que la superconductividad en las tricapas de grafeno no es del tipo BCS. Que, en otras palabras, indicaría que el mecanismo de interacción entre electrones para formar pares de Cooper no es mediante interacción electrón-fonón. El artículo de Hao y colaboradores fue publicado en la revista *Science* **371**, 1133-1138 (2021).



40 años de lucha contra el Sida

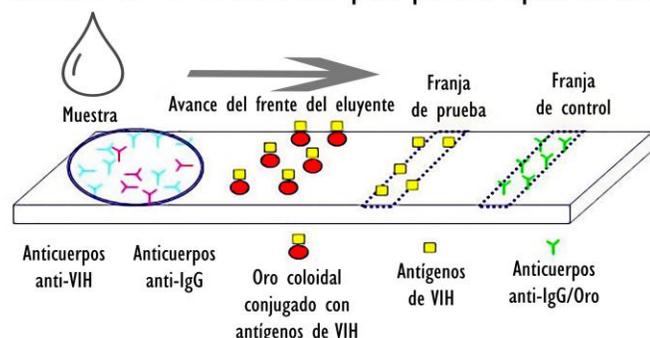
Por: Astron Martínez

Ahora mismo puede acudir a centros públicos especializados ubicados en todo el territorio nacional y realizarse una *prueba rápida* para detectar si usted tiene el Virus de Inmunodeficiencia Humano (VIH). Es gratis y los kits más modernos pueden, también, detectar sífilis. La ciencia de los materiales aplicada a la inmunocromatografía es la que nos permite elucidar el resultado de estos dos ensayos clínicos. Se hace evidente en apenas unos minutos: una banda de color rojo para resultados negativos; dos bandas indican un resultado positivo a la presencia de anticuerpos anti-VIH.

Tan valioso como el oro

Lo que usted observa a nivel macroscópico, al mirar los cartuchos de estas pruebas rápidas (las bandas coloreadas), se debe a la acumulación de oro coloidal. Para aquellas personas versadas en nanociencias no es ninguna sorpresa la coloración del oro (que en bulto y en estado metálico es de color dorado, y a escala nanométrica es de color rojo). Qué poético que este metal noble de la tabla periódica anuncie un resultado que, desde el punto de vista de salud pública, “vale oro”. El tiempo aquí es lo apremiante, ya sea para seguir practicando sexo protegido y donar sangre en el caso de resultados negativos, o comenzar el tratamiento oportuno para evitar que la condición de VIH positivo avance hasta las últimas etapas en las que se convierte en el Síndrome de Inmunodeficiencia Adquirida (mejor conocido como Sida).

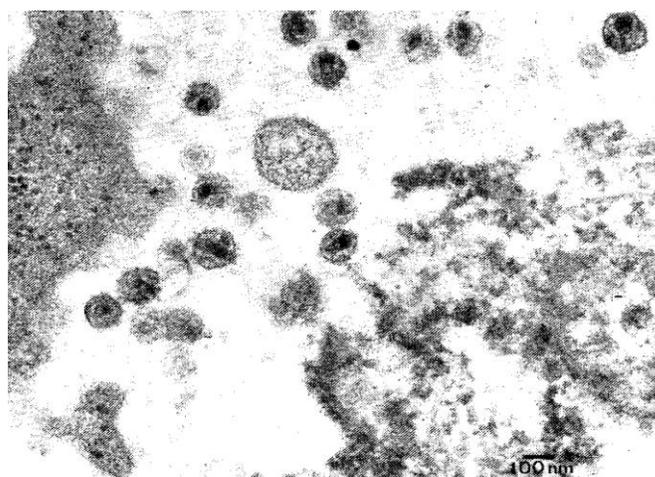
Cartucho de un kit comercial para prueba rápida de VIH



Afortunadamente, son otros los tiempos en los que vivimos y muchas personas que viven con el Virus de Inmunodeficiencia Humana nunca van a llegar a la etapa del Sida. También aquí hay mucho que agradecer a la ciencia e ingeniería de los materiales, y para entenderlo, debemos remontarnos a la historia de esta pandemia.

Lo que no se ve no existe

Las micrografías que por primera vez mostraron de manera convincente el aspecto del virus del VIH se publicaron en 1984, tras muchos esfuerzos —y algunos casos desleales de plagio científico, robo de muestras y lucha de patentes—. Fueron obtenidas mediante microscopía electrónica, como la que tanto utilizamos en nuestro Instituto para caracterizar materiales, y se suman a la galería de *Las imágenes más importantes de la Historia* por haber cambiado al mundo.



La temible “plaga gay” tenía al fin geometría y, contrario a lo que negacionistas anticientíficos murieron tergiversando, se estableció a este esquivo y frágil virus como agente causal del Sida.

Por debajo de las piedras

Sabiendo qué lo causa y cómo se transmite, llegó el tiempo de buscar tratamientos. Pero esto nunca fue así de sencillo. Si usted, estimada persona lectora, se dedica a la investigación científica básica o convive con gente de ciencia, no le resultará ajena la justificación escrita (sobre todo para obtener recursos o atención) que empieza con “posible tratamiento para el cáncer/VIH”, “nueva molécula con posible actividad anticancerígena/antiVIH”. Se ve *trascendente* en los protocolos de investigación y se ve atractivo a la hora de pedir financiamientos para hacer química básica (y “lo que se ve no se pregunta, ni se juzga”, dicen los *divos*). Si la persona encargada de dicho proyecto se sincera con usted le dirá que *ni de chiste* espera acercarse, siquiera, a la cura absoluta y definitiva del Sida (cáncer, Parkinson, Covid-19, diabetes, póngala aquí el padecimiento de su preferencia).

Lo anterior puede o no haberle desencantado de la Academia, pero en este caso en particular actuó a nuestro favor. Cientos de grupos de trabajo alrededor del mundo ensayando miles de formulaciones, tratamientos y moléculas diferentes tenían que llegar a algún resultado favorable, y así fue. En 1987 se obtuvo el permiso sanitario para vender Azidotimidina, el primer antirretroviral efectivo contra el VIH que aún se utiliza hoy en día, mezclado con otros fármacos térmicamente más estables (recordemos la fama explosiva de las azidas (N_3^-)).

Pero saltarnos un lustro de ensayos fallidos para presentar la molécula ganador sería bastante injusto. En aquellos tiempos, las personas con VIH se sentían sentenciadas a muerte y estaban ávidas de probar cualquier tratamiento que se les pusiera enfrente y les diera un ápice de esperanza. La comunidad científica también estuvo dispuesta a intentar cualquier cosa, y así lo hicieron. Intentaron con Azul de metileno (el mismo de las gotitas coloreadas que le ponemos a las peceras de ornato) e intentaron con productos naturales de la medicina herbolaria china (*Andrographis paniculata*), se ensayaron ligantes altamente afines a metales de interés biológico (como el agente quelante desferrioxamina) y se ensayaron compuestos propios de la ciencia de materiales que contienen metales nada convencionales dentro de sistemas vivos (como el $(NH_4)_{17}Sb_9Na_2W_{21}O_{86}$ o tungstato de antimonio HPA 23). Cualquier material, menjurje o compuesto inorgánico olvidado dentro de un vial podía ser un candidato viable hasta que se demostrase lo contrario.

Ciencia básica

En los años noventa se inventaron las mezclas de familias de compuestos antirretrovirales que utilizamos hoy en día, y aunque ya no inyectamos compuestos de antimonio y wolframio directamente en el torrente sanguíneo de nuestros pacientes, la ciencia de los materiales siguió aportando a la lucha contra el Sida. Este nuevo milenio llegó con nuevas propuestas: las partículas virales ya ensambladas son altamente geométricas y tienen, por lo tanto, frecuencias de resonancia bastante específicas, M. Babinová y sus colaboradores físicos (2000) propusieron utilizar ultrasonido para reducir la carga viral del VIH; también existe la opción de recubrir nanopartículas con receptores específicos que “confundan” a los virus, como publicó X. Wei y colaboradores (2018) del departamento de nanoingeniería de la Universidad de California en *Advanced Materials*. Ya sean polímeros, materiales funcionales, aleaciones metálicas o reología, muchos de los esfuerzos recientes en este sentido se han orientado a producir nanomateriales inteligentes que liberen fármacos

antivirales de forma controlada, como puede corroborarlo introduciendo *HIV + Materials Science* en su buscador de internet especializado. Intentos de vacunas ha habido bastantes, pero ninguno convincente. De hecho, mientras escribo este texto, varios activistas sociales cercanos a mí forman parte del ensayo clínico de la vacuna Mosaico, que se realiza a nivel mundial (con más de 300 voluntarios mexicanos).



¿Cómo sobrevivir una pandemia?

Este pasado 5 de junio de 2021 conmemoramos cuatro décadas de resistencia: ¡Cuarenta años de lucha contra el Sida! La bandera del orgullo LGBTI+ tiene una séptima franja de color negro, al final, que los activistas acordamos quitar el día que se halle la cura para el Sida. Es entonces mi homenaje entre líneas pintar este número de la revista *Materiales Avanzados* con recuadros negros y números rojos, a manera de moños de VIH (después de haber agotado todos los colores de la bandera arcoíris en los seis números anteriores en los que trabajé como coordinador editorial). Sobrevivimos, pues, con orgullo, con empatía, solidaridad y con trabajo orientado a nuestras poblaciones más vulneradas.

El VIH ya no es una sentencia de muerte en el mundo occidental moderno. La historia nos ha mostrado que las pandemias también pasan, como pasan las tormentas y el mal tiempo. Ninguna “plaga” puede ser eterna. Mucho podemos aprender del manejo de la crisis del VIH en estos tiempos del SARS-CoV-2. Lo más importante de todo sea quizá la esperanza.

Referencias

- ISBN 9681685857
 doi: 10.1016/s0140-6736(84)91275-3
<https://doi.org/10.1002/adma.201802233>
<https://doi.org/10.1054/mehy.2000.1088>
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Ammonium-antimony-sodium-tungsten-oxide>
<https://slidetodoc.com/detection-of-hiv-infection-in-the-laboratory-using/>
 doi:10.1186/1742-4690-6-40
<https://www.gob.mx/censida/articulos/prueba-para-deteccion-de-vih?idiom=es>
<http://www.aids-sida.org/archivos/capasits/directoriocapa.html>



M. Elissa 2019.



Catalizadores heterogéneos multicomponentes y su aplicación en la industria de transformación de hidrocarburos

Diego Valencia

Dirección de Investigación en Transformación de Hidrocarburos, Instituto Mexicano del Petróleo

dvalencia@imp.mx

Cerca del 90 % de procesos químicos industriales actuales utilizan un catalizador en alguna de sus etapas.[1] Los catalizadores heterogéneos destinados a aplicaciones industriales han cobrado importancia desde hace varias décadas. El término catalizador es ya bastante conocido y se refiere a sustancias y materiales capaces de acelerar la rapidez de las reacciones químicas, sin que estos cambien su composición. El término heterogéneo hace referencia a que dicho catalizador se encuentra en una fase distinta a aquella de los compuestos químicos que reaccionan y se forman, y aquí radica parte de su gran importancia. Al no mezclarse con la fase de los reactivos ni con sus productos, se vuelven comercialmente atractivos a razón de la nula necesidad de costosos procesos de separación para su recuperación.

Ejemplos de ellos los hallamos en la industria de la refinación del petróleo y la industria química. Aquí son fundamentales, pues se obtienen altas conversiones en tiempos cortos y con materiales que pueden utilizarse en lechos fijos o fluidizados durante varios meses, alimentando constantemente corrientes de reactivos a convertir y separando sus productos.

Con todo y su gran importancia industrial, el desarrollo y puesta en marcha de catalizadores heterogéneos se ha hecho con poco conocimiento científico y sin muchas bases moleculares. Esto puede sonar un poco contradictorio, si uno piensa en otras áreas de la Ciencia de materiales.[2] Aunque existen varias razones para comprenderlo, no será el motivo de este artículo. Lo que sí se puede mencionar al respecto es la existencia de secrecía industrial, patentes y propiedad intelectual que se encuentran sumamente resguardadas por las grandes compañías; otro factor radica en la complejidad de los componentes que impide poder estudiarlos con métodos de rutina y las habilidades tan específicas que son necesarias para llevar a la práctica sistemas heterogéneos (que son más heterogéneos de lo que se cree en un inicio); otro factor que podría mencionar radica en el poco interés que han despertado en la comunidad científica dichos materiales. La falta de contacto con la realidad industrial aplicada la convierte en un campo poco explorado.

En la Figura 1 se muestran las formas de los catalizadores heterogéneos, el polvo es la etapa previa a la extrusión y son los que se diseñan y estudian a nivel laboratorio. Los catalizadores extruidos se encuentran en una fase de mayor maduración tecnológica y son los que llegan a comercializarse para uso industrial.



Figura 1. Catalizadores heterogéneos en diferentes etapas de escalamiento y forma. (a) polvo, (b) extruido cilíndrico y (c) extruido esférico.

Catalizadores en la refinación del petróleo

La industria de la refinación del petróleo emplea catalizadores en la mayoría de sus procesos. Es importante mencionar que la complejidad de los crudos pesados y extrapesados que se procesan se ha vuelto mayor en tiempos recientes, por lo que el diseño de catalizadores mayormente activos, selectivos y resistentes es apremiante. En la Figura 2 se muestra un catalizador utilizado para el proceso de *Craqueo catalítico* o FCC (*Fluid Catalytic Cracking*). De este catalizador, su composición química exacta, al igual que ciertos aspectos de su síntesis, es información abierta. La composición de los catalizadores de FCC es crucial para obtener un desempeño apropiado en la formación (durante la refinación del petróleo) de fracciones ligeras, mejor conocidas como gasolinas.

Las sustancias activas son las zeolitas, que tienen una gran capacidad de craqueo y son de fácil manejo. Principalmente se utilizan la HY, REY y USY. La combinación de estas con los centros activos de las zeolitas ZSM-5 permiten aumentar el octanaje de los productos. También se ha estudiado la adición de diferentes compuestos que permita optimizar propiedades específicas, además de los compuestos que mantienen unidos a los componentes en una partícula catalítica. La mayor parte de estas se encuentran conformadas por partículas grandes derivadas de sílica (SiO_2), alúmina (Al_2O_3), sílica-alúmina coloidal, arcillas naturales o una mezcla de estas últimas dos. La alúmina (o sílica-alúmina) ácida se utiliza durante el precrqueo de moléculas grandes de hidrocarburos, mientras que la sílica se prefiere cuando lo que se busca es un medio inerte para la difusión y para diluir la capacidad de craqueo de la zeolita (evitando, con esto, un exceso de productos desintegrados, que pueden llegar hasta compuestos gaseosos, indeseados para el proceso).[3]

Es importante destacar que cada uno de los componentes del cuerpo catalítico (los sitios activos, aglutinantes, óxidos y aditivos) juegan un rol bastante específico y es su correcta combinación lo que permite que el catalizador funcione tal y como se requiere en los procesos químicos. Aunque los sitios activos del material tienen el papel principal y pueden considerarse como el “eje del material”, cada uno de los componentes alrededor del mismo es de vital importancia. La comparación entre un catalizador heterogéneo (en forma de polvo) y un cuerpo catalítico es equiparable a aquella que existe entre un músico solista frente a un músico que ejecuta él solo varios instrumentos al mismo tiempo para hacerlos sonar en armonía.

Esto nos permite entender el valor del conocimiento exacto acerca del cuerpo catalítico y los detalles de su aplicación; y cómo su gran explotación industrial busca a toda costa la protección estricta de esta información.

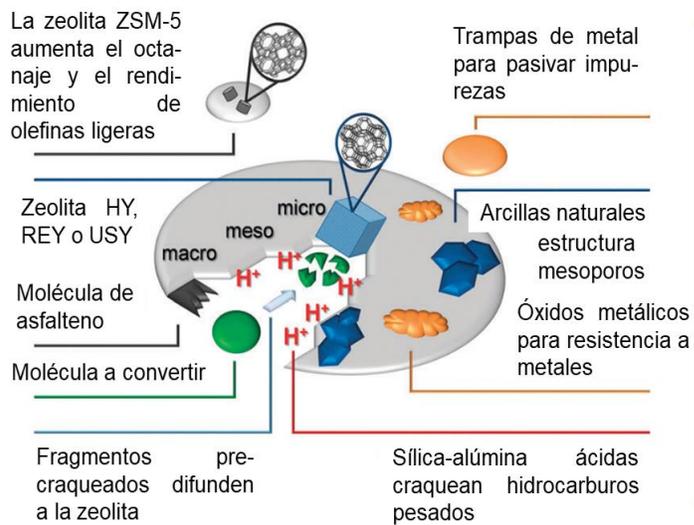


Figura 2. Diagrama de la composición de un catalizador multicomponente, o cuerpo catalítico de FCC, en estado libre de humedad y con forma de microesferas. Adaptado de la ref. 3.

Visualización de sitios activos

El desarrollo de técnicas espectroscópicas, mayor sensibilidad de detectores, la posibilidad de acoplarse con microscopios y, por supuesto, los microscopios electrónicos, han brindado valiosa información, necesaria para comprender las características de estos materiales [4]. También es cierto que el estudio con técnicas avanzadas requiere, en algunas ocasiones, acoplar estos materiales con moléculas “sonda” o moléculas “prueba” para así tener mayor información fisicoquímica de los sitios catalíticamente activos, las interacciones con los diferentes componentes en la matriz, fuerza de acidez, entre otros. En este sentido, existe el acoplamiento de microscopios con técnicas espectroscópicas como UV-Visible, infrarrojo, fluorescencia, Raman y aquellas basadas en absorción de rayos X [5][6].

En la Figura 3 se muestra la caracterización de catalizadores de FCC por medio de microscopía de fluorescencia confocal en diferentes condiciones. La partícula fresca, sin ningún tratamiento, tiene una gran cantidad de cristales que presentan sitios activos en la zeolita, mismos que pueden reaccionar con las moléculas sonda, formando especies químicas fluorescentes (y por esta razón pueden detectarse con esta técnica). Las otras partículas se someten a diferentes tratamientos que buscan disminuir el número de sitios ácidos dentro de la zeolita para una fracción a tratar que requiere un craqueo moderado y esto se observa claramente en la disminución de regiones detectables por esta técnica. El grado de desactivación (o la anulación de sitios activos para que las moléculas sonda reaccionen) hace que las regiones detectables por medio de esta técnica casi desaparezcan, dejando partículas sin sitios ácidos activos.

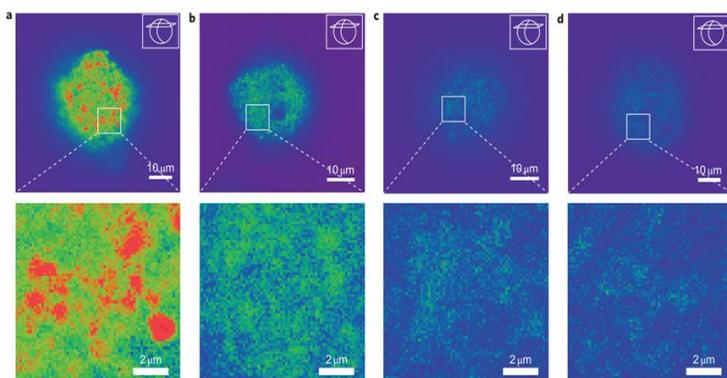


Figura 3. Imágenes de catalizadores FCC después de la reacción *in situ* con tiofeno (molécula sonda) obtenidas mediante microscopía de fluorescencia confocal. Tratamiento previo a la exposición con tiofeno: (a) sin tratamiento, (b) vapor de agua, (c) dos pasos de desactivación y (d) impregnación de Mitchell y desactivación con vapor de agua. Las regiones en rojo muestran una alta densidad de sitios ácidos activos, capaces de formar especies fluorescentes al reaccionar con tiofeno. Adaptado de la Ref. 6.

Las moléculas “sonda” o “prueba” sirven para algo análogo a las tinciones histológicas (ampliamente utilizadas en Biología), pero de los sitios activos. Hasta ahora se han empleado moléculas sonda derivadas del tiofeno, estireno, furfural alcohol, entre otras especies químicas que son muy reactivas a los sitios ácidos de las zeolitas y que puedan correlacionar directamente con la acidez en distintos materiales [7][8][9][10]. Estas moléculas son generalmente aromáticas y cumplen con ciertos criterios estructurales, electrónicos y magnéticos. Adicionalmente, son capaces de formar especies detectables espectroscópicamente; incluso algunas forman

especies fluorescentes que son estables en un lapso considerable, lo cual permite identificarlas y asignar valores medibles mediante experimentos *in situ*. El desarrollo de nuevas moléculas que permitan detectar sitios específicos tiene un gran potencial para el avance en el conocimiento de las propiedades de los cuerpos catalíticos de importancia industrial, su complejidad y su carácter heterogéneo (Figura 4).

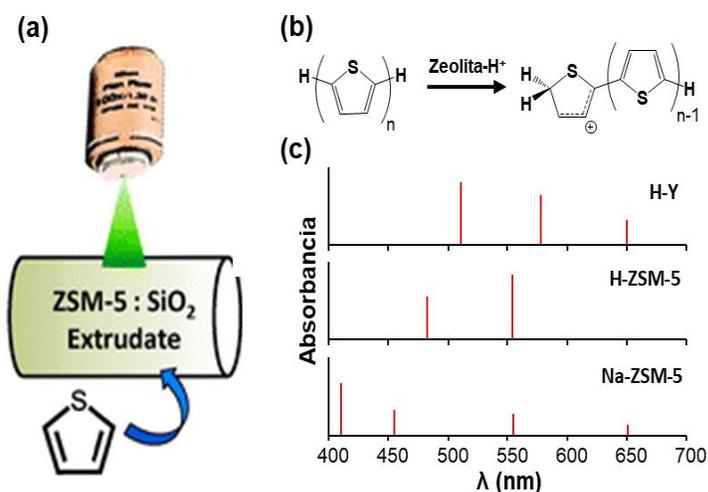


Figura 4. (a) Esquema de caracterización de extruidos cilíndricos de materiales catalíticos: lente de un microscopio acoplado con un espectrofotómetro; el extruido reacciona con tiofeno en diferentes regiones espacio-temporales. (b) Reacción química que ocurre entre la zeolita presente en el extruido, el tiofeno y derivados. (c) Espectros electrónicos en la región visible obtenidos en diferentes zeolitas que estuvieron en contacto con tiofeno y la formación de sus derivados. Adaptado de Ref. 10-11.

Aunque a la fecha es posible investigar a las zeolitas y los cuerpos catalíticos con matriz, al igual que comprender los efectos que tienen los pretratamientos, desactivación, fuerza de sitios ácidos y de composición química de los materiales heterogéneos [11][12], esta sigue siendo un área con grandes retos desde una perspectiva científica y tecnológica. La información fisicoquímica necesaria para comprender su desempeño requiere de nuevos conocimientos, métodos y experimentos con técnicas avanzadas. No obstante, la posibilidad de incrementar rendimientos, selectividades y reducir tiempos de reacción dentro de los procesos es de gran interés comercial, pues esto haría que los procesos industriales fueran más rentables, eficientes y con un menor impacto ambiental. Se trata entonces de un fecundo campo para futuros temas de investigación y mayores esfuerzos multidisciplinarios.

Bibliografía

- [1] J. N. Armor, "A history of industrial catalysis," *Catal. Today*, vol. 163, no. 1, pp. 3–9, 2011.
- [2] F. Zaera, "The New Materials Science of Catalysis: Toward Controlling Selectivity by Designing the Structure of the Active Site," *J. Phys. Chem. Lett.*, vol. 1, no. 3, pp. 621–627, Feb. 2010.
- [3] S. Mitchell, N. L. Michels, and J. Pérez-Ramírez, "From powder to technical body: The undervalued science of catalyst scale up," *Chem. Soc. Rev.*, vol. 42, no. 14, pp. 6094–6112, 2013.
- [4] A. J. Martin, S. Mitchell, K. Kunze, K. C. Weston, and J. Pérez-Ramírez, "Visualising compositional heterogeneity during the scale up of multicomponent zeolite bodies," *Mater. Horiz.*, vol. 4, no. 5, pp. 857–861, 2017.
- [5] M. H. F. Kox, E. Stavitski, and B. M. Weckhuysen, "Nonuniform catalytic behavior of zeolite crystals as revealed by in situ optical microspectroscopy," *Angew. Chemie - Int. Ed.*, vol. 46, no. 20, pp. 3652–3655, 2007.
- [6] I. L. C. Buurmans, J. Ruiz-Martínez, W. V. Knowles, D. Van Der Beek, J.A. Bergwerff, E.T.C Vogt, B.M. Weckhuysen, "Catalytic activity in individual cracking catalyst particles imaged throughout different life stages by selective staining," *Nat. Chem.*, vol. 3, no. 11, pp. 862–867, 2011.
- [7] F. L. Cozens, R. Bogdanova, M. Régimbald, H. García, V. Martí, and J. C. Scaiano, "Photochemical and thermal behavior of styrenes within acidic and nonacidic zeolites. Radical cation versus carbocation formation," *J. Phys. Chem. B*, vol. 101, no. 35, pp. 6921–6928, 1997.
- [8] H. García and H. D. Roth, "Generation and reactions of organic radical cations in zeolites," *Chem. Rev.*, vol. 102, no. 11, pp. 3947–4007, 2002.
- [9] F. C. Hendriks, D. Valencia, P. C. A. Bruijninx, and B. M. Weckhuysen, "Zeolite molecular accessibility and host – guest interactions studied by adsorption of organic probes of tunable size," pp. 1857–1867, 2017.
- [10] D. Valencia, G. T. Whiting, R. E. Buló, and B. M. Weckhuysen, "Protonated thiophene-based oligomers as formed within zeolites: understanding their electron delocalization and aromaticity," *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 18, no. 3, pp. 2080–2086, 2016.
- [11] G. T. Whiting, F. Meirer, D. Valencia, M.M. Mertens, A.J. Bons, B.M. Weiss, P.A. Stevens, E. de Smit, B.M. Weckhuysen, "Selective staining of Brønsted acidity in zeolite ZSM-5-based catalyst extrudates using thiophene as a probe," *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 16, no. 39, 2014.
- [12] G. T. Whiting, F. Meirer, M.M. Mertens, A.J. Bons, B.M. Weiss, P.A. Stevens, E. de Smit, B.M. Weckhuysen, "Binder Effects in SiO₂- and Al₂O₃-Bound Zeolite ZSM-5-Based Extrudates as Studied by Microspectroscopy," *ChemCatChem*, vol. 7, no. 8, pp. 1312–1321, Apr. 2015.

Charlas superficiales

Violeta A. Márquez Cruz

Institut national d'optique, Quebec, Canadá

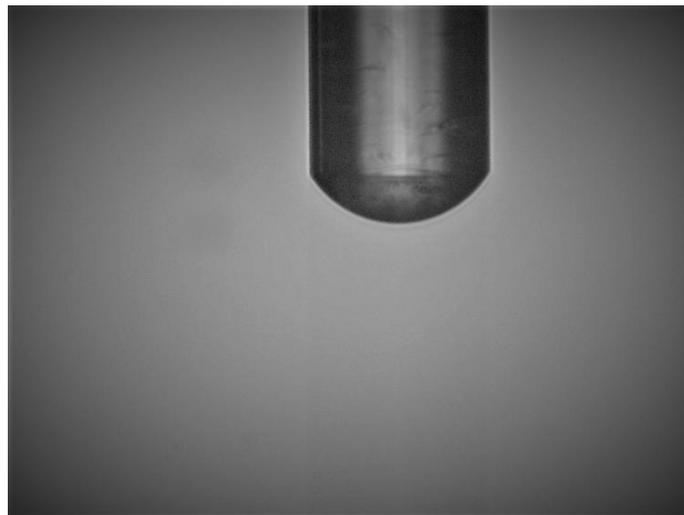
violeta.marquez@gmail.com

Comenzaba el otoño y esa mañana no soplaba el viento, por lo que el frío era soportable. Afortunadamente me llevé al viaje aquella gorra beige que a ratos me tejió mi mamá en los años en los que tomó por pasatiempo los ganchos y el estambre, cuando inexplicablemente le sobraba energía y buscaba siempre cosas para entretenerse. La Ciudad de México pocas veces amerita usar gorra, aún en invierno, así que estaba casi nueva. Llegué la noche anterior y alquilé una habitación en el *bed & breakfast* de un pequeño pueblo cerca de Estocolmo.

Era la primera vez que salía del país y que ponía a prueba mi dominio del idioma inglés (que por suerte los suecos hablan, casi siempre, sin problema). En realidad, este viaje había empezado cuando yo tenía unos trece años y me enteré de que, además de una carrera profesional, se podía seguir estudiando una maestría y un doctorado. En aquel momento en el que se me metió esa idea en la cabeza todavía no sabía acerca de todas las cosas que venían incluidas en ese mismo paquete. Una sorpresa agradable fue enterarme de que, una de las formas en las que se comunica la ciencia recién horneada, es durante los congresos científicos. Más interesante aún fue darme cuenta de que esta práctica también implicaba grandes aprendizajes, mucho más allá del trabajo científico en laboratorios o en los trabajos de campo, pues se conocen lugares, gente, cultura e historias que cambian la percepción de nuestro entorno y nos construyen una nueva perspectiva.

Son las 10:30 am y es hora de mi presentación. Desde muy temprano intenté vanamente lidiar con los nervios y con la emoción. Me sentía intimidada pues mi trabajo era, en el fondo, algo relativamente simple; desprovisto de aquellos términos

superlativos que están tan de moda: *ultra*, *hiper*, *super*, *nano*, *micro*... En esencia, mi trabajo consistía en medir el tamaño de gotas adheridas a la punta de una fibra de vidrio después de sumergirla en un líquido. Esta medición se puede hacer por medio de fotografías, pero también se puede hacer aprovechando la interacción de un haz de luz que pase a través de la fibra y después a través de la gota. Esto nos da información sobre otras propiedades del líquido, además de la energía de superficie (mejor conocida como tensión superficial) que es diferente para cada sustancia. La aparente *simpleza* de mi tema de investigación me apasionaba y, paradójicamente, con el tiempo he confirmado lo que en aquel momento comenzaba a descubrir: si se observa con paciencia y atención, en los fenómenos aparentemente simples pueden encontrarse una buena cantidad de intrincados secretos.



¿Pero a quién le interesa una gota en la punta de una fibra? Si lo planteamos de esta forma, me queda claro que no hay mucha gente alrededor del mundo interesada en dedicar su tiempo a este peculiar experimento. No obstante, *una gota en la punta de una fibra* se relaciona con una gran cantidad de fenómenos que suceden en la naturaleza, en lo cotidiano, y que guardan –todavía– secretos por revelar. Así, con gran ilusión yo esperaba contribuir, no con mi granito de arena, sino con una gotita de entendimiento en el océano de los complejos fenómenos simples.

Mis emociones presagiaron lo que vendría: la presentación no fue lo que esperaba. No hubo mucho interés y las intervenciones resultaron poco o nada constructivas, así que regresé a mi asiento desilusionada. Para rematar mi suerte, la persona que estaba justo delante de mí se sirvió los últimos asientos de la cafetera durante la pausa entre sesiones. Mientras me cambiaba de fila vi a una mujer de edad algo avanzada que de muy buena gana tomaba de la mesa tres galletas, ¡tres! (de las grandes, de las que tienen chispas de chocolate). Pero bueno, solo ella sabía los tiempos y las formas en las que esas galletas verían el fin de sus días. Volteó la cabeza para decirme que, en su ciudad de origen, ese mismo tipo de galletas eran muy malas. Si lo eran o no poco me importaba. Después de la serie de duros reproches que me hice a mí misma, lo que en verdad necesitaba en ese momento era salir de allí –de preferencia con café y con al menos una galleta– así que tomé lo estrictamente necesario para endulzar la decepción que llevaba a cuestas.

El congreso continuó como marcaba el programa. Busqué un asiento mientras se presentaba la sesión de carteles y ahí comí algunos bocadillos –porque, mexicana al fin, las penas con pan son menos–. Con la copa en una mano y un plato de comida en la otra corría el riesgo de causar algún accidente en el tumulto de los asistentes. Fue en medio de los malabares cuando la misma mujer que encontré en la fila de las galletas apareció y, sin hacer ruido, se sentó a mi lado izquierdo. Parecía ser una mujer muy simpática, probablemente científica, y con una pronunciación del inglés impecable, aunque me hacía pensar que seguramente no era originaria de algún país anglófono. En otras circunstancias tendría cierta reticencia a eso que en inglés le llaman *small talk*: la plática casual, superficial y que a veces se torna incómoda, sobre el estado del tiempo y otras cosas impersonales y estereotípicas. Pero justo en ese momento estaba cruzando los dedos para que nuestra conversación tomara esa ruta y no la apabullante posibilidad de que alguien osara recordar mi presentación durante el congreso. Fue entonces que me dijo: “Yo estuve en tu

presentación esta mañana”. No estaba con el ánimo de responder cuestionamientos, y por suerte no lo hizo. Ella se limitó a compartirme la inspiradora historia de Agnes Pockels, química que murió el mismo año en que ella había nacido y que, curiosamente, vivió en el mismo vecindario. Fue así como me enteré del lugar de origen de mi interlocutora.



Desde la cocina

De padres alemanes, Agnes Pockels nació en Venecia en 1862, aunque algunos años después su familia completa se mudó a Brunswick. Siempre demostró interés en las ciencias y habría querido asistir a la universidad, pero tuvo la mala suerte de haber nacido en una época en la que las mujeres no tenían acceso a los estudios superiores. Además, al ser la hija mujer, tenía por responsabilidad –según las costumbres de la época– hacerse cargo de su madre y su padre (los dos enfermos) y de las tareas de la casa. Por suerte su hermano menor –y único–, Friedrich, estudiaba Física en la universidad, y gracias a eso ella tuvo acceso a libros y algunas publicaciones científicas que fueron de utilidad en su formación autodidacta.



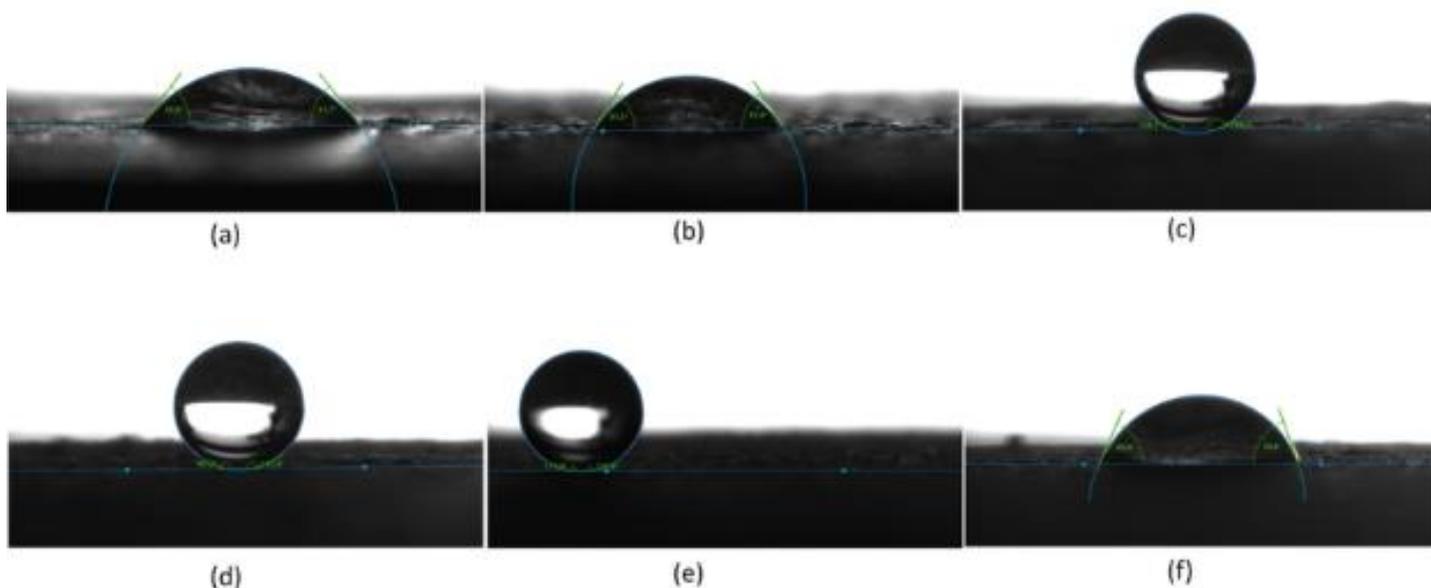
Fotos de la colección de José Manuel Posada de la Concha

Con una buena dosis de ingenio, pudo crear en su cocina un laboratorio y allí estudió lo que millones de personas –siendo en esa época asunto exclusivamente de mujeres– vemos todos los días con no poca aversión por parecer una interminable tarea: los trastos sucios. Para ser más precisa, el interés de Agnes se centraba en estudiar el comportamiento del agua, particularmente el de la superficie cuando esta tenía algún tipo de contaminación.

Para ese entonces ya se exploraban algunas ideas alrededor de la tensión superficial y se sabía que las propiedades de la superficie del agua cambian debido a la formación de películas de otras sustancias. Es gracias a estos estudios que ahora se entiende, entre otras cosas, el principio por el que los detergentes disueltos en agua actúan sobre los trastos o la ropa sucia. En buena medida, se debe a los estudios realizados durante aquella época que se desarrollaran las teorías actuales de la Ciencia de superficies. Esta amerita un apartado especial dentro del estudio de los materiales, pues al tratarse de moléculas que se encuentran en la interfase –la frontera de dos medios (por ejemplo, líquido y gas)–, presentan propiedades muy distintas a las de las moléculas que se encuentran en el volumen. Las moléculas en la superficie no tienen moléculas vecinas “por encima” con las cuales puedan enlazarse, por lo tanto, debe existir una energía particular que mantenga esas moléculas unidas, con más o menos fuerza, como si se tratase de una película elástica.

Esto hace que de manera natural los líquidos busquen un estado de equilibrio tomando la forma en la que el área de su superficie sea mínima en función de su tensión superficial, formando, por ejemplo, gotas. Esta energía, la tensión superficial, es la que permite que los mosquitos puedan caminar en el agua, o lo que hace que las gotas de lluvia depositadas delicadamente sobre algunas superficies tengan una forma prácticamente redonda, como puede observarse en hojas de muchas plantas o en las plumas de las aves. En otros casos, la tensión superficial determina que ciertos líquidos, como las pinturas comerciales, se distribuyan de manera homogénea en una superficie o se separen en gotas-islas después de aplicarlas. También esto explica que el aceite de cocina se nos escape de los envases, aunque estos se encuentren bien cerrados.

Todos los días nos tropezamos con curiosidades relacionadas con las interacciones de los líquidos con superficies sólidas, y muchas veces la rutina nos hace obviarlas. Un experimento interesante resulta de la comparación entre lavar bajo el chorro de agua las hojas de la col verde (también llamada kale) y las hojas de lechuga *iceberg*, la redondita. Puede notarse que en el kale el agua se escurre prácticamente sin mojar las hojas. Este efecto toma el nombre de la flor de loto, pues se dice que es una flor que, a pesar de crecer en un pantano, siempre se mantiene limpia. Esta condición se debe a la compleja interacción entre una simple gota de agua posada sobre un tejido vegetal con micro y nanoestructuras (millones o miles de millones de veces más pequeñas que un metro).



Dichas estructuras hacen que la superficie de la planta rechace naturalmente el agua, llevándose consigo todo aquello que podría ensuciar la flor. A esta propiedad se le conoce como hidrofobicidad que, para el caso de las flores de loto, lleva además el prefijo *ultra*. Otro ejemplo cotidiano de interacciones entre líquidos y superficies sólidas lo podemos encontrar en la cocina, siempre que tenemos que limpiar las botellas de aceite y las manchas que dejan a su alrededor. Dada su baja tensión superficial, los aceites vegetales tienden a esparcirse por las superficies hasta formar una película muy delgada. Se dice entonces que el aceite sobre el vidrio tiene una alta mojabilidad.

Así, el estudio de simples configuraciones de gotas y superficies nos ha llevado a desarrollos como las superficies de hornos con autolimpieza, pinturas que se distribuyen mejor en las superficies o pinturas antigrafiti, telas “inteligentes” que permiten que el aire pase a través de ellas pero que a la vez sean repelentes al agua, películas antirreflejantes para anteojos y otras curiosidades a nuestro alrededor. Ante la aparente simplicidad de la superficie de los líquidos –y los materiales en general–, muchos años después, el famoso científico Wolfgang Pauli, dos veces ganador del Premio Nobel (uno de Física), tuvo el tino de decir que “Dios hizo el volumen; la superficie fue inventada por el diablo”.

Las superficies, películas del espesor de una molécula que se encuentran en la frontera de dos medios, han sido la causa de los dolores de cabeza de no pocos científicos. Las superficies de los líquidos son particularmente sensibles a la contaminación con otras sustancias; Agnes lo sabía e hizo meticulosos experimentos para medir su correlación de manera sistemática.

Diseñó un dispositivo casero con un recipiente rectangular (un pequeño estanque de área extendida y poca profundidad) donde, por medio de una barra deslizante, podía cambiar el área superficial. Todo esto acoplado a un sistema de pesas para medir la forma en la que cambiaba la fuerza asociada a la tensión superficial del agua al agregar contaminantes de manera controlada. Hizo experimentos, tan precisos como las condiciones domésticas lo permitían, y anotó sus observaciones. En enero de 1891, después de haber leído los resultados publicados por Lord Rayleigh (científico que entonces era secretario de la Real Sociedad de Londres y que en 1904 sería galardonado con el Premio Nobel) sobre sus experimentos relacionados con superficies de agua, Agnes Pockels decidió escribirle una carta para comunicarle sus propias observaciones. Esta carta posteriormente fue publicada en la prestigiosa revista científica *Nature*, y fue a partir de ese momento que empezó a conocerse el trabajo científico de Agnes. A la postre, publicó dieciséis artículos científicos con los resultados de más de dos décadas de trabajo.

La casa editorial que publicaba las revistas científicas que ella consultaba cerró debido a problemas resultantes de la Primera Guerra Mundial y su hermano, quien le facilitaba literatura científica, había fallecido. Por si esto fuera poco, su salud y su vista empezaban a mermar. Todas estas circunstancias la orillaron a abandonar su trabajo experimental.

Más de cuarenta años después, el dispositivo que construyó Agnes en su cocina fue la idea que utilizaría Katherine Blodgett, junto con su mentor Irving Langmuir (otro galardonado con el Premio Nobel) como la base de una de las técnicas más utilizadas actualmente para depositar películas del espesor de una molécula sobre sustratos.



A grandes rasgos, la idea es bastante simple: se coloca dentro de un recipiente lleno de líquido una muy pequeña cantidad de sustancia que se distribuirá uniformemente sobre la superficie. El sustrato donde se quiere depositar la película se coloca de manera vertical dentro del líquido y se extrae a velocidad controlada. Como resultado se observará que, sobre el sustrato, se adhiere una capa del espesor de una molécula de la sustancia que flotaba en la superficie. Aunque de inicio el mecanismo de operación parece simple, su efectividad requiere conocer muy bien el comportamiento de las superficies de los líquidos y sus interacciones con los diferentes tipos de sustratos sólidos.

Asuntos de mujeres

No cabe duda de que estamos hablando de tiempos especialmente difíciles para las mujeres. Tuvieron que pasar treinta años después de que Agnes Pockels enviara su carta a Lord Rayleigh para que, en Alemania, las mujeres ganaran el derecho al voto. En 1918, Katherine Blodgett fue la primera mujer en trabajar como científica para la compañía General Electric y en 1924 fue la primera mujer en obtener un doctorado en Física por la Universidad de Cambridge. Agnes Pockels recibió algunos reconocimientos en vida, incluyendo la medalla Laura R. Leonard de la Sociedad Alemana de Coloides, además de ser la primera mujer en recibir un doctorado honorario de la Universidad Técnica de Brunswick. Muchos más han venido después de su muerte e incluso actualmente hay un laboratorio en Alemania que lleva su nombre.

La historia de Agnes Pockels nos presenta un ejemplo de cómo los secretos de la naturaleza se revelan a quienes tienen interés, paciencia y prestan atención a los fenómenos que ocurren a su alrededor. Una actividad que a la mayoría nos resulta desalentadora, pudo convertirse en una fuente de inspiración para una mujer. En otras circunstancias, esa misma mujer podría haber encontrado otra fuente de inspiración, fuera del ámbito doméstico; en esas mismas otras circunstancias, podría haber sido un hombre quien encontrara allí el detonador de sus investigaciones. Por otro lado, esta historia nos aporta una oportunidad para reflexionar respecto a la resiliencia ante las circunstancias inherentes a su tiempo que limitaban el potencial de las mujeres. Podemos igualmente preguntarnos sobre las cosas que todavía tienen que cambiar para permitir un acceso más igualitario para las mujeres —y las poblaciones vulneradas en general— a la educación y al trabajo científico y técnico, en el que sigue prevaleciendo la participación de los hombres y que lamentablemente se

encuentra matizado —si no inundado— con muchos prejuicios. Las dificultades a las que las mujeres se han enfrentado a lo largo de la historia, particularmente en cuanto al desarrollo del trabajo científico, se hacen en parte evidentes en las cifras actuales. Por ejemplo, si hablamos de las dos disciplinas que están conectadas con el estudio de las superficies, a la fecha, de un total de 407 galardonados con el Premio Nobel de Física o Química, solamente 11 han sido mujeres. Confieso que el año 2020 me sorprendió con una grata sorpresa: 3 de los 5 científicos reconocidos con la preseña para estas dos disciplinas fueron mujeres. Poco a poco la situación comienza a cambiar, pero aún queda mucho trabajo por hacer.

¿La investigadora con quien hablé en aquel congreso me contó esta historia para levantarme el ánimo?, quizás. Lo que sí sé es que, en ese momento, ella pudo ponerse en mis zapatos y me ayudó a restaurar mi golpeado amor propio. Ahora, con la perspectiva que me ha dado el transcurrir de los años, me doy cuenta de que hizo mucho más que eso: en tan solo media hora logró convencerme de la importancia de seguir en esta profesión. Me gusta pensar que la historia de Agnes Pockels es una invitación a no perder la curiosidad en las pequeñas cosas, esa curiosidad que a veces se pierde al llegar a la edad adulta. Es una invitación a no dejar de cuestionarnos ni el universo físico ni los esquemas sociales, gracias a —y, en muchas ocasiones, a pesar de— nuestras circunstancias individuales.

Algunos conceptos

Tensión superficial: Es la tendencia a contraerse que presentan las superficies de los líquidos y que las hace tomar la forma que tenga la menor área posible. Es el resultado de la fuerza de cohesión que existe entre las moléculas que se encuentran en la superficie y depende de las propiedades particulares de cada líquido. El agua tiene el valor de tensión superficial más elevado entre muchos otros líquidos convencionales (aceites, alcoholes, etc.).

Hidrofobicidad: El término hidrofobicidad se forma de la unión de dos raíces griegas: *hidro*, que significa agua, y *fobos*, que significa miedo. La hidrofobicidad es una propiedad de los materiales que determina el grado de “rechazo” que le tienen al agua. El caso opuesto se encuentra con los materiales hidrofílicos (del griego *filia*, amor), que tienen una atracción natural al agua. La forma de determinar el grado de hidrofobicidad de un material es a través del ángulo de contacto que forma una gota de agua posada en la superficie. Así, en los casos extremos, cuando la gota tiende a mantener su forma esférica, se dice que la superficie es superhidrofóbica, mientras que, si la gota tiende a esparcirse en esta, se habla de una superficie hidrofílica.

Imágenes

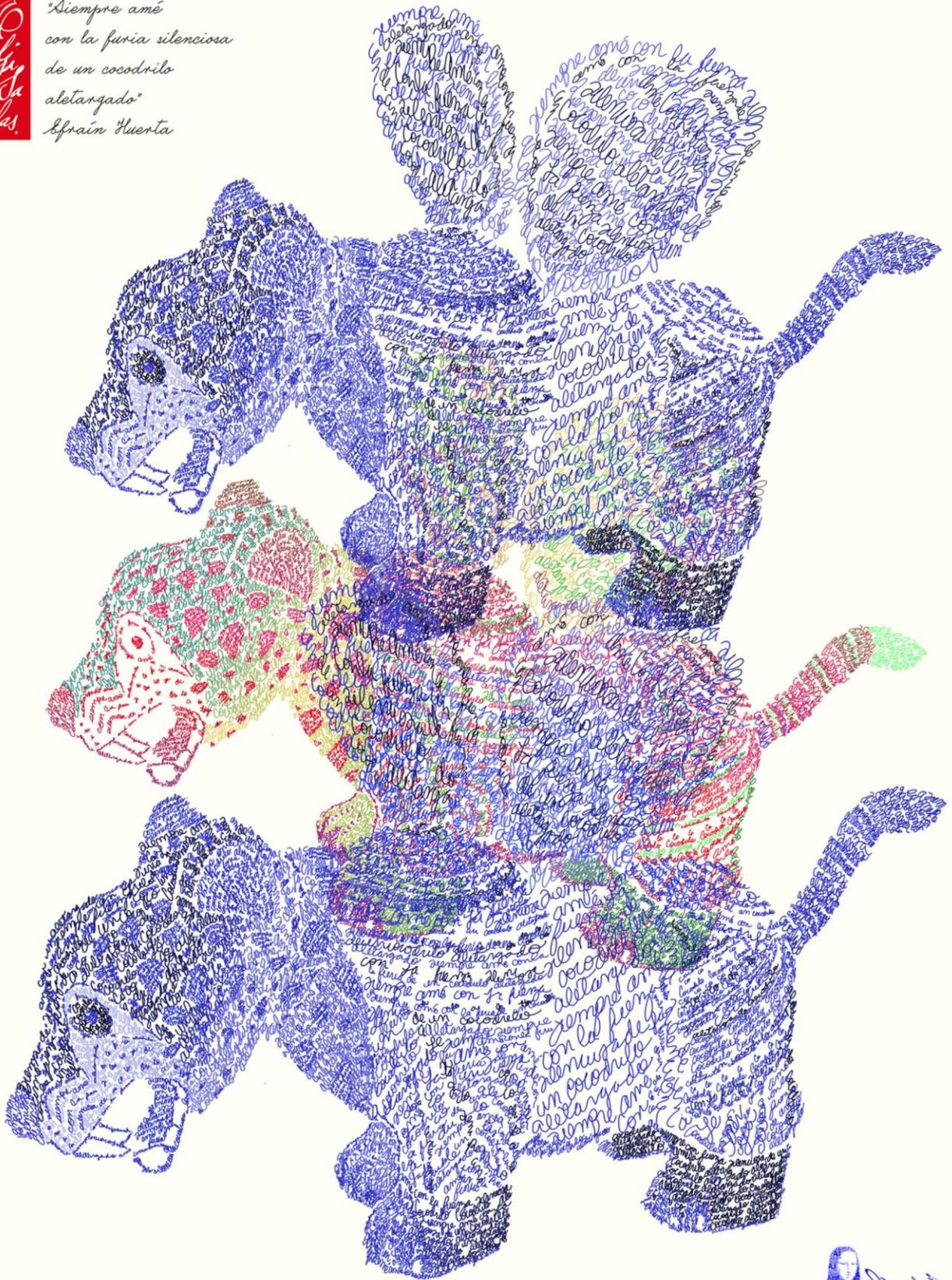
- Gota de agua suspendida de la punta de una fibra óptica de vidrio de 125 micras de diámetro y gota de agua colocada sobre una superficie repelente al agua. Fuente: Colección personal de fotos experimentales y https://en.wikipedia.org/wiki/File:File-Water_droplet_at_DWR-coated_surface1.jpg
- Agnes Pockels. Fuente: https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Agnes_Pockels_ca1892.jpg
- Simplemente gotas de agua. Fuente: Colección de José Manuel Posada de la Concha.
- Ángulo de contacto de una gota de agua sobre diferentes superficies: (a) madera de haya sin tratamiento, (b) película gruesa de poliéster, (c) Película gruesa de dióxido de titanio, (d) poliéster/película gruesa de dióxido de titanio, (e) poliéster/película delgada de dióxido de titanio, (f) poliéster/película de dióxido de titanio depositada por rocío por plasma (PSP). Fuente: <https://www.mdpi.com/2079-6412/10/2/184/htm>
- Representación del dispositivo que Agnes Pockels diseñó para estudiar la tensión superficial (Pockels trough). Fuente: <https://hopefullynothinggoesboom.com/2019/01/13/role-model-agnes-pockels/>

Bibliografía

- Helm, Christiane A., “Agnes Pockels: Life, Letters and Papers”. American Physical Society, March Meeting 2004, March 22-26, 2004, Palais des Congres de Montreal, Montreal, Quebec, Canada, MEETING ID: MAR04, abstract id. N7.001
- Pockels, A., “On the Relative Contamination of the Water-Surface by Equal Quantities of Different substances”, *Nature*, 46, 418-419 (1892).
- Feng, L. et al., “Super-Hydrophobic surfaces: From Natural to Artificial”, *Adv. Mater.*, 14, No. 24, 1857-1860 (2002).
- Malik, F. T., et al., “Nature’s moisture harvesters: a comparative review”, *Bioinspir. Biomim.* 9, (2014)
- Queré, D., “Rough ideas on wetting”, *Physica A* 313 (2002) 32-46.

Eliz
Las

*"Siempre amé
con la furia silenciosa
de un cocodrilo
aletargado"*
Efraín Huerta



 Efraín Huerta

Simulación computacional de aleaciones metálicas amorfas

Alejandro de León Piña,
Renela María Valladares Mc Nelis

Departamento de Física, Facultad de Ciencias,
Universidad Nacional Autónoma de México.
Coyoacán 04510 Ciudad de México

alexphysics@ciencias.unam.mx

Resumen

La simulación computacional es un método de investigación de reciente uso en el ámbito del desarrollo y estudio de materiales como, por ejemplo, los metales o sus aleaciones fuera de equilibrio. Este se encuentra directamente ligado al desarrollo histórico de la computadora.

El presente trabajo busca explicar los fundamentos teóricos de la simulación computacional de aleaciones metálicas amorfas, así como mostrar un método para construir y estudiar la aleación Paladio-Oro, a modo de ejemplo.

Introducción

La simulación computacional es un método distinto al experimental y al teórico, ya que es más bien un punto intermedio entre ambos.

En él se pueden poner a prueba teorías (resolviendo ecuaciones matemáticas en la computadora) para observar la respuesta del sistema de interés y poder así hacer predicciones útiles en un gran espectro de condiciones (incluyendo aquellas para las cuales los experimentos sean muy costosos, difíciles o de hecho imposibles de realizar con la tecnología con la que se cuenta). En aquellos casos en los que se puedan efectuar los experimentos, puede corroborarse la predicción teórico-simulacional.

Simulación de materiales amorfos

Si se busca simular una aleación fuera de equilibrio, como puede serlo una aleación metálica amorfa, un vidrio metálico o una espuma del mismo tipo, es necesario utilizar la teoría de la Mecánica cuántica para considerar los efectos que tienen los electrones sobre el movimiento de cada uno de los átomos en la simulación.

Dinámica molecular *ab initio*

La dinámica molecular es un método computacional utilizado para simular sistemas atómicos y moleculares, en este, se resuelven de forma clásica las ecuaciones de movimiento de los núcleos atómicos:

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}_i) = -\nabla V(\mathbf{r}_i) \quad (1)$$

Es decir, para cada átomo i se resuelve la 2da Ley de Newton utilizando el gradiente del potencial al que están sometidos dichos átomos. La ecuación (1) es válida siempre y cuando el potencial V sea conservativo. Para resolver estas ecuaciones de forma computacional hay que hacer uso de algún algoritmo de integración numérica, como el de Verlet (Diagrama 1) o el de Euler, para obtener las posiciones atómicas en cada intervalo de tiempo. Al intervalo de tiempo en simulación se le conoce con el nombre de *time-step* (Δt), y este debe ser acorde al sistema tratado. Si se utiliza un *time-step* muy pequeño, para átomos muy pesados, se observará que los átomos permanecen prácticamente inmóviles con un costo computacional mayor, mientras que si se elige un *time-step* muy grande para átomos ligeros se perderán los fenómenos físicos a esa escala de tiempo [1].

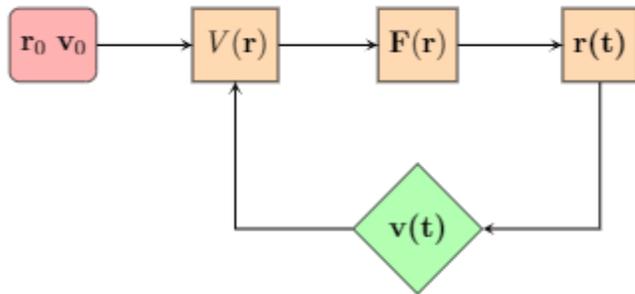


Diagrama I. Algoritmo de Verlet. Para la determinación de las posiciones atómicas en cada paso de tiempo (Δt) basta con conocer las posiciones y velocidades iniciales, así como el potencial al que están sometidos los átomos. La velocidad de Verlet se puede calcular en cada Δt , pero no es necesario para el cálculo de la siguiente posición.

Hasta este punto, toda la simulación ha sido completamente clásica (que es lo que se conoce simplemente como Dinámica Molecular). La parte *ab initio* o de primeros principios tiene que ver con el potencial que aparece en el ciclo de Verlet. El modelo de dinámica molecular *ab initio* utiliza la aproximación de Born-Oppenheimer para separar el movimiento de los núcleos atómicos (α, β) del movimiento de los electrones (i, j), ya que los núcleos son miles de veces más masivos que los electrones. Esta separación del movimiento nuclear-electrónico consiste en dejar los núcleos fijos y permitir que los electrones encuentren su mínimo de energía con la configuración nuclear dada, posteriormente se mueven los núcleos y se vuelve a encontrar la energía mínima.

Esta aproximación parte de considerar el hamiltoniano molecular H_m :

$$H_m = - \sum_{\alpha} \frac{\hbar^2}{2m_{\alpha}} \nabla_{\alpha}^2 - \sum_i \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 + \sum_{\alpha} \sum_{\beta \neq \alpha} V(r_{\alpha\beta}) - \sum_{\alpha} \sum_i V(r_{i\alpha}) + \sum_i \sum_{j \neq i} V(r_{ij})$$

y suponer que la posición de los núcleos (r_{α}) es constante, por lo que el primer término correspondiente a la energía cinética de los núcleos se considerará cero y el potencial de repulsión entre núcleos $V(r_{\alpha\beta})$ se considerará como constante. Entonces podemos definir un hamiltoniano resultante que solo tome en cuenta la interacción electrónica, H_{el}

$$H_{el} = - \sum_i \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 - \sum_{\alpha} \sum_i V(r_{i\alpha}) + \sum_i \sum_{j \neq i} V(r_{ij})$$

Este hamiltoniano toma en cuenta la energía cinética de los electrones, el potencial atractivo entre cada electrón y núcleo, así como la interacción repulsiva electrón-electrón. Es este último término el que es interesante para la dinámica molecular *ab initio*, ya que depende de dos potenciales: el electrostático y el de correlación-intercambio, V_{xc} . El primero es completamente clásico y el otro se debe a efectos puramente cuánticos. La interacción de correlación-intercambio se da porque los electrones son fermiones, entonces (por el Principio de exclusión de Pauli) no pueden tener los mismos números cuánticos. Esto provoca que, cuando dos electrones con el mismo espín se acercan mucho, experimenten una repulsión debido a la antisimetría de intercambio de sus funciones de onda [2].

El reto es encontrar el valor de V_{xc} , y es en este punto que entra en juego la Teoría de Funcionales de la Densidad (DFT, por sus siglas en inglés), que es una teoría que se utiliza para encontrar las soluciones para un sistema multielectrónico. Utiliza un funcional de la densidad electrónica del sistema que reemplaza las operaciones hechas sobre los N electrones que el sistema posee, es decir, en lugar de resolver un sistema de 3N variables (3 por las coordenadas espaciales de cada uno de los N electrones), se resuelve uno de solamente 3 variables (las tres coordenadas necesarias para calcular la densidad). Esta teoría se desarrolló por P. Hohenberg y W. Kohn, quienes elaboraron dos teoremas [3]. El primero dice que *la energía del estado base de la ecuación de Schrödinger es una única funcional de la densidad electrónica $E[\rho]$* ; el segundo teorema menciona que *la densidad electrónica que minimice la energía de toda la funcional es la verdadera densidad correspondiente a la solución exacta de la ecuación de Schrödinger*. Posteriormente W. Kohn y L. J. Sham [4] propusieron una serie de ecuaciones:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + V_H(\mathbf{r}) + V_{xc}(\mathbf{r}) \right] \psi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i(\mathbf{r})$$

en donde:

$$V_H(\mathbf{r}) = e^2 \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3\mathbf{r}'$$

$$V_{xc}(\mathbf{r}) = \frac{\delta E_{xc}(\mathbf{r})}{\delta \rho(\mathbf{r})}$$

$$\rho(\mathbf{r}) = 2 \sum_i \psi_i^*(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r})$$

Con estas ecuaciones se obtienen las funciones de onda de un solo electrón ($\psi(r_i)$) resolviendo un sistema ficticio de electrones no interactuantes, en donde $V_H(r)$ y $V_{xc}(r)$ son el potencial de Hartree y el potencial de correlación-intercambio respectivamente, los cuales dependen únicamente de la densidad electrónica $\rho(r)$. Finalmente, la densidad es calculada por medio de las funciones de onda $\psi(r_i)$ [5]. Si lo anterior suena un poco circular es porque estas ecuaciones se tienen que resolver de forma autoconsistente (*Self-Consistent*), es decir, para resolver la primera de ellas se requieren de las dos siguientes. La segunda ecuación requiere conocer la solución de la cuarta y la cuarta de la primera; y, por si fuera poco, la tercera ecuación no se conoce al día de hoy y solamente se aproxima por medio de funcionales. Es por ello que se recurre a un algoritmo iterativo que en cada ciclo utiliza el método variacional para encontrar el valor de mínima energía, es decir, si después de resolver las ecuaciones de Kohn y Sham a partir de una densidad electrónica de prueba se llega a un valor de energía mayor a cierto umbral, entonces dicha densidad se actualizará por medio de un sistema de mezclado de carga y con ello volver a resolver las ecuaciones de Kohn y Sham hasta que la energía converja a un mínimo (véase diagrama 2).

Optimización geométrica

Una vez realizada la dinámica molecular, los átomos pueden quedar en posiciones inestables y es necesario llevarlos a una zona de mínima energía local. Esto se traduce en encontrar posiciones (r_i) donde la fuerza que actúa sobre ellas sea cero, es decir, puntos estacionarios. Dentro de dichos puntos existen, tanto estructuras estables (como las cristalinas), como estructuras metaestables, tales como las estructuras amorfas (ver figura 1).

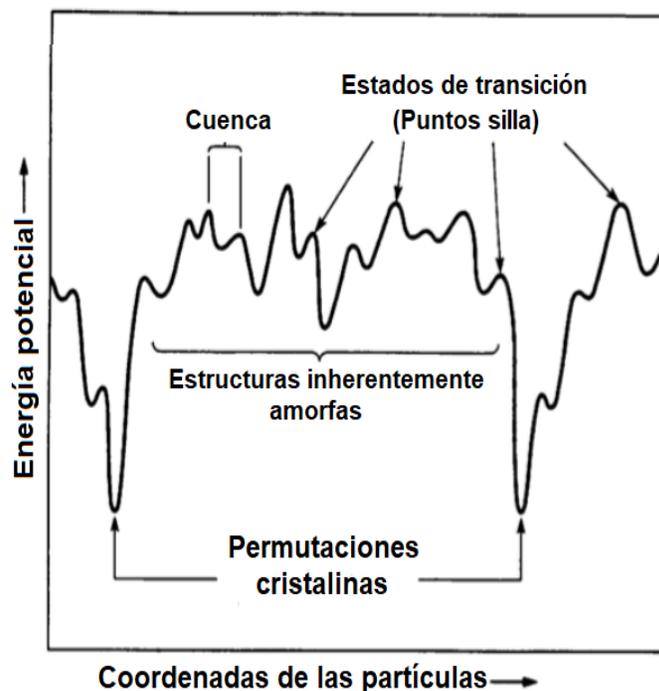


Figura 1. Extraído de Z.H Stachurski [6].

Curva de energía potencial en función de la posición atómica. Los puntos de energía más baja corresponden a las estructuras cristalinas, mientras que los mínimos locales en la parte intermedia corresponden a estructuras amorfas.

Para encontrar dichas posiciones se efectúa una optimización geométrica que utiliza el método BFGS (nombrado por los autores que contribuyeron a su desarrollo: Broyden, Fletcher, Goldfarb y Shanno) que es una generalización a 3N dimensiones del método de Newton-Rhapson [7, 8, 9, 10]. Dicho procedimiento se repite de manera iterativa hasta alcanzar el criterio de convergencia fijado en la optimización.

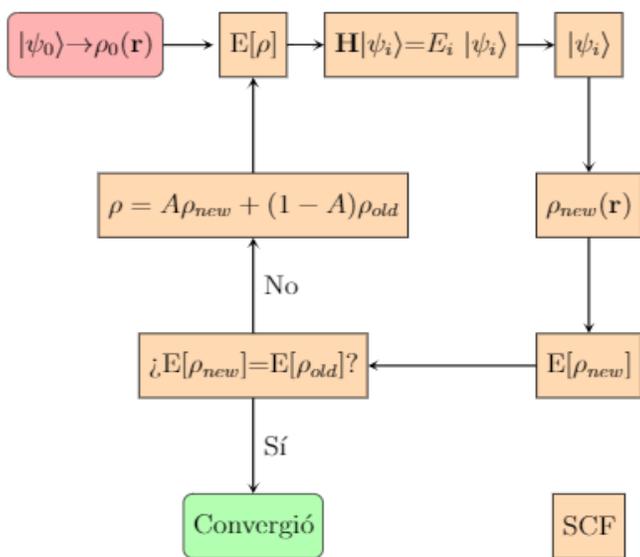


Diagrama 2. Representación general de un ciclo DFT [5]. Si la energía no converge, entonces la densidad se actualiza por una fórmula de mezclado, este diagrama representa el proceso utilizado por el software DMol3. La parte en amarillo representa el ciclo autoconsistente SCF (*Self-Consistent Field*) que representa la parte más costosa, computacionalmente hablando.

Caracterización de materiales amorfos

Para conocer qué tipo de estructura se obtuvo al final de una dinámica molecular *ab initio* se utiliza la función de distribución de pares (PDF, por sus siglas en inglés) que comúnmente se denomina $g(r)$ y es la transformada de Fourier del factor de estructura $S(q)$, que se mide experimentalmente por medio de difracción de rayos X o de neutrones [11]. La $g(r)$ da un estimado de cuántos átomos existen en cada dirección respecto a un átomo de referencia y se utiliza para generar la función de distribución radial (RDF, por sus siglas en inglés) generalmente denominada $J(r)$, que mide de forma exacta cuántos átomos vecinos hay a cierta distancia del átomo de referencia. Se pueden calcular $g(r)$ parciales o totales según se requiera, es decir, se puede calcular la distancia a la que se encuentran átomos del mismo elemento, de uno distinto o sin hacer distinción alguna.

Método

Expanded lattice y Undermelt-quench

Con la finalidad de facilitar el proceso de amorfización, se parte de una supercelda cristalina de 216 átomos de paladio con una configuración cristalina distinta a la estable (de diamante en lugar de fcc) y posteriormente se incorpora sustitucionalmente el oro hasta alcanzar la concentración deseada de la aleación ($Pd_{84}Au_{16}$). Después se aumentaron los parámetros de red con el objetivo de reproducir la densidad correspondiente a la celda cristalina real. Posteriormente, se realiza el proceso *under-melt quench* [12], que consiste en calentar un material de forma constante hasta una temperatura inferior a la del *liquidus* y posteriormente enfriarlo rápidamente hasta una temperatura cercana al cero absoluto. Cabe mencionar que este método tiene sus variantes, ya que puede agregarse una etapa de recocido (manteniendo constante la temperatura máxima por una cierta cantidad de tiempo). Este método es utilizado para darle tratamiento térmico a materiales en bulto y así obtener una nueva estructura, ya sea estable o metaestable [12].

Parámetros de la simulación

Para realizar la simulación debe señalarse si la aleación metálica tiene carga eléctrica o es neutra, también si vamos a imponer una polarización de los espines, es decir, si los mismos orbitales

son usados o no para ambas orientaciones del espín. Para la aleación que se muestra en los resultados se fijó la condición de que diferentes orbitales fueran utilizados para espines distintos. Esto se conoce como **spin-unrestricted**; nuestra aleación es neutra por lo que se fija la carga con el valor de 0.

Como se mencionó en la sección de dinámica molecular, es necesario proponer tanto un potencial V_{xc} como las funciones base que determinarán la densidad electrónica inicial. Hoy en día no existe una expresión analítica del potencial de correlación-intercambio, por lo que se tiene que aproximar numéricamente por alguna funcional de DFT, como la que se utiliza en el presente trabajo: **LDA** (*Local Density Approximation*) con la parametrización **VWN** (*Vosko-Wilk-Nusair*) [13].

Se utilizan bases numéricas para representar los orbitales electrónicos de cada átomo en la simulación, respecto a este parámetro, en este trabajo, se usa **DNP** (*Double-Numeric with Polarization functions*) que es una base que utiliza aproximadamente 2 orbitales atómicos por cada átomo e incluye funciones con un valor de momento angular mayor que el más alto ocupado por el átomo en estado base.

Para realizar simulaciones computacionales es necesario fijar cuántos electrones de cada átomo se van a utilizar para hacer los cálculos, es decir, si se incluirán todos los electrones o si solamente se utilizarán los electrones de valencia [14]. La opción utilizada para este trabajo es DFT *semi-core potentials*, **DSPP** [15], que utiliza el modelo de *muffin tin*, mismo que supone un potencial atractivo solamente en una zona alrededor de cada átomo y se vuelve repulsivo en una vecindad inmediata en cada uno de los átomos.

Otro de los parámetros importantes que debe definirse es el alcance de la interacción atómica, conocida como radio de corte. Si se elige un radio de corte muy grande, entonces el costo computacional será muy grande a costa de una muy pequeña mejora en la precisión de los resultados, por otro lado, si se elige uno muy pequeño se puede perder mucha información sobre el sistema atómico. En general se elige el radio de corte de acuerdo al tipo de átomos presentes en el material [14]. En nuestra simulación se utilizó un radio de corte de **4.5 Å**, el cual toma en cuenta la distancia a la que se encuentran los terceros vecinos a un átomo cualquiera en la red cristalina de la misma aleación que se busca amorfizar.

En un sistema real, los átomos o moléculas no siguen exclusivamente las ecuaciones de movimiento de Newton, sino que, como cualquier sistema clásico, deben obedecer las leyes

de la Termodinámica. Si queremos que nuestro sistema simulado se comporte como normalmente lo haría uno real, es decir, uno que intercambia calor con sus alrededores, entonces hay que utilizar un ensamble canónico como el que utilizamos en este trabajo, con el ensamble **NVT** con termostato **NH** (Nose-Hoover). [16]

Existen parámetros de simulación cuyo objetivo es mejorar la velocidad de convergencia de los ciclos SCF que se utilizan en la simulación. Cada vez que se compara la energía resultante del ciclo SCF con la energía inicial, si se obtiene un valor distinto al **umbral de convergencia**, entonces la densidad electrónica se ajustará por medio del **charge mixing** y del **spin mixing**, que son parámetros de ajuste para construir una combinación lineal de las densidades de carga o de espín previamente calculadas en el ciclo SCF [13] (Diagrama 2), otro parámetro es el **DIIS** (*Direct Inversión in Iterative Subspace*) [17] que es muy útil para aumentar la convergencia en sistemas metálicos. En nuestra aleación, por ejemplo, se utilizó el parámetro **Pulay** de 11.

Otro parámetro de importancia es la ocupación térmica. Puesto que el sistema trabajado es un metal, sus electrones de valencia siguen una distribución de Fermi-Dirac, que se asemeja a una función escalón en el estado base. Dicho comportamiento representa una complicación en la resolución de los cálculos numéricos, por lo que se debe suavizar mediante la elevación de la temperatura de los electrones, por esa razón se utilizó un parámetro **Thermal** de 0.005.

Finalmente, en cualquier simulación computacional debe señalarse la **finura de la malla de integración**, es decir, la precisión con la que se harán todos los cálculos numéricos. Una malla de integración muy fina será también muy precisa, aunque es prudente mencionar que también será bastante costosa en términos computacionales.

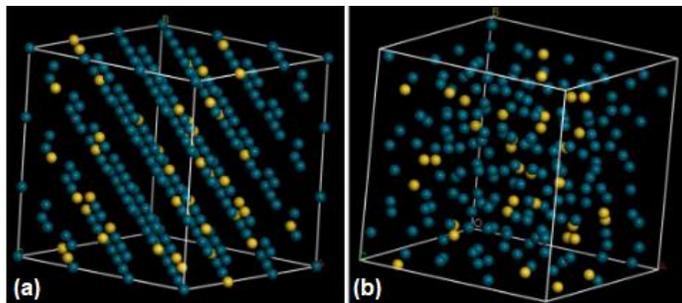


Figura 2. Visualización, antes y después, de una simulación de dinámica molecular *ab initio* para obtener una aleación metálica amorfa. La imagen izquierda es la supercelda cristalina de la aleación $Pd_{84}Au_{16}$; la derecha es la misma supercelda después de la dinámica molecular.

Resultados

Después de mandar la simulación con el método y parámetros descritos se obtuvo la supercelda de la aleación amorfa $Pd_{84}Au_{16}$ (Figura 2 (b)), haciendo una inspección visual entre ambas celdas puede notarse el desorden presente en (b) respecto a los muy visibles planos cristalinos de la supercelda antes de la dinámica (Figura 2 (a)).

Con la finalidad de conocer el ordenamiento presente en la supercelda resultante después de la simulación, se calculó la función de distribución de pares “Total” de dicha celda, así como las contribuciones parciales de cada uno de los elementos presentes en la aleación. Ver Figura 3.

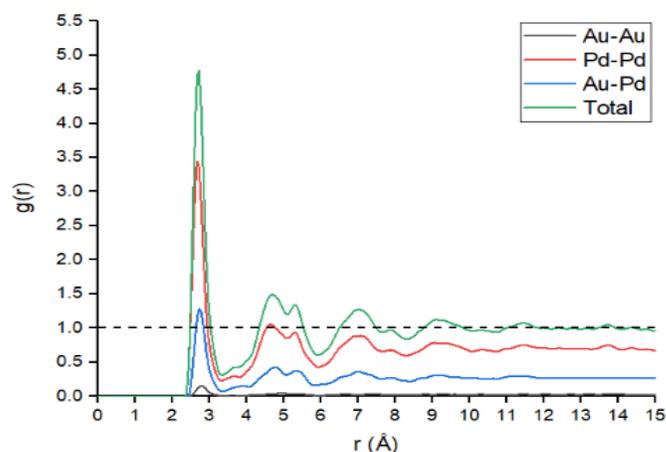


Figura 3. PDFs parciales y total de una supercelda cúbica de la aleación $Pd_{84}Au_{16}$ amorfa (ver Figura 2) con longitud de arista de 14.8248 Å. Notar que después del 4to pico de la $g(r)$ total se pierde totalmente el ordenamiento.

Conclusiones

Del presente trabajo se puede concluir que el proceso de amorfización descrito para la aleación metálica $Pd_{84}Au_{16}$ es un ejemplo de lo útil que es la simulación computacional para el estudio de aleaciones metálicas amorfas, que de forma experimental resultarían bastante costosas. Se obtuvo una celda de una aleación metálica amorfa partiendo de la celda cristalina, y con estos resultados se pueden estudiar las propiedades que sean de interés.

Cabe destacar que, con el aumento creciente de la capacidad de cómputo, podrán estudiarse sistemas atómicos cada vez más grandes. Esto nos permitirá describir con mayor precisión la naturaleza de los materiales existentes, así como desarrollar materiales con nuevas propiedades.

Referencias

- [1] L. Verlet. **"Computer Experiments on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules"**. *Physical Review*, **159** (1) (1967), 98–103.
- [2] P. W. Atkins y R. S. Friedman. *Molecular Quantum Mechanics*, Oxford University Press, United States of America, 3rd ed. 1996. Pp. 276
- [3] P. Hohenberg y W. Kohn. **"Inhomogeneous electron gas"**. *Physical Review*, **136** (3B) (1964), B864–B871.
- [4] W. Kohn y L. J. Sham. **"Self-consistent equations including exchange and correlation effects"**. *Physical Review*, **140** (4A) (1965), A1133–A1138.
- [5] D. S. Sholl, J. A. Steckel. *Density Functional Theory, a practical introduction*, JohnWiley and Sons, New Jersey, USA. 1st ed. 2009.
- [6] Z.H Stachurski. **"On Structure and Properties of Amorphous Materials"**. *Materials (Basel, Switzerland)* **4** (9) (2011), 1564-1598.
- [7] C. G. Broyden. **"The convergence of a class of double-rank minimization algorithms"**. *Mathematics of Computation*, **6** (1970), 76–90.
- [8] R. A Fletcher. **"New approach to variable metric algorithms"**. *The Computer Journal* **13**, (1970) 317–322.
- [9] B. A. Goldfarb. **"Family of variable-metric methods derived by variational means"**. *Mathematics of Computation*, **24**, (1970) 23–26.
- [10] D. F. Shanno. **"Conditioning of quasi-newton methods for function minimization"**. *Mathematics of Computation*, **24**, (1970) 647–656.
- [11] W. Xuelong et al. **"Pair distribution function analysis: Fundamentals and application to battery materials"**. *Chinese Phys, B* **29**, (2020) 028802.
- [12] A. A. Valladares. en *Glass Materials Research Progress*, editado por: Jonas C. Wolf y Luka Lange, Nova Science Publishers, Inc., 2008. Pp.61-123.
- [13] S. H. Vosko, L. Wilk, y M. Nusair. **"Accurate spin-dependent electron liquid correlation energies for local spin density calculations: a critical análisis"**. *Canadian Journal of Physics*, **58** (8) (1980), 1200-1211.
- [14] D. J. Marx, Hutter. *Ab initio Molecular Dynamics, Basic Theory and Advanced Methods*. Cambridge University Press, New York, USA. 1st ed. (2009).
- [15] B. Delley. **"Hardness conserving semilocal pseudopotentials"**. *Phys. Rev. B* **66**, (2002) 155125.
- [16] S. A. Nose. **"Unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods"**. *The Journal of Chemical Physics*, **81**, (1984) 511.
- [17] P. Pulay. **"Convergence acceleration of iterative sequences. the case of scf iteration"**. *Chemical Physics Letters*, **73** (2) (1980), 393-398.

Irlanda en la Alta Edad Media:

núcleos aislados donde se
preservó el conocimiento de la
Antigüedad clásica

José Luis Álvarez García

Departamento de Física, Facultad de Ciencias,
Universidad Nacional Autónoma de México,
Coyoacán 04510, Ciudad de México, México

josel.alvarezgarcia@gmail.com

Resumen

Con la caída del Imperio Romano de Occidente y el advenimiento del cristianismo a finales del siglo IV y durante el siglo V, Europa cayó en un doloroso retroceso en el conocimiento que prevaleció durante la Alta Edad Media. Sin embargo, este retroceso no fue absoluto. En algunos núcleos aislados en la remota Irlanda se preservó el conocimiento de la Antigüedad clásica para unirse con el tesoro del saber que había sido conservado y desarrollado en Oriente y que regresó a Europa y se cultivó en las escuelas catedralicias, que son el antecedente inmediato de las que podemos identificar como las primeras universidades.

Irlanda en la Alta Edad Media

Con la caída del Imperio romano de occidente y el advenimiento del cristianismo como religión del Estado, desde el siglo IV y durante el siglo V, Europa cayó en un doloroso retroceso en el conocimiento que prevaleció durante la Alta Edad Media (siglos V al IX).



Imperio romano de occidente

Muestra de tal retroceso lo encontramos en san **Lactancio** (260-340), quien en el tercer volumen de sus *Instituciones divinas*, bajo el título de “Sobre la falsa sabiduría de los filósofos”, ataca, con argumentos bastante ingenuos, la redondez de la Tierra. A través de la obra de autores como Basilio el Grande (329-379) y Severiano (siglo IV) se gestó la idea de que el propio firmamento tenía la forma de tabernáculo, esto, sin llegar a plantearse una cosmología mínimamente consistente. Esa tradición continuó hasta entrado el siglo VI, donde el monje **Cosmas**, en su *Topographica cristiana*, se lanzó resueltamente, en el primero de sus 12 libros: “Contra aquellos que, deseando profesar el cristianismo, piensan e imaginan, como los paganos, que el cielo es esférico”. En esta obra, Cosmas plantea que la Tierra debe tener la forma del sagrado tabernáculo de Moisés¹.

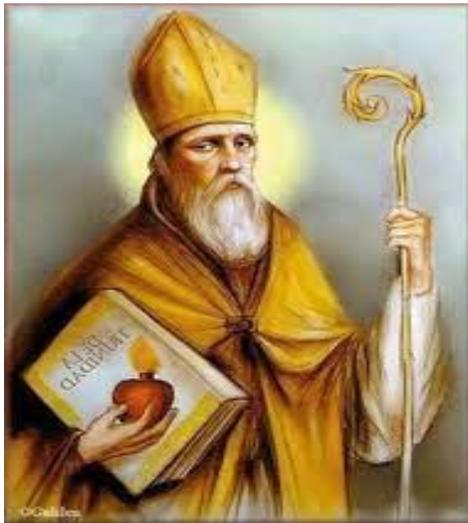


Lactancio



Cosmas

Después del colapso del Imperio romano, el cristianismo absorbió de manera extremosa y deformada al neoplatonismo, que vino a convertirse en el lazo principal entre la Antigüedad y la Europa medieval. Los eclesiásticos se convirtieron en los sucesores de los filósofos de la Antigüedad, la Iglesia católica sustituyó a la Academia, al Liceo y a las escuelas de Alejandría. De esta manera, el cristianismo ignoró los aspectos más racionales del platonismo, como el lógico y el matemático, y adoptó los aspectos místicos y religiosos, constituyendo el apoyo intelectual de su teología. Figura fundamental en este proceso fue **san Agustín** (354-430), quien no solo fue el personaje de la Iglesia con mayor influencia en la Alta Edad Media sino, sobre todo, el símbolo vivo de la continuidad entre la antigua civilización que se desvanecía y la nueva que surgía. Él fue uno de los forjadores de la historia (en mayor medida que cualquier emperador o guerrero bárbaro) y uno de los constructores del puente que comunicaría el mundo antiguo con el nuevo².

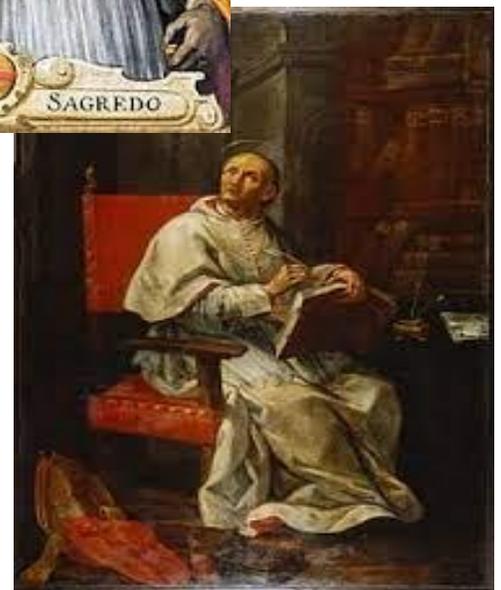


Agustín de Hipona

Pero por aquel puente construido por san Agustín no transitaban los tesoros del conocimiento antiguo. Solo se le permitió el paso a Platón, en su versión neoplatónica y cristiana, y de ahí se derivó la convicción de que *no se obtenía beneficio alguno investigando el reino de la naturaleza*: “Que Tales se marche con su agua, Anaxímenes con el aire, los estoicos con su fuego, Epicuro con sus átomos”. La herencia agustiniana se prolongó durante varios siglos más, y durante el siglo XI se pueden encontrar las obras de personajes como **Gerardo de Csanad**, Otloh de Saint-Emmeram y sobre todo las de **Pedro Damianián**, quien llega a posiciones bastante extremas: “Los antiguos escudriñan los secretos de la misteriosa naturaleza, fijan los límites de las órbitas de los planetas y calculan el curso de los astros: los rechazo con desdén. Pitágoras divide en latitudes la esfera terrestre: hago poco caso de ello. Euclides se entrega a los problemas complicados de las figuras geométricas: yo lo aparto del mismo modo; en cuanto a todos los retóricos con sus silogismos y sus cavilaciones, los descalifico como indignos”³.



Gerardo de Csanad



Pedro Damianián

Sin embargo, el retroceso y el estancamiento del conocimiento no fue absoluto. Existieron algunos núcleos aislados en los que se cultivó el pensamiento de los antiguos. Claro está que estos estudios fueron hechos bajo el marco de la teología cristiana y siempre sometidos a la fe. Estos núcleos aislados estuvieron localizados en el norte de Inglaterra, en Escocia y en la lejana Irlanda, y de ellos habría de fluir la cultura medieval original para unirse (a finales del siglo XI) con la corriente principal proveniente del oriente islámico. En estos núcleos aparecieron personajes que tendrían una importancia fundamental dentro de la floración carolingia, impulsada por Carlomagno, seguida de la fundación de las escuelas catedrales y, más tarde, la organización de las primeras universidades.

Todo el norte de lo que actualmente conocemos como Reino Unido estuvo influenciado fuertemente por la cultura irlandesa. Escocia fue colonizada por los gaélicos de Irlanda y toma su nombre de *Scotis*, término latino que significa “irlandés”. Incluso lugares como York, en el norte de Inglaterra, tuvieron fuerte influencia irlandesa en la Alta Edad Media.



Irlanda y Escocia

Uno de los personajes de esta tradición fue el monje benedictino **Beda** (672-735). Nació en Jarrow, al norte de Inglaterra, y fue el primer eclesiástico medieval en afirmar, sin lugar a dudas, que la Tierra era una esfera (conservando la noción mantenida por los antiguos y que iba en contra de las concepciones pretendidamente cosmológicas que ya fueron mencionadas). Una curiosa anécdota muestra el ambiente que prevalecía en esa época en torno al conocimiento antiguo: poco después de la muerte de Beda, un eclesiástico irlandés de

nombre Fergil o Virgilio, sostuvo una controversia con su superior, llamado Bonifacio, quien lo denunció al papa Zacarías, alegando que el irlandés enseñaba la existencia “de otro mundo y de otra gente que vivía debajo de la Tierra”⁴, con lo cual se refería a los antípodas. El papa dispuso que Bonifacio convocara a un concilio para expulsar de la Iglesia al irlandés, a causa de sus escandalosas enseñanzas; cosa que nunca ocurrió.



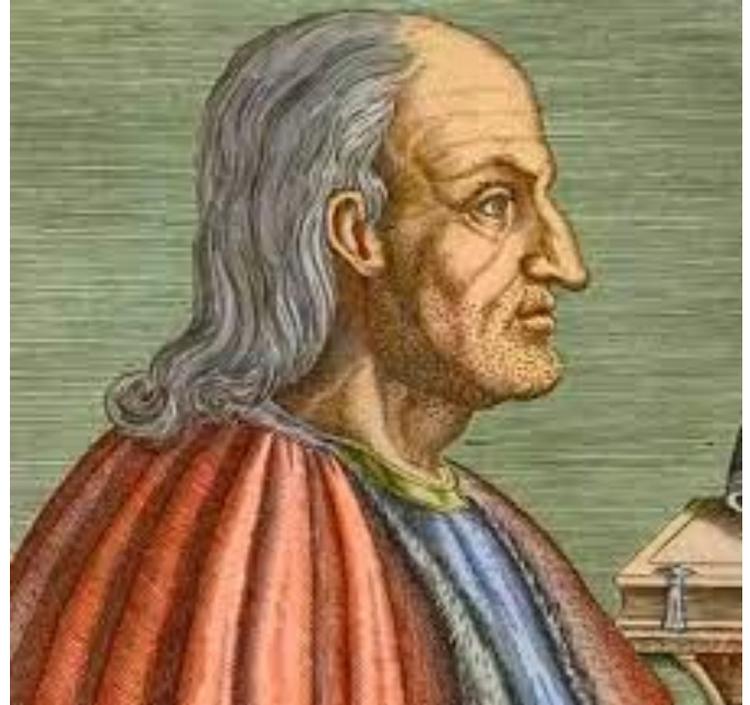
Beda

Beda fue conocido como *el padre de la historia inglesa*, cultivó el conocimiento antiguo, trabajó en la antigua escuela de York y fue traductor del griego. Hábil lingüista, permitió que los textos (en latín y griego) de los primeros padres de la Iglesia fueran mucho más accesibles para sus colegas anglosajones. Cultivó también la disciplina académica del *computus*, conocida por sus contemporáneos como “la ciencia del cálculo de las festividades del calendario cristiano”. A él le debemos la costumbre de datar las fechas a partir del nacimiento de Cristo (*Anno Domini*, “en el año de Nuestro Señor”)⁵.

También en la **Escuela de York** (y siguiendo la tradición del conocimiento cultivada por Beda) está **Alcuino** (735-804). Carlomagno lo llevó a la corte de Aquisgrán, en donde se desempeñó como una especie de ministro de cultura. Su proyecto fue el de “construir en Francia una nueva Atenas”. Fue el principal promotor de lo que se conoce como “floración carolingia”. Durante su gestión, se construyeron, entre otras cosas, escuelas anexas a las catedrales (mismas que estuvieron abiertas a todo el mundo, laicos y religiosos). Su labor fue un trabajo realizado a profundidad y a largo plazo, el cual rindió frutos en las siguientes décadas⁶.



Alcuino



Juan Escoto Erígena



Escuela de York

Otro de los grandes pensadores del periodo carolingio fue **Juan Escoto Erígena** (810-877). Tradujo, del griego, varias obras de los antiguos. No fue comprendido en su tiempo, pero tuvo gran relevancia durante el esplendor de la Escuela de Chartres, en el siglo XII. Se sabe que era irlandés; incluso su nombre, Juan Escoto Erígena, equivalía a decir “Juan el irlandés de Irlanda”. *Scoti* era el nombre genérico usado en la Edad Media para referirse a los gaélicos en general (irlandeses o escoceses), y Erígena viene de *Erin* que es como se denominaba en el medioevo a Irlanda⁷.

Un residuo importante de la floración carolingia se encuentra en **Geberto de Aurillac** (papa que llevó el nombre de Silvestre II, y que fuera conocido como el *papa del año 1000*). A través de su discípulo Fulberto, fundó la **escuela de Chartres**, en el año 990, en la ciudad del mismo nombre. Se trató de una de las primeras escuelas catedrales, escuelas de ciudad abiertas a todo el público⁸.



Chartres



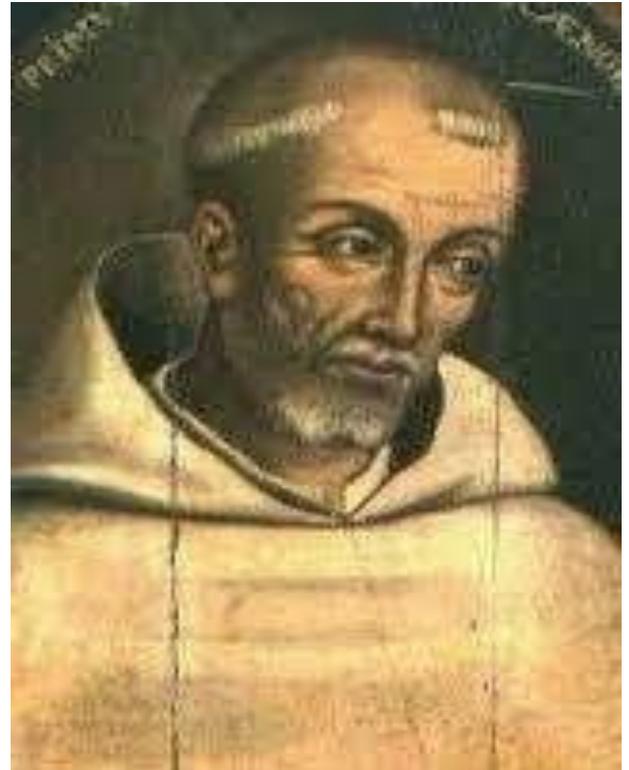
Geberto de Aurillac

La Escuela de Chartres alcanzó su máximo esplendor en el siglo XII, durante el fermento de las nuevas ciudades que surgían como centros de actividad económica. Todo el tesoro del conocimiento de la antigüedad ha regresado a Europa, después de haber sido conservado y desarrollado en Oriente. En Chartres se estudia el antiguo conocimiento. Uno de sus más ilustres exponentes fue **Bernardo de Chartres**.

Testimonio de la enseñanza impartida por Bernardo es dado por uno de sus discípulos, Juan de Salisbury: “Cuantas más disciplinas se conozcan y cuanto más profundamente se impregne uno de ellas, más plenamente se captará la perfección de los autores antiguos y más claramente se los enseñará... La lógica, al aportar los colores de la demostración, infunde sus pruebas racionales con el esplendor del oro; la retórica en virtud de la persuasión y el brío de la elocuencia imita el brillo de la plata. La matemática, arrastrada por las ruedas de su cuadriga, pasa sobre las huellas de las otras artes y deja en ellas con una infinita variedad sus colores y sus encantos. La física, habiendo penetrado los secretos de la naturaleza, aporta la contribución del múltiple encanto de sus matices. Por fin, la más eminente de todas las ramas de la filosofía, la ética, sin la cual no hay filosofía, ni siquiera de nombre, sobrepasa a todas las demás por la dignidad que confiere a la obra. Éste era el método que seguía Bernardo de Chartres”.

Bernardo fue consciente del crecimiento histórico del conocimiento: *veritas, filia tempore* (la verdad es hija del tiempo) y a él se atribuye la alegoría del progreso intelectual que más tarde Newton haría famosa en su célebre frase: “somos como

enanos sentados en la espalda de gigantes: si vemos más cosas y más lejos que ellos, no es porque nuestra mirada sea más perspicaz, ni porque nuestro tamaño sea mayor; es porque somos elevados por ellos”⁹.



Bernardo de Chartres

De los labios y de la pluma de estos eruditos chartrianos sale la palabra *moderni* para designar a los escritores de su tiempo; pero son modernos que no riñen con los antiguos, sino todo lo contrario, se nutren de ellos. El historiador medievalista, Jacques Le Goff, en su libro *Los intelectuales en la Edad Media*, presenta la siguiente cita que muestra el espíritu chartrense: “No se pasa de las tinieblas de la ignorancia a la luz de la ciencia —exclama Pedro de Blois— si no se releen con amor cada vez más vivo las obras de los antiguos. ¡Que ladren los perros, que gruñan los cerdos! No por eso dejaré de ser sectario de los antiguos. A ellos dedicaré todos mis cuidados y cada día el amanecer me encontrará estudiándolos”¹⁰.

El problema de la relación entre la razón y la fe, que fue crucial en toda la Edad Media, viene planteado por la escuela chartriana en términos que pretenden entender con la razón el contenido de la fe. La verdad se encuentra en la razón, de modo que la revelación es a la vez punto de partida y llegada para aclarar su contenido mediante el patrimonio científico y filosófico de la Antigüedad.

Es en el siglo XII donde se desarrollan las escuelas catedrales, abiertas para todo mundo, laicos y religiosos. Junto a la Escuela de Chartres está también la Escuela de Notre Dame y otras. Estas escuelas florecen en el fermento de las nuevas ciudades que están surgiendo, convirtiéndose en el hogar de lo que los señores feudales detestaban: la actividad económica. Estos nuevos centros de actividad económica reunieron a diversos tipos sociales que iban a comerciar sus productos, como agricultores, alfareros, comerciantes textiles y también aquellos que dominan oficios y ofrecen sus servicios en esos mercados, como carpinteros, herreros y albañiles. En estos centros de intercambio económico aparece un nuevo oficio que implica pensar y enseñar ese pensamiento: el intelectual¹.

El nacimiento del intelectual como tipo sociológicamente nuevo presupone la división del trabajo urbano, así como el surgimiento de nuevas instituciones implica un espacio cultural en donde los intelectuales pueden desarrollarse a la par de esas nuevas “catedrales del saber”. La división del trabajo, la ciudad, el intelectual y las nuevas instituciones en un espacio cultural común, son rasgos esenciales del nuevo paisaje intelectual de la cristiandad occidental en el paso del siglo XII al XIII.

Los intelectuales (eruditos, filósofos, sabios, doctos, pensadores) nacen con las ciudades, germinan y se desarrollan en las escuelas urbanas del siglo XII. Florecerá en el siglo XIII en esas nacientes instituciones: las universidades².



Universidad de París. La Sorbona



Universidad de Oxford



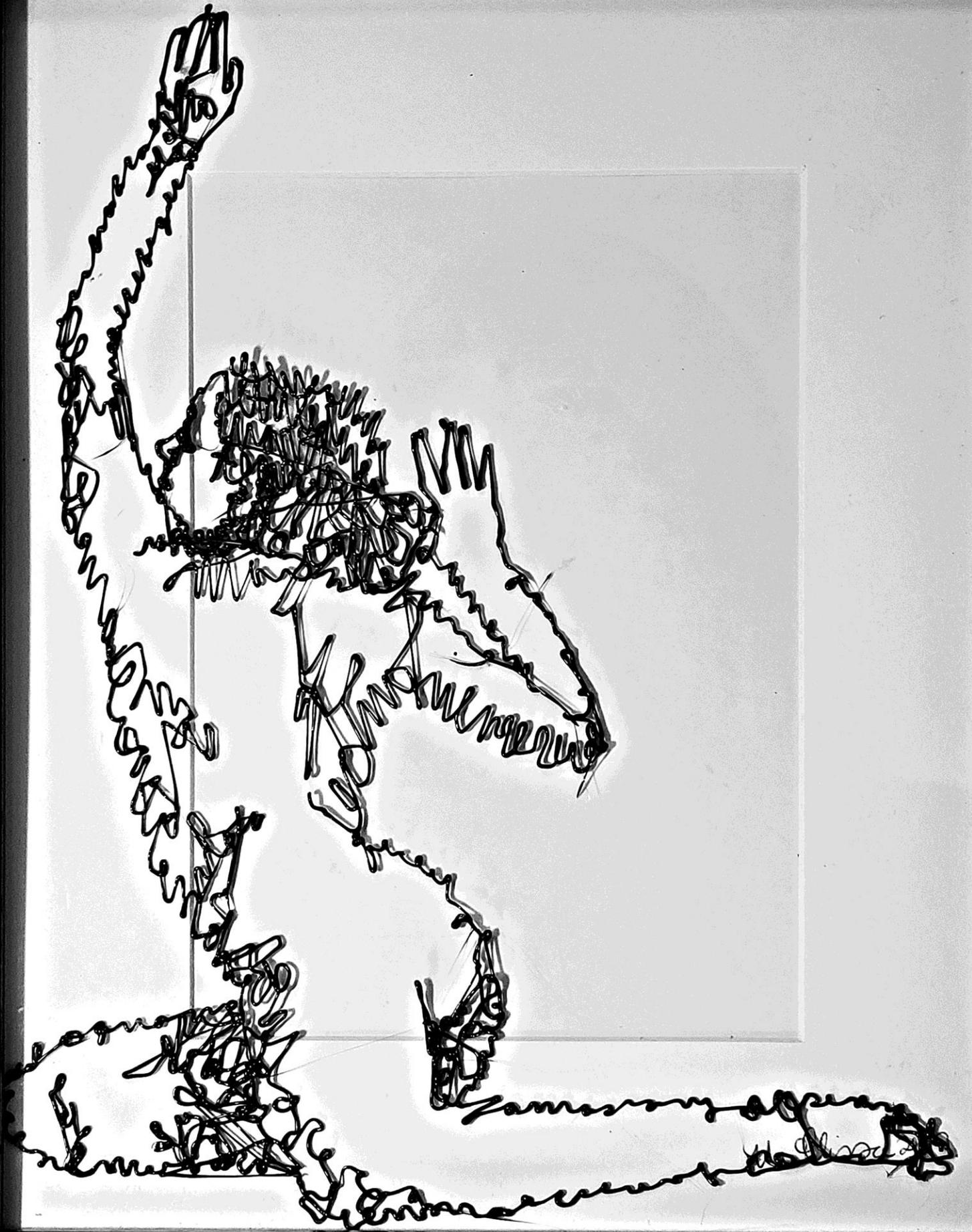
Universidad de Bolonia

Notas

1. Koestler, A., Los Sonámbulos, CONACyT, México (1981) p.91.
2. Ibid., p. 89.
3. Jolivet, J., La filosofía medieval en Occidente, op. cit., p. 83; Le Goff, J., La Baja Edad Media, op. cit., p. 25.
4. Koestler, A., op.cit., p. 94.
5. Ibid., p. 94; Jolivet, J., op. cit., p. 41.
6. Ibid., p. 45.
7. Ibid., p. 55.
8. Ibid., p. 73, p. 114.
9. Ibid., p. 118; Le Goff, J., Los intelectuales en la Edad Media, op. cit., p. 29.
10. Ibid., p. 29.
11. Ibid., p. 25, p. 47.
12. Ibid., p. 71.

Referencias

1. Grant, E., A Source Book in Medieval Sciences, Harvard University, Cambridge (1974).
2. Koestler, A., Los sonámbulos, CONACyT, México (1981).
3. Jolivet, J., La filosofía medieval en Occidente, Historia de la Filosofía Siglo XXI, vol.4, Madrid (1974).
4. Le Goff J., La Baja Edad Media, Historia Universal Siglo XXI, vol.11, Madrid (1971).
5. Le Goff J., La Civilización del Occidente Medieval, Editorial Paidós, Barcelona (1999).
6. Le Goff J., Los intelectuales en la Edad Media, 3ª. Edición, Editorial Gedisa, S.A., Barcelona (2006).



Corrosión en vidrios metálicos

Andrés Guillermo Soriano Carranza¹,
Araceli Espinoza Vázquez^{1,2},
Francisco Javier Rodríguez Gómez²,
Ignacio Alejandro Figueroa Vargas¹

¹Instituto de Investigaciones en Materiales,
Universidad Nacional Autónoma de México,
Cd. Universitaria, Ciudad de México, 04510, México

²Departamento de Ingeniería Metalúrgica,
Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma
de México, Ciudad de México, 04510, México

iafigueroa@unam.mx

Resumen

Los vidrios metálicos son aleaciones con estructura de corto alcance que les provee de propiedades mecánicas, eléctricas y magnéticas superiores a sus contrapartes cristalinas. También se les asocia con una alta resistencia a la corrosión, un fenómeno electroquímico que deriva en la degradación del material ocasionando fallas en el desempeño de componentes, además de pérdidas económicas. En este trabajo se pretende establecer la relación entre las propiedades estructurales de las aleaciones vítreas, su comportamiento electroquímico al ser expuestas a medios corrosivos y comprender un poco del porqué se le atribuye la alta resistencia a la corrosión.

Abstract: Metallic glasses are short-range ordering structure alloys that provide them superior mechanical, electrical and magnetic properties compared to their crystalline counterparts. They are also associated with high resistance to corrosion, an electrochemical phenomenon resulting in material degradation producing failures of the component performance and economic loss. This work aims to establish a relationship between the structural properties of glassy alloys and their electrochemical behavior when are exposed to corrosive media and also to understand how the high resistance to corrosion is attributed to this alloys.

Introducción

Las aleaciones obtenidas por solidificación rápida poseen una estructura de corto alcance y están compuestas principalmente por elementos metálicos que se denominan "vidrios metálicos", ya que sus propiedades eléctricas y mecánicas son similares a las de los metales. Desde el primer informe reportado [1] se han realizado muchos estudios sobre la estructura y propiedades químicas, pero poco se ha estudiado sobre sus propiedades electroquímicas; en particular, aquellos mecanismos que las hacen resistentes a la corrosión. Las aleaciones vítreas se obtienen a través de un enfriamiento muy rápido, de alrededor de 10^6 K/s, lo cual se consigue con técnicas de solidificación rápida.

Vidrios metálicos

Son aleaciones obtenidas por solidificación rápida que poseen características estructurales similares a un vidrio, pero están compuestas principalmente por elementos metálicos, en contraste con la composición de los vidrios de óxidos (SiO_2). Estas aleaciones se denominan "vidrios metálicos", ya que sus propiedades eléctricas y mecánicas son similares a las de los metales. Desde el primer informe de estructuras inusuales obtenidas por enfriamiento rápido del material fundido [8] se han realizado muchos estudios sobre la estructura y propiedades de los vidrios metálicos.

Los vidrios metálicos pueden tener composiciones muy variadas, siempre que se trate de una solución sólida de elementos metálicos combinados con metales de transición, elementos no metálicos e incluso algunas tierras raras. En cuanto a la forma de alearse, estos pueden clasificarse en tres grupos [1]:

- El primer grupo lo constituyen los vidrios, cuya composición está formada por metales de transición y un elemento no metálico (tales como el fósforo (P), boro (B), carbono (C) y silicio (Si)).
- El segundo grupo lo componen vidrios binarios compuestos por dos metales, aproximadamente al 50 % cada uno. Como son el cobre-zirconio (Cu-Zr), níquel-niobio (Ni-Nb), titanio-berilio (Ti-Be) y también calcio-magnesio (Ca-Mg).
- El tercer grupo lo constituyen aleaciones de metales que no son de transición. Por ejemplo, aquella de calcio-aluminio (Ca-Al).

Métodos de síntesis

Por excelencia, los métodos de síntesis de vidrios metálicos son a través de las técnicas de solidificación rápida (llamada igual *Rapid Solidification Technics* “RST” por sus siglas en inglés). Este procedimiento tiene muchas variables que afectan la estructura y propiedades, además de las reacciones que tienen lugar durante el tratamiento térmico. Las principales variaciones a la estructura que introduce son ^[12]:

- Extensión de la solubilidad del soluto en el solvente para el estado sólido.
- Formación de fases metaestables.
- Refinado de tamaño de grano.
- Modificación del esquema de segregación.
- Resistencia a la corrosión.

Estas técnicas requieren extraer todo el calor del líquido a elevada velocidad. Para ello se han desarrollado diversos procedimientos, entre los que cabe destacar la colada sobre una rueda giratoria (*melt spinning*), la atomización por gas inerte y la pulverización centrífuga. Todos estos métodos consisten en conseguir una muy rápida extracción de calor, para lo cual es necesario que, al menos, una de las dimensiones de la masa líquida sea lo suficientemente delgada.

Con la gran velocidad de enfriamiento se consigue también un considerable subenfriamiento, por debajo de la temperatura de solidificación. Por lo tanto, la solidificación tiene lugar en condiciones que no son las del equilibrio y, dado que el material está subenfriado, se consigue una gran velocidad de desplazamiento del frente sólido/líquido. Esto conlleva una serie de efectos a nivel de microestructura entre las que se encuentran: el refinamiento de grano, la escasa o nula microsegregación de otras fases, la solubilidad extendida de los elementos aleantes y la formación de fases cristalinas metaestables, amorfas o cuasi cristalinas ^[13].

En la mayoría de los casos la dimensión estrecha del líquido es inferior a 100 micras y la velocidad de enfriamiento se ha estimado que está comprendida entre 10^5 y 10^7 K/s. Esto conduce a tiempos de solidificación bastante rápidos, de apenas unos pocos milisegundos.

En la Figura 1 se esquematiza un diagrama TTT (temperatura, transformación y tiempo), donde T_l es la temperatura de fusión y T_g la temperatura de transición vítrea. El diagrama sirve para identificar las condiciones del proceso de obtención de un vidrio metálico, tal como se muestra en la flecha azul. Cuando el material está en un equilibrio metaestable se puede someter

a un tratamiento térmico y se puede inducir la cristalización hacia otras fases estables. Además, pueden añadirse pequeñas cantidades de elementos no metálicos a la aleación, esto induce una cierta direccionalidad en los enlaces químicos, lo que dificulta la cristalización y en el diagrama TTT se ve como un desplazamiento de la zona de cristalinidad a la derecha.

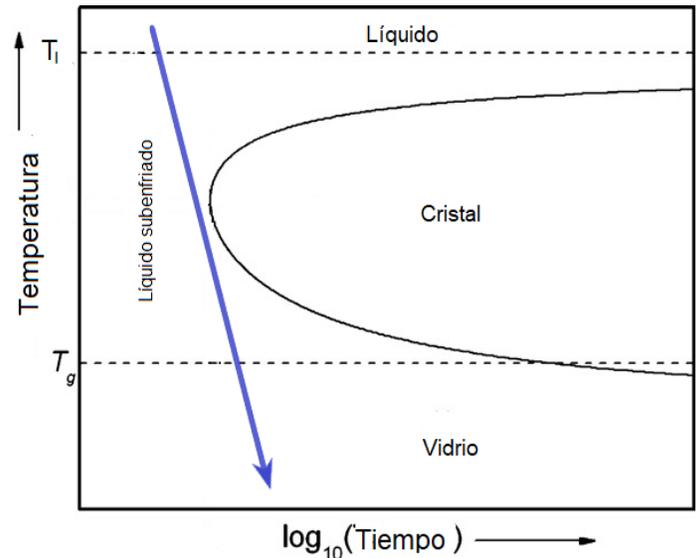


Figura 1. Representación esquemática de una curva TTT (Temperatura, Transformación, Tiempo) para la transformación y tratamiento térmico de un vidrio metálico.

En el caso de las aleaciones vítreas obtenidas por RST, la temperatura evoluciona de la forma indicada en la figura mediante la línea azul. A causa de la gran velocidad de enfriamiento y antes de empezar la solidificación, el líquido ha sufrido un subenfriamiento $\Delta T = T_l - T_x$, donde T_l es la temperatura líquida y T_x la temperatura que se alcanza por debajo de la temperatura de nucleación.

Para el caso de un enfriamiento al equilibrio, a partir del momento en que se alcanza la temperatura de nucleación comienza la solidificación, el calor latente (se refiere a la cantidad de energía requerida por una sustancia para cambiar su fase) que se genera en la intercara sólido-líquido, pasa tanto al sólido como al líquido y hace que la temperatura del material suba hasta un valor muy próximo al de solidificación. Cabe mencionar que a esta temperatura estacionaria (que está debajo de la solidificación) tiene lugar el resto de la solidificación y el proceso es casi totalmente controlado por la extracción de calor al exterior del material.

Electroquímica de la corrosión

Las reacciones de corrosión metálica en soluciones acuosas son de naturaleza electroquímica y pueden expresarse como la suma de dos medias reacciones ^[15]: uno que representa la reacción catódica (de reducción) y otro que corresponde a una reacción anódica (de oxidación). Cuando una muestra de metal y el electrolito en el que está sumergido están eléctricamente aislados de cualquier circuito externo, no fluirá corriente neta entre los dos medios y las corrientes asociadas con las semirreacciones anódicas y catódicas deberán ser iguales en magnitud y opuestas en dirección. Si la fuerza impulsora para que ocurra una reacción es mayor que la de la otra en una superficie eléctricamente neutra, se acumulará una carga en la interfaz. Esta interfaz cargada se conoce como la doble capa eléctrica; actúa para inhibir la primera reacción y propiciar la segunda, para que las velocidades sean iguales.

De acuerdo con la naturaleza de la reacción que ocurre en la superficie del metal se puede obtener información aplicando un potencial diferente del potencial de equilibrio y midiendo la corriente resultante, mediante el uso de un equipo llamado potencióstato. El potencial de superficie de la muestra puede variarse aplicando un potencial entre la muestra y un electrodo inerte portador de corriente que está inmerso en el mismo electrolito que la muestra. Cuando el potencial de una muestra de metal se lleva a un valor más positivo que el del potencial de equilibrio, la velocidad de reacción anódica aumenta, lo que le da una corriente positiva. En contraparte, se produce una corriente negativa cuando el potencial aplicado es menos positivo que el potencial de equilibrio. Los resultados se representan como potencial vs. logaritmo de magnitud actual.

En la figura 2 se muestra un ejemplo típico de una curva de polarización, en donde las pendientes de las porciones lineales de las curvas se conocen como pendientes de Tafel. La parte inferior o catódica de la curva representa las reacciones de reducción; por ejemplo, la reducción de iones de hidrógeno u oxígeno elemental. Una pendiente baja y una relación lineal en esta porción de la curva indican activación superficial o control de la reacción química de la velocidad de reacción catódica.

Las curvas de polarización también pueden presentar una pendiente alta y una relación no lineal que indican que la reacción de reducción está siendo controlada y retardada por otro tipo de fenómeno, generalmente difusión.

La parte superior, o anódica, de la curva representa las reacciones de oxidación, principalmente la disolución del metal. Una pendiente baja en esta parte de la curva indica que

la reacción anódica está controlada por activación, mientras que una pendiente vertical en esta parte de la curva indica que otro fenómeno está controlando la velocidad de reacción anódica, generalmente se trata de pasivación o de la formación de una película superficial.

La pendiente de un gráfico lineal del potencial frente a la corriente se conoce como resistencia de polarización, la pendiente debe obtenerse cerca del potencial de corrosión. La resistencia a la polarización es inversamente proporcional a la velocidad de corrosión, si todos los demás factores se mantienen constantes.

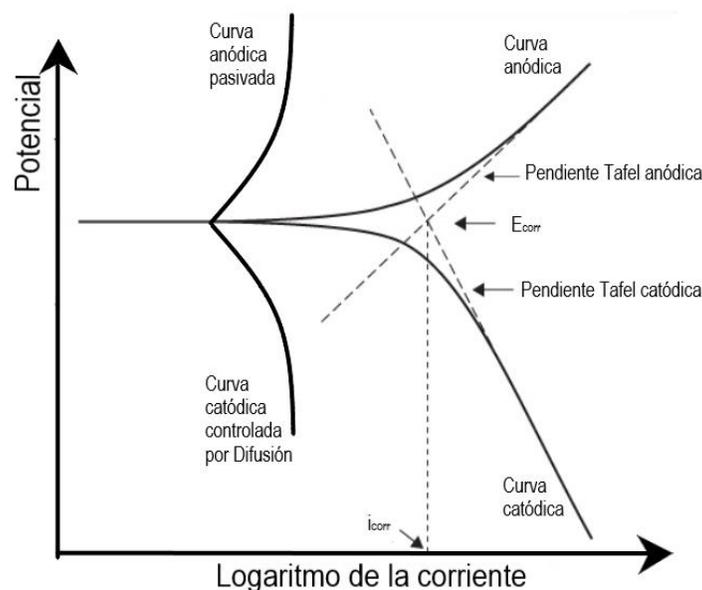


Figura 2. Esquema típico de una curva de corrosión.

Comportamiento electroquímico de los vidrios metálicos

El comportamiento electroquímico de los vidrios metálicos se puede asociar a las siguientes características: estructura vítrea, composición química y homogeneidad ^[16]. El acomodo de corto alcance de los vidrios metálicos implica la ausencia de defectos cristalinos como límites de grano, dislocaciones y demás imperfecciones cristalinas, todas ellas favorecen la corrosión. Al no presentarse este tipo de defecto en los vidrios metálicos, son más resistentes a la corrosión. Más aún, debido a su fase simple y gran homogeneidad carecen de dos partes distintas de una superficie metálica o de dos metales distintos (pares galvánicos), asociados a estructuras multifásicas ^[17].

Por otro lado, la gran resistencia de ciertas aleaciones cristalinas se debe a la presencia de películas superficiales pasivantes^[11]. La cinética de corrosión de algunos vidrios metálicos es similar a la de la película pasivante. Los vidrios metálicos del primer grupo poseen una alta proporción de metaloides y estos elementos pueden tener una gran influencia sobre la reacción catódica de corrosión.

Al igual que para cualquier aleación metálica, la corrosión de un vidrio metálico a temperatura ambiente es una reacción electroquímica, que puede dividirse en dos o más reacciones de oxidación y reducción; y dado que el vidrio metálico es neutro, la velocidad total de la oxidación deber ser igual a la reducción^[11]. A continuación, en la figura 3 se muestran tres casos del diagrama de Evans cuando se modifican la estructura y composición de una superficie metálica. La figura 3a muestra el caso de una aleación "M" inmersa en un electrolito ácido, en donde el diagrama de Evans correspondiente a este sistema determina el potencial y la intensidad de corriente de la corrosión en el punto de intersección. De esto podemos inferir que la velocidad de disolución (i_{corr}) es función de la densidad de corriente de intercambio (i_0).

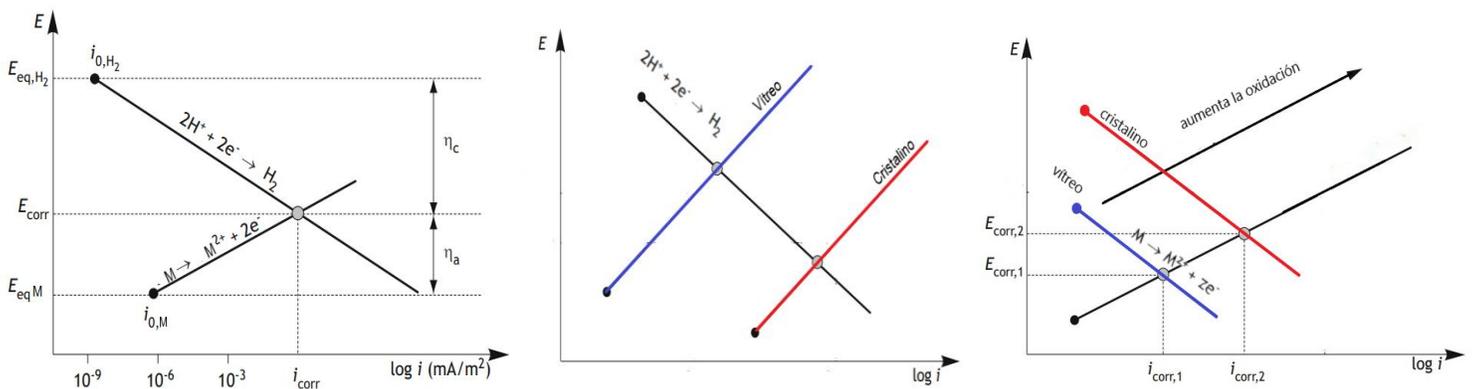
Si se compara una aleación cristalina con otra amorfa de la misma composición, el factor dominante en esta reacción electroquímica será controlada por el proceso parcial anódico; la corriente de intercambio i_0 , será menor en la aleación amorfa y por lo tanto también disminuirá la intensidad de la corrosión (figura 3b). Finalmente, en la figura 3c se observa la disminución de la intensidad de corrosión de una aleación amorfa con respecto a su homóloga cristalina, cuando el control cinético de la reacción es catódico.

Factores que afectan la resistencia a la corrosión de los vidrios metálicos

La excelente resistencia a la corrosión de los vidrios metálicos se atribuye principalmente a: que hay una única fase vítrea homogénea, la composición química de la aleación y la presencia de metaloides^[18,19].

Al tratarse de una sola fase, no se espera la presencia de límites de grano, dislocaciones y otros defectos que puedan ocurrir (que son factores donde se da preferentemente la corrosión). En su lugar, se esperaría el crecimiento de una película protectora uniforme que active el mecanismo de pasivación. Otro factor es la homogeneidad de la composición química, debida a las velocidades rápidas de enfriamiento que son necesarias para producir una estructura totalmente vítrea contribuye a su alta resistencia a la corrosión, ya que no se dispone de tiempo suficiente para la difusión en estado sólido, es decir, es imposible la formación de segundas fases, precipitados y segregaciones.

La homogeneidad en la composición química y la microestructura promueven la formación de óxido en la superficie que retarda el transporte iónico. También se considera que la mejora de la resistencia a la corrosión está relacionada con la capacidad de estas aleaciones metaestables para formar una solución sólida sobresaturada en uno o más elementos de aleación. El elemento de aleación disponible en la solución sólida puede incorporarse a la película de óxido para mejorar su pasividad.



Figuras 3a, 3b, 3c: Representación esquemática de diagramas de Evans mostrando la influencia de la estructura en la densidad de corriente y el potencial de corrosión [16].

Por lo tanto, el efecto de la estructura vítrea, la homogeneidad química y estructural, y la posibilidad de formar una composición química única (que no es típica de las aleaciones cristalinas cercanas al equilibrio) se consideran principalmente como factores que pueden afectar las propiedades de corrosión del vidrio metálico.

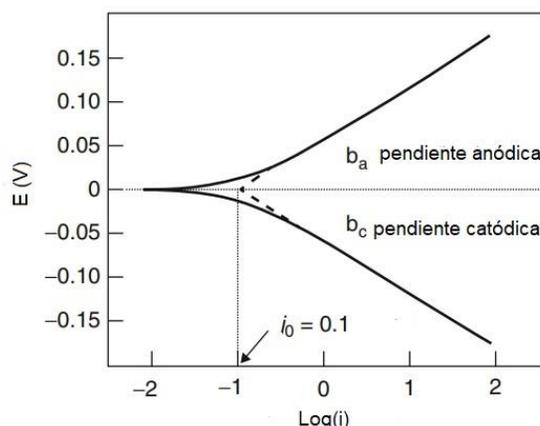
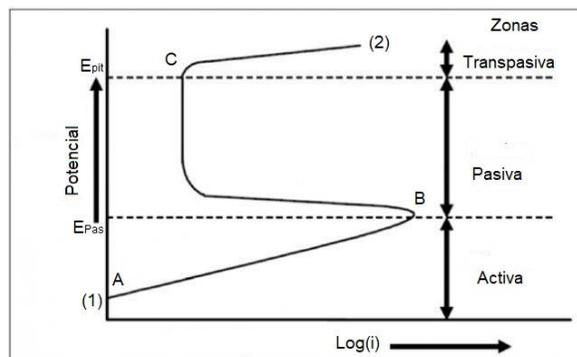
Técnicas para estimar la resistencia a la corrosión

La resistencia a la corrosión puede estimarse mediante la prueba de inmersión, que es uno de los métodos para calcular la velocidad de corrosión promedio en un año. Dentro de los métodos electroquímicos se encuentra la polarización potenciodinámica (PP) y se aplican en la mayoría de las investigaciones. Esta técnica permite obtener información relevante sobre los procesos de los electrodos de estudio, como el potencial de corrosión (E_{corr}), la densidad de corriente de corrosión (i_{corr}), la velocidad de corrosión, la susceptibilidad a las picaduras, la pasividad y el comportamiento catódico.

A continuación, se ilustra una curva esquemática de la polarización anódica teórica y la estimación del potencial de corrosión y la densidad de corriente de corrosión en la Figura 4. Como puede verse en la Figura 4a, el inicio de la exploración forma el punto (1) y progresa en la dirección del potencial positivo hasta la terminación en el punto (2), el potencial a circuito abierto se ubica en el punto A. En el potencial, la suma de las velocidades de reacción anódica y catódica en la superficie del electrodo es cero. Por eso, la corriente medida se cerrará a cero. Con el aumento del potencial, se mueve a la región activa. En esta región, la oxidación de metales es la reacción dominante que tiene lugar. El punto B se conoce como el potencial de pasivación (E_{pas}), y a medida que el potencial aplicado aumenta por encima del valor, se observa que la densidad de corriente disminuye hasta que se alcanza una densidad de corriente pasiva baja, en la región pasiva E. Una vez que el potencial alcanzó un valor suficientemente positivo, es decir, situado como el punto C (denominado potencial de ruptura), la corriente aplicada aumenta rápidamente.

Por otro lado, en la Figura 4b se ajusta una nueva línea de acuerdo con las regiones lineales de la curva de polarización alrededor del potencial a circuito abierto. Donde intersecan ambas pendientes en el punto de cruce se obtiene la densidad de corriente de corrosión (i_{corr}) y el potencial de corrosión (E_{corr}). En general, se acepta que cuanto mayor sea el potencial

de corrosión, más difícil será que ocurra la reacción de oxidación de los metales. Por lo tanto, cuanto mayor es la densidad de corriente de corrosión, mayor es la velocidad de corrosión, es decir, menor es la resistencia a la corrosión de los vidrios metálicos.



Figuras 4a y 4b Curva potenciodinámica a) parte anódica, b) ajuste mediante pendiente Tafel.

Mientras que para la susceptibilidad a la corrosión por picaduras se mide, generalmente, la polarización cíclica en la parte anódica. Algunos parámetros y características típicas con respecto a la susceptibilidad a la corrosión por picaduras se definen en las curvas de polarización esquemática de la Figura 5. Se inicia un escaneo de potencial por debajo del potencial de corrosión (E_{corr}). Después en E_{corr} , la densidad de corriente llega a cero y luego aumenta a un valor anódico bajo y aproximadamente constante en el rango pasivo. En este rango, una película delgada de óxido/ hidróxido (una película pasiva), protege el material de altas velocidades de corrosión. Si la densidad de corriente disminuye cuando se invierte la dirección de exploración potencial, como en la ruta I, se muestra que el material es inmune a la corrosión por picaduras. Sin embargo, si en el barrido de potencial ascendente, la densidad de corriente aumenta repentinamente

y permanece alta en el barrido descendente, hasta que finalmente disminuye al valor de la región pasiva, como en la ruta 2, se muestra que el material sufre una forma de corrosión por picaduras. El potencial al cual la densidad de corriente aumenta repentinamente (inicio de picaduras) se conoce como potencial de picado, E_{pit} , y el potencial al cual la densidad de corriente regresa al valor pasivo se conoce como potencial de repasivación o potencial de protección, E_{rp} . Entre E_{pit} y E_{rp} , las picaduras se inician y se propagan. En el caso de la ruta 2, las picaduras no se iniciarán en E_{corr} , el potencial de corrosión natural; y, por lo tanto, el material no sufrirá corrosión por picaduras en condiciones de corrosión natural. Si por otro lado se exhibe la ruta 3, donde E_{rp} está por debajo de E_{corr} , el material sufrirá corrosión por picaduras en los defectos de la superficie. En términos de la resistencia general a la corrosión por picaduras, los parámetros de $(E_{pit} - E_{corr})$ y $(E_{rp} - E_{corr})$ son importantes. Los valores más altos de ambos son deseables para reflejar valores altos de E_{pit} y E_{rp} en relación con E_{corr} .

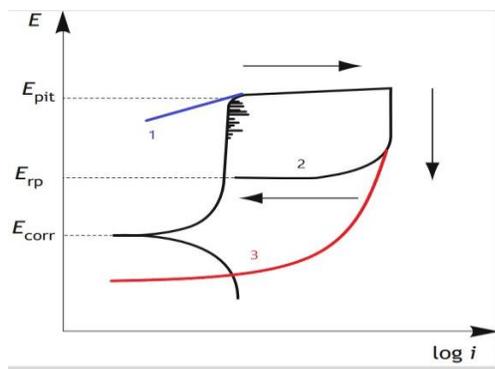


Figura 5. Esquema de una curva potenciodinámica cíclica [19].

Conclusiones

La corrosión por picadura es el mecanismo de corrosión que más afecta a los vidrios metálicos, debido a su comportamiento que es equiparable al de una película pasiva.

El arreglo de corto alcance hace que, difícilmente, se presente una corrosión uniforme en el material, al no propagarse a través de los defectos asociados a la cristalinidad. La homogeneidad química impide la presencia de pares galvánicos que propician la corrosión.

Agradecimientos: IAF Agradece al proyecto UNAM-DGAPA - PAPIIT "INI02319" por el financiamiento otorgado. También agradece a los siguientes técnicos por su apoyo: Gabriel Lara, Carlos Flores, Omar Novelo, Adriana Tejeda, Alberto López, Carlos Ramos, Raúl Reyes, Francisca García, Josué Romero, Fernando Silvar y A. Bobadilla.

Referencias

- [1] W. H. Wang, C. Dong, C. H. Shek, "Bulk metallic glasses". *Material Science and Engineering*, Vol. 44 (2004), 45-89 pp.
- [2] M. Demetriou, M. Launey, G. Garrett, et al., "A damage-tolerant glass", *Nature Mater*, Vol. 10 (2011), 123-128 pp.
- [3] Y. H. Liu, G. Wang, R. J. Wang, et al., "Super plastic bulkmetallic glasses at room temperature", *Science*, Vol. 315 (2007), 1385-1388 pp.
- [4] Y. Waseda, K. T. Aust, "Corrosion behavior of metallic glasses", *Journal of Materials Science*, Vol. 16 (1981), 2337-2359 pp.
- [5] S. Malkowski, R. Adhikari, B. Hona, "Plaster, Technique for high axial shielding factor performance of large-scale, thin, open-ended, cylindrical Metglas magnetic shields", *Review of Scientific Instruments*, Vol. 82 (2011).
- [6] E. Perim, D. Lee, Y. Liu, "Spectral descriptors for bulk metallic glasses based on the thermodynamics of competing crystalline phases", *Nature Communications*, Vol. 7 (2016).
- [7] M. L. Green, I. Takeuchi, J. R. Hattrick-Simpers, "Applications of high throughput (combinatorial) methodologies to electronic, magnetic, optical, and energy-related materials". *Journal of Applied Physics*, Vol. 113 (2013).
- [8] P. Duwez, W. Klement, R. H. Willens, "Non-Crystalline Structure in Solidified Gold-Silicon Alloys". *Nature*, Vol. 187 (1960), 869-870 pp.
- [9] M. L. Escudero, J. A. González, J. Albéniz, E. Ascasibar, "Efecto de la concentración de cromo en los vidrios metálicos", *Rev. Metal*, Madrid, Vol. 23 (1987), 413-418 pp.
- [10] T. J. Summerson, D. O. Sprowls, "Corrosion Behaviour of Aluminium Alloys", *Aluminium Alloys. Their Physical and Mechanical Properties (Proc. Conf.)*, Vol. 3 (1986), 1575-1662 pp.
- [11] S. Feliu, M. Morcillo, "Corrosión atmosférica", *Corrosión y Protección Metálicas*, Consejo Superior de Investigaciones Científicas, Nuevas Tendencias, Madrid, (1991).
- [12] L.E. Collins, "Overview of Rapid Solidification Technology", *The Canadian Journal of Metallurgy and Materials Science*, Vol. 25 (1986), 59-72 pp.
- [13] P.R. Sahm, H. Jones, C. M. Adam, "Science and Technology of the Undercooled Melt". Ed. NATO ASI Series, Alemania, (1986).
- [14] H. Jones, "The status of rapid solidification of alloys in research and application", *Journal of Materials Science*, Vol. 19 (1984), 1043-1076 pp.
- [15] P. Marcus, "Corrosion Mechanisms in Theory and Practice", Marcel Dekker Inc., New York, (2002).
- [16] R. M. Latanision, J. C. Turn JR., C. R. Compean, "The corrosion resistance of metallic glasses", *International Conference on Mechanical Behaviour of Materials*, (1979), 475-483 pp.
- [17] M. D. Archer, C.C. Corke, B. H. Harji, "The electrochemical properties of metallic glasses", *Electrochimica Acta*, Vol. 32 (1987), 11-26 pp.
- [18] M. Naka, K. Hashimoto, T. Masumoto, "Effect of metalloidal elements on corrosion resistance of amorphous iron-chromium alloys". *Journal of Non-Crystalline Solids*, Vol. 28 (1978), 403-413 pp.
- [19] J.R. Scully, A. Gebert, J. H. Payer, "Corrosion and related mechanical properties of bulk metallic glasses". *Journal of Material Research*, Vol. 22 (2007), 302-313 pp.
- [20] W. H. Peter, R. A. Buchanan, C. T. Liu, et al., "Localized corrosion behavior of a zirconium-based bulk metallic glass relative to its crystalline state", *Intermetallics*, Vol. 10 (2002), 1157-1162 pp.
- [21] A. Lekatou, A. Marinou, P. Patsalas, "Aqueous corrosion behaviour of Fe-Ni-B metal glasses". *Journal of Alloys and Compounds*, Vol. 48 (2009), 514-518 pp.
- [22] S. K. Das, L. A. Davis, "High Performance Aerospace Alloys via Rapid Solidification Processing", *Materials Science and Engineering*, Vol. 98 (1988), 1-12 pp.

En búsqueda de nuevos materiales superconductores

Doroteo Mendoza López

Instituto de Investigaciones en Materiales,
Universidad Nacional Autónoma de México, Coyoacán,
CP 04510, Ciudad de México, México

doroteo@unam.mx

Aspectos Generales

El campo de la superconductividad es un área muy activa, ya sea desde el punto de vista experimental (en la búsqueda de nuevos materiales), como en la parte teórica (que permite explicar los mecanismos microscópicos necesarios para entender el fenómeno).

En 1911, Kamerling Onnes descubrió el fenómeno de la superconductividad al enfriar mercurio hasta temperaturas del helio líquido. El experimento consistió en medir la resistencia eléctrica R del material como función de la temperatura T mientras este se enfriaba. Encontró que R disminuía monótonamente, pero al llegar a cierta temperatura $T_c = 4.2$ K, la resistencia caía abruptamente a valores tan bajos que incluso eran imposibles de medir en aquella época.

Experimentalmente, lo que se encuentra es que R fluctúa alrededor de cero y esto puede interpretarse como *resistencia eléctrica cero* o *conductividad infinita*. Se habla entonces del “estado normal” del material, para $T > T_c$, y del “estado superconductor”, para $T < T_c$. En donde T_c es la temperatura crítica superconductor. Es prácticamente imposible medir una *resistencia cero*, lo que sí se puede hacer son estimaciones de los límites que pueden tomar ciertos parámetros.

Por ejemplo, en un experimento con un solenoide hecho con alambre de Nb_3Zr , File y Mills [1] indujeron una corriente eléctrica en el estado superconductor y la dejaron circulando. Esta supercorriente induce un campo magnético que fue rastreado a lo largo del tiempo. De este experimento se dedujeron dos conclusiones importantes: si el material superconductor tuviera resistividad eléctrica finita, esta tendría como valor máximo para el $Nb_3Zr \sim 5 \times 10^{-22} \Omega \text{cm}$ y si, por disipación la corriente inducida empezara a decaer, este decaimiento sería en un t medio mínimo de 120 000 años.

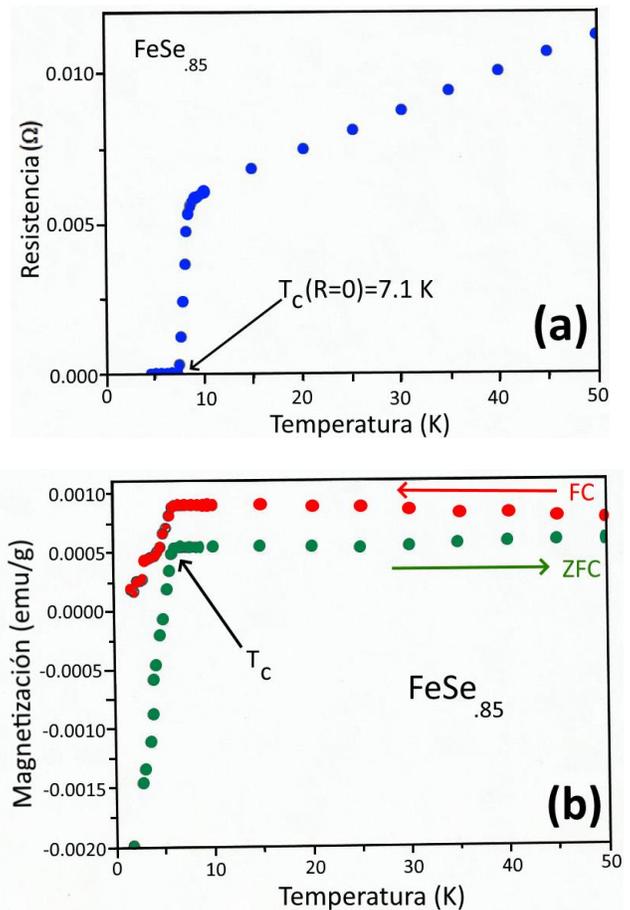


Figura 1. Superconductividad en el compuesto $FeSe_{0.85}$; (a) resistencia eléctrica y (b) magnetización como función de la temperatura. Para obtener la curva de magnetización ZFC (“Zero Field Cooling”, ZFC) la muestra se enfría hasta la mínima temperatura de medición en ausencia del campo magnético, se aplica el campo y se empieza a medir subiendo T , se llega a la máxima T y sin quitar el campo magnético se empieza a bajar T , que es la curva FC (“Field Cooling”, FC). Resultados adaptados de [2]. Idealmente, las dos curvas (FC y ZFC) deberían ser idénticas, la diferencia se debe a zonas normales y otro tipo de defectos, lo que indica la pureza del material superconductor (la curva FC es la que se toma como la indicación del efecto Meissner-Ochsenfeld).

Actualmente, ya se ha reportado superconductividad a temperatura ambiente, con $T_C \sim 15 \text{ }^\circ\text{C}$ a una presión de 2.6×10^6 atmósferas en un compuesto del tipo $C_xS_yH_z$ (idealmente se espera la estequiometría CSH_8) [21]. Es interesante mencionar que el diseño de estos sistemas se basa en la idea de que el hidrógeno presente en el compuesto juega un papel fundamental: en primer lugar porque la teoría apunta a que el hidrógeno en sí mismo puede ser un superconductor a muy altas presiones [8,9]; en segundo lugar, también se ha propuesto que el hidrógeno incorporado a estructuras más complejas con otros elementos resultaría en materiales que necesiten presiones más bajas para ser superconductores con altas temperaturas críticas [22]. A estos compuestos se les denomina hidruros (o *superhidruros* si la proporción atómica del hidrógeno es alta respecto a los otros elementos dentro del compuesto) [23]. En particular, ha sido propuesto que el superhidruro YH_{10} a 250 GPa podría ser superconductor arriba de temperatura ambiente [24].

Teoría de la superconductividad

Desde el descubrimiento experimental de la superconductividad pasaron 46 años hasta que Bardeen, Cooper y Schrieffer propusieron una teoría microscópica que explicara el fenómeno [25] (ahora conocida como la teoría BCS). Uno de los aspectos fundamentales de la teoría BCS es la existencia de una atracción entre dos electrones para formar los denominados *pares de Cooper*. Si bien la interacción electrostática entre electrones es repulsiva, dentro de esta teoría se supone que existe una atracción debida a una intermediación de la red atómica del sólido; con lo que se dice que existe una atracción electrónica mediada por fonones para formar el par de Cooper donde los electrones tienen espines y momentos opuestos.

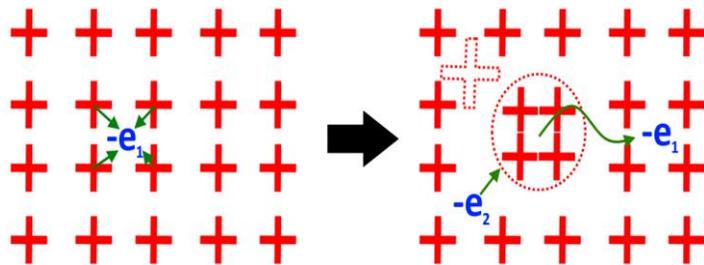


Figura 3. Esquema ilustrativo para visualizar la interacción atractiva entre dos electrones e_1 y e_2 mediado por el movimiento vibratorio de los iones positivos de la red.

La teoría BCS es abstracta y compleja, pero existe una idea sobresimplificada para visualizar la interacción atractiva entre electrones propuesta por Little en 1965 [26] y que, aún en la actualidad, se sigue usando como guía intuitiva [23] (figura 3).

Al moverse el electrón e_1 por la red, localmente atrae a los iones positivos hacia él y momentáneamente queda una región más positiva, es entonces que un segundo electrón e_2 siente el exceso de carga positiva y se mueve hacia dicha región: existió una interacción “atractiva” entre e_1 y e_2 mediada por la red (fonones). La red tiene frecuencias características en las que puede vibrar y, al moverse, regresar momentáneamente a su estado de equilibrio. En una estimación burda, podemos decir que el tiempo transcurrido durante la interacción entre el par de electrones es $\tau \sim 2\pi/\omega_D$ (ω_D = frecuencia de Debye). Durante este tiempo característico el electrón viaja una distancia aproximada $d \sim v_F\tau = v_F(2\pi/\omega_D)$, donde v_F es la velocidad de Fermi. Por ejemplo, para el estaño $\omega_D \sim 3 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$, $v_F \sim 10^6 \text{ m/s}$; lo que lleva a $d \sim 2 \times 10^{-7} \text{ m} = 2000 \text{ \AA}$. Es decir, la distancia media en la que interactúa el par de electrones es de muchas veces la distancia interatómica.

Un resultado importante de la teoría BCS es la predicción de la temperatura crítica superconductor:

$$k_B T_C \approx 1.14 \hbar \omega_D e^{-1/D(E_F)V} \tag{1}$$

donde k_B es la constante de Boltzmann, $D(E_F)$ es la densidad de estados electrónicos evaluada en la energía de Fermi E_F y V la magnitud del potencial atractivo entre electrones del par de Cooper. Como una idea general, si queremos altas temperaturas T_C tenemos que buscar materiales con ω_D , $D(E_F)$ y V grandes. Otro resultado trascendente es la existencia de una brecha superconductor 2Δ en la estructura electrónica que se abre alrededor de la energía de Fermi a T_C y aumenta al bajar la temperatura en el estado superconductor: debajo de la brecha quedan los pares de Cooper y por arriba los electrones normales.

Basado en la relación (1) se llegó a pensar que existía limitación para la temperatura crítica superconductor tal que $T_C < 40 \text{ K}$ [27], pero la relación (1) es aproximada y ahora se considera que dicho límite no aplica para T_C considerando que el apareamiento electrónico sea mediado por fonones. Empleando la teoría de Eliashberg se encuentra que para T_C :

$$T_C \sim (k/M)^{1/2} \tag{2}$$

Aquí, el parámetro k está relacionado con el cambio del potencial de interacción atómica al desplazarse de manera

relativa dentro del sólido del átomo de masa M [28]. Basado en la relación (2), la búsqueda de materiales que pudieran tener altas temperaturas críticas superconductoras se centra en tener grandes energías de cohesión y pequeñas masas atómicas. Otro aspecto que se puede ver de la relación (2) es que, al depender la temperatura crítica de la masa del átomo del sólido, entonces, si se cambiara por un isótopo, T_c también varía y a esto se le denomina *efecto isotópico*, lo que es característico del mecanismo de apareamiento electrónico mediado por fonones.

A los superconductores con un comportamiento que pueda ser explicado con la teoría BCS, o donde el apareamiento electrónico sea mediado por fonones, se les conoce como *superconductores convencionales*. Dentro de los superconductores convencionales encontraremos a muchos de los elementos como Al, Sn, Pb, Hg; también el MgB_2 , los compuestos a base de fullerenos [28] y, lo más reciente, compuestos que contienen hidrógeno (hidruros o superhidruros) [23]. Bajo la perspectiva de la relación (2), se puede pensar que la superconductividad en los hidruros está relacionada con la masa del hidrógeno [22], la cual es la más pequeña de todos los elementos y en sí mismo ha sido propuesto como un superconductor con alta T_c [8]. Fuera de la familia de los superconductores convencionales se encuentran los fermiones pesados, compuestos que contienen Fe y las cerámicas a base de cobre [28].

Es importante mencionar que se han propuesto mecanismos diferentes a la interacción electrón-fonón para la formación de pares de Cooper; notablemente la interacción excitónica [27, 29] y la plasmónica [30]. Ginsburg generaliza el concepto de excitón considerando que es una excitación elemental o cuasipartícula que obedece la estadística de Bose-Einstein [27], pero en particular, el excitón puede ser un par electrón-hueco [31,32]. Suponiendo intermediación excitónica o plasmónica para el apareamiento electrónico se llegan a expresiones similares a la relación (1); pero en lugar de la energía característica fonónica $\hbar\omega_D$ en el prefactor, se tiene una energía característica $\hbar\omega_E$ [33] para el excitón o E_F (energía de Fermi) [30] para el caso de la intermediación plasmónica. Se ha propuesto que, en ciertos sistemas, aparte de la interacción fonónica también puede presentarse (al mismo tiempo) la interacción excitónica [31] o la plasmónica [34]; lo que de manera cooperativa puede reforzar el incremento de T_c .

Es importante remarcar que una generalización de la teoría BCS está basada en el formalismo desarrollado principalmente por Eliashberg. En la versión moderna, el ingrediente principal

es la denominada *función espectral de Eliashberg*, $\alpha^2F(\omega)$, donde α es el parámetro de acoplamiento electrón-fonón y $F(\omega)$ es la densidad de estados fonónicos (ver, por ejemplo, la referencia 35). En las extensiones que se han propuesto, donde la intermediación para el apareamiento electrónico es diferente a la fonónica, se usa el mismo formalismo de Eliashberg, pero la función espectral se generaliza a otras posibles intermediaciones bosónicas (como la excitónica o plasmónica comentadas anteriormente). Fue gracias a experimentos en dispositivos de efecto túnel (formados con películas delgadas de plomo (Pb) en el orden Pb-aislante-Pb), que McMillan y Rowell [36] mostraron que es posible obtener la función espectral de Eliashberg midiendo la característica de corriente como función del voltaje aplicado al dispositivo. Encontraron que la segunda derivada de la característica corriente-voltaje está relacionada con la función espectral, la que obtienen en un proceso de deconvolución. Con este resultado mostraron de manera definitiva que, en el caso del plomo, el acoplamiento es del tipo fonónico. Empleando dispositivos de efecto túnel también fue posible demostrar experimentalmente la existencia y evolución con la temperatura de la brecha superconductora (ver figura 4).

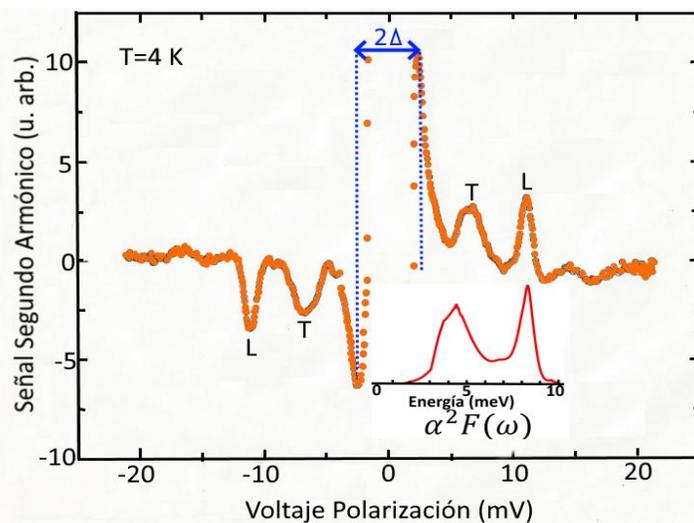


Figura 4. Curva del segundo armónico relacionada con la segunda derivada de la característica corriente-voltaje de una unión túnel del tipo Al-Al₂O₃-Pb. Nótese que, de manera general, aparece información de la estructura fonónica del Pb. T y L marcan los modos fonónicos transversales y longitudinales, respectivamente.

En el recuadro se muestra la función espectral de Eliashberg obtenido con una unión túnel del tipo Pb-aislante-Pb [36].

La estructura que se muestra alrededor de voltaje cero (correspondiente a la energía de Fermi) está relacionado con la brecha superconductora 2Δ del Pb. Experimento realizado en el laboratorio del Prof. R. Escudero, resultado no publicado.

El caso del bismuto

Las peculiares propiedades físicas del bismuto (Bi) han despertado gran interés en tiempos recientes. Se trata de un semimetal que posee una muy baja densidad de electrones libres $n \sim 3 \times 10^{17} - 10^{19} / \text{cm}^3$ [3,37], comparada con metales comunes (que es del orden de $10^{23} / \text{cm}^3$). La frecuencia de plasma ω_p correspondiente es del orden de 50 meV y cae en la región del lejano infrarrojo, pero lo interesante es que se han logrado excitar plasmones en la región visible, no con los electrones libres intrínsecos, sino con los que se excitan entre dos bandas (lo que se denomina plasmónica interbanda [37]).

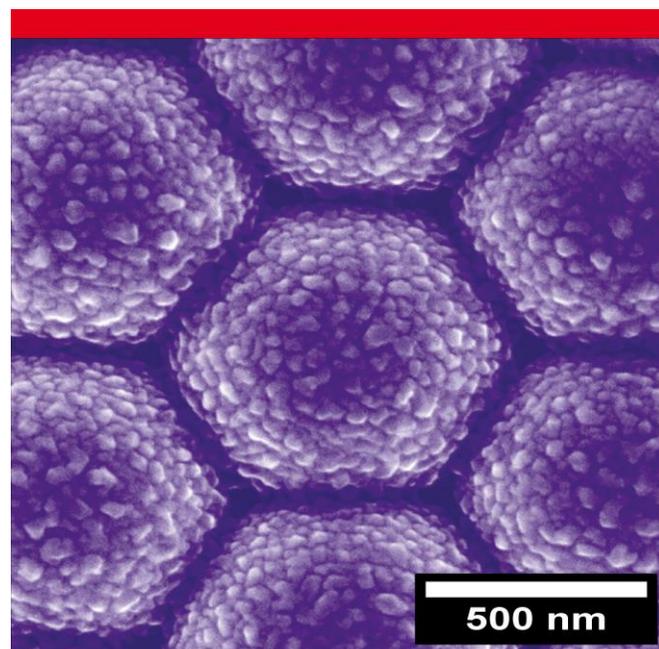
Entre sus propiedades electrónicas se ha encontrado que posee notables características termoeléctricas y de magnetorresistencia. Existe una interacción entre electrones y plasmones, lo que se manifiesta en una nueva cuasipartícula denominada plasmarón [38]. Presenta una transición de semimetal a semiconductor debido al confinamiento cuántico cuando se reducen las dimensiones del sistema [39] y que, en el caso de película delgada, se llega al límite de la monocapa denominada “bismuteno” (equivalente al grafeno en el caso del carbono) con características de semiconductor (ver, por ejemplo, [40]). Debido a la baja densidad electrónica su energía de Fermi es pequeña, $E_F \sim 25 \text{ meV}$, pero posee longitudes de camino libre mayores que 2 micras y movilidades electrónicas $\mu \geq 3.5 \times 10^7 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ [3], mayores que en el grafeno, recordando que este último material es considerado como idóneo en cuanto a dichas propiedades.

Pero lo más notable que se ha encontrado es la existencia de superconductividad a presión ambiental en monocristales [3]. El Bi es un sistema complejo debido a las diferentes fases cristalinas que se forman a altas presiones donde se ha encontrado superconductividad (ver figura 2), pero también porque existe superconductividad a presión ambiental en el mismo material en forma de película delgada granular o con estructura amorfa y en nanopartículas [41]. Si bien la temperatura crítica en monocristales es muy baja ($T_c \sim 0.5 \text{ mK}$), el fenómeno adquiere relevancia física al analizar las consecuencias conceptuales que se involucran. La teoría BCS se basa en la suposición que $\hbar\omega_D/E_F \ll 1$, pero en el caso del bismuto $\hbar\omega_D \sim 12 \text{ meV}$ [3], por lo que $\hbar\omega_D/E_F \sim 0.5$. Dentro de una generalización de la teoría basada en la interacción electrón-fonón se piensa que se puede explicar la superconductividad en el Bi, pero se mantiene abierta la posibilidad para otras opciones [3]. Se propone el mecanismo excitónico [42] y también el mecanismo plasmónico [43]. En particular la intermediación plasmónica ha sido propuesta

como coadyuvante en la superconductividad para sistemas con bajas densidades electrónicas (como es el caso del Bi) y se ha aplicado satisfactoriamente al SrTiO_3 con impurezas [34].

Algunos experimentos

Consideramos interesante explorar algunas propiedades físicas del bismuto en una configuración diferente que denominamos *metapelícula*. Empleando sustratos texturizados de óxido de aluminio, obtenidos por anodización de aluminio, el material de interés se deposita y adquiere la morfología del soporte (ver figura 5) [44]. La técnica de anodización permite controlar las dimensiones de la textura del sustrato y, por tanto, el de la metapelícula. En estas condiciones se pueden inducir plasmones superficiales bajo iluminación y variar la frecuencia característica de resonancia, entre otras cosas.



iopscience.org/nano

Featured article

Plasmonic resonances in hybrid systems of aluminum nanostructured arrays and few layer graphene within the UV-IR spectral range
R González-Campuzano, J M Saniger and D Mendoza

Figura 5. Imagen de microscopía electrónica de barrido de una metapelícula de aluminio depositada sobre nanodomos de óxido de aluminio nanoporoso, nótese la simetría hexagonal inducida por el sustrato (imagen coloreada digitalmente). Esta imagen fue la portada del número correspondiente a la referencia [44].

En nuestro laboratorio hemos trabajado con metapelículas de aluminio, plata, plomo [45] y actualmente se han hecho experimentos preliminares con metapelículas de bismuto. Como se comenta en la sección anterior, la frecuencia característica de plasma del Bi se localiza en el lejano infrarrojo; pero es posible hacerlo en la región visible. En experimentos de reflectancia óptica hemos observado mínimos característicos que se asocian con resonancias plasmónicas que pueden variarse dentro del espectro visible. Uno de los experimentos a realizar es el de transporte eléctrico en metapelículas de Bi en obscuridad y bajo iluminación, el último caso, a longitudes de onda que coincida con la frecuencia característica de resonancia plasmónica. Lo anterior ha mostrado cambios en las propiedades de transporte electrónico en metapelículas de aluminio [46]. La idea es estudiar el posible efecto en las propiedades de transporte electrónico por la excitación de plasmones o el simple efecto de la textura en la metapelícula de bismuto y, eventualmente, la existencia de superconductividad.

Otro tipo de experimento que consideramos interesante realizar se relaciona con una anomalía encontrada en las propiedades eléctricas de un sistema de grafeno con azufre. El objetivo era incorporar azufre dentro de las capas de grafeno y, eventualmente, estabilizar una fase bidimensional de azufre (la que denominamos *sulfureno* [47]). Cálculos estáticos muestran que la estructura del sulfureno es estable de manera aislada y presenta propiedades propias de un metal (figura 6). Aún hacen falta cálculos dinámicos para verificar si la estructura es estable en condiciones reales. Bajo las condiciones experimentales en las que se realizó el proceso de incorporación del azufre (empleando hidrógeno como gas de arrastre) el sistema estudiado contiene C, S e H, en su composición. Bajo la perspectiva del descubrimiento de superconductividad a temperatura ambiente en el sistema $C_xS_yH_z$ (ver sección introductoria) y la anomalía que observamos en nuestro sistema alrededor de 250 K (figura 7), creemos muy interesante realizar nuevos experimentos pues lo observado podría estar relacionado con fluctuaciones superconductoras. Una de las ideas en estos sistemas es que, intercalando entre capas de grafeno o bajo confinamiento, se pueden simular altas presiones. De cualquier manera, se propone que la existencia del azufre en estructuras de tipo sulfureno pudieran explicar las trazas de superconductividad observadas en grafito intercaladas con azufre [48].

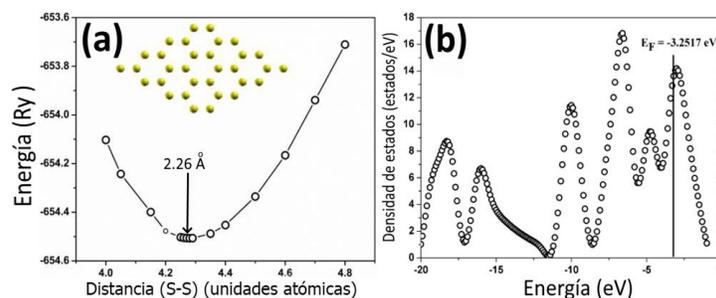


Figura 6. (a) Energía total de la estructura de S con la geometría hexagonal bidimensional (*Sulfureno*, recuadro), los cálculos estáticos indican que existe una energía mínima de estabilidad. (b) Densidad de estados electrónicos del sulfureno cuyo valor a la energía de Fermi es diferente de cero; por lo que indicaría un comportamiento de tipo metálico. Adaptado de [47].

También podemos mencionar el reciente descubrimiento de superconductividad en bicapas y tricapas de grafeno, en donde dichas capas se encuentran rotadas entre sí de manera relativa formando lo que se denomina *patrones de moiré* [4]. En estos casos se generan nuevos potenciales dentro de las superredes de moiré que modifican la estructura de bandas electrónica del sistema de capas, lo que induce superconductividad a presión ambiental (ver figura 2). Nosotros pensamos que otra manera de modificar los potenciales microscópicos a los que se sometan los portadores de carga en el grafeno puede ser, por ejemplo, depositándolo sobre sustratos de cristales iónicos. Este nuevo potencial periódico podría modificar las propiedades electrónicas del material y eventualmente inducir superconductividad [50].

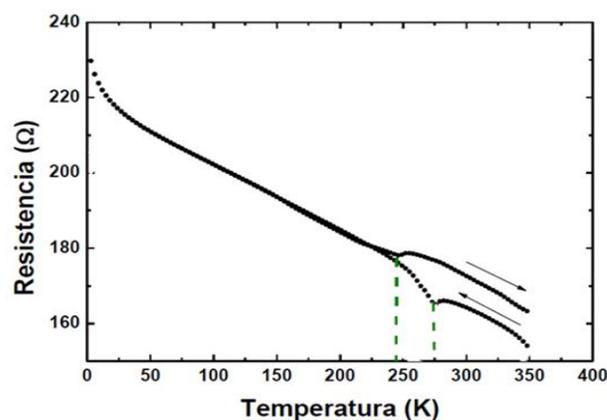


Figura 7. Resistencia eléctrica como función de la temperatura del sistema que consiste en dos capas sulfurizadas de multigrafeno. Si se observa la curva partiendo de altas temperaturas hacia abajo se notan bajadas repentinas de la resistencia en ~ 275 K y ~ 245 K (compárese con la figura 1 (a)). Curva adaptada de la Ref. [49]. Las flechas indican el sentido de la variación de la temperatura durante las mediciones.

NOTA: el 29 de octubre de 2021 en la revista *Science* (vol 374, # 6567) aparece el artículo titulado “Superconductor finding draws pointed critique”; por R. F. Service, donde se expone la existencia de una controversia sobre el contenido reportado en la referencia 21.

Referencias

- [1] J. File and R. G. Mills. “Observation of persistent current in a superconducting solenoid”. *Phys. Rev. Lett.*, **10** (1963), 93
- [2] D. Mendoza, J.L. Benítez, F. Morales, R. Escudero. “Magnetic anomaly in superconducting FeSe”. *Solid State Commun.*, **150** (2010), 1124-1127
- [3] O. Prakash, A. Kumar, A. Thamizhavel, S. Ramakrishnan. “Evidence for bulk superconductivity in pure bismuth single crystals at ambient pressure”. *Science*, **355** (2017), 52
- [4] J. M. Park, Y. Cao, K. Watanabe, T. Taniguchi, P. Jarillo-Herrero. “Tunable strongly coupled superconductivity in magic-angle twisted trilayer graphene”. *Nature*, **590** (2021), 249
- [5] M. Debessai, T. Matsuoka, J. J. Hamlin, W. Bi, Y. Meng, K. Shimizu, J. S. Schilling. “Pressure-induced superconductivity in europium metal”. *J. Phys.: Conf. Series*, **215** (2010), 012034
- [6] J. Song, G. Fabbris, W. Bi, D. Haske, J. S. Schilling. “Pressure-induced superconductivity in elemental ytterbium metal”. *Phys. Rev. Lett.*, **121** (2018), 037004
- [7] R. Falconi, R. Escudero. “Altas presiones en el estudio de materiales”. *MATERIALES avanzados*, 2003, Núm. 1
- [8] N. W. Ashcroft. “Metallic hydrogen: a high-temperature superconductor?”. *Phys. Rev. Lett.*, **21** (1968), 1748
- [9] V. L. Ginzburg. “Superfluidity and superconductivity in the universe”. *J. Stat. Phys.*, **1** (1969), 3
- [10] J. G. Berdnorz, K. A. Müller. “Possible high T_c superconductivity in the Ba-La-Cu-O system”. *Z. Physik B*, **64**(1986), 189
- [11] A. Schilling, M. Cantoni, J. D. Guo, H. R. Ott. “Superconductivity above 130K in the Hg-Ba-Ca-Cu-O system”. *Nature*, **363** (1993), 56
- [12] L. Gao, Y. Y. Xue, F. Chen, Q. Xiong, R. L. Meng, D. Ramirez, C. W. Chu, J. H. Eggert, H. K. Mao. “Superconductivity up to 164 K in HgBa₂Ca_{m-1}Cu_mO_{2m+2+δ} (m=1, 2, and 3) under quasihydrostatic pressures”. *Phys. Rev. B*, **50** (1994), 4260(R)
- [13] A. F. Hebard, M. J. Rosseinsky, R. C. Haddon, D. W. Murphy, S. H. Glarum, T. T. M. Palstra, A. P. Ramirez, A. R. Kortan. “Superconductivity at 18 K in potassium-doped C₆₀”. *Nature*, **350** (1991), 600
- [14] J. Nagamatsu, N. Nakagawa, T. Muranaka, Y. Zenitani, J. Akimitsu. “Superconductivity at 39 K in magnesium diboride”. *Nature*, **419** (2001), 63
- [15] Y. Kamihara, T. Watanabe, M. Hirano, H. Hosono. “Iron-based layered superconductor La_{[0.1-x]F_x}FeAs (x =0.05-0.12) with T_c=26 K”. *J. Am. Chem. Soc.*, **130** (2008), 3296
- [16] F.-C. Hsu, J.-Y. Luo, K.-W. Yeh, T.-K. Chen, T.-W. Huang, P. M. Wu, Y.-C. Lee, Y.-L. Huang, Y.-Y. Chu, D.-C. Yan, M.-K. Wu. “Superconductivity in the PbO-type structure α-FeSe”. *Proc. Nat. Acad. Sciences*, **105** (2008), 14262
- [17] J.-F. Ge, Z.-L. Liu, C. Liu, C.-L. Gao, D. Qian, Q.-K. Xue, Y. Liu, J.-F. Jia. “Superconductivity above 100 K in single-layer FeSe films on doped SrTiO₃”. *Nat. Mat.*, **14** (2015), 285
- [18] A. P. Drozdov, M. I. Erements, I. A. Troyan, V. Ksenofontov, S. I. Shylin. “Conventional superconductivity at 203 kelvin at high pressures in the sulfur hydride system”. *Nature*, **525** (2015), 73
- [19] A. P. Drozdov, P. P. Kong, V. S. Minkov, S. P. Besedin, M. A. Kuzovnikov, S. Mozaffari, L. Balicas, F. F. Balakirev, D. E. Graf, V. B. Prakapenka, E. Greenberg, D. A. Knyazev, M. Tkacz, M. I. Erements. “Superconductivity at 250 K in lanthanum hydride under high pressures”. *Nature*, **569** (2019), 528
- [20] E. Snider, N. Dasenbrock-Gammon, R. McBride, X. Wang, N. Meyers, K. V. Lawler, E. Zurek, A. Salamat, R. P. Dias. “Synthesis of yttrium superhydride superconductor with a transition temperature up to 262 K by catalytic hydrogenation at high pressures”. *Phys. Rev. Lett.*, **126** (2021), 117003
- [21] E. Snider, N. Dasenbrock-Gammon, R. McBride, M. Debessai, H. Vindana, K. Vencatasamy, K. V. Lawler, A. Salamat, R. P. Dias. “Room-temperature superconductivity in a carbonaceous sulfur hydride”. *Nature*, **586** (2020), 373
- [22] N.W. Ashcroft. “Hydrogen dominant metallic alloys: high temperature superconductors?”. *Phys. Rev. Lett.*, **92** (2004), 187002
- [23] E. Zurek, T. Bi. “High-temperature superconductivity in alkaline and rare earth polyhydrides at high pressure: A theoretical perspective”. *J. Chem. Phys.*, **150** (2019), 050901
- [24] H. Liua, I. I. Naumova, R. Hoffmann, N. W. Ashcroft, R. J. Hemley. “Potential high-T_c superconducting lanthanum and yttrium hydrides at high pressure”. *Proc. Nat. Acad. Sciences*, **114** (2017), 6990
- [25] J. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Schrieffer. “Theory of superconductivity”. *Phys. Rev.*, **108** (1957), 1175
- [26] W. A. Little. “Superconductivity at room temperature”. *Scientific American*, **212** (1965), 45

- [27] V. L. Ginzburg. "The problem of high temperature superconductivity". *Contemp. Phys.*, **9** (1968), 355
- [28] M. L. Cohen. "Electron-phonon induced pairing and its limits for superconducting systems". *Physica E*, **43** (2011), 657
- [29] W. A. Little. "Possibility of synthesizing an organic superconductor". *Phys. Rev.*, **134** (1964), A1416
- [30] Y. Takada. "Plasmon mechanism of superconductivity in two- and three-dimensional electron systems". *J. Phys. Soc. Jap.*, **45** (1978), 786
- [31] D. Allender, J. Bray, J. Bardeen. "Model for an exciton mechanism of superconductivity". *Phys. Rev. B*, **7** (1973), 1020
- [32] A. Kavokin, P. Lagoudakis. "Exciton-mediated superconductivity". *Nat. Mat.*, **15** (2016), 599
- [33] H. Gutfreund, W. A. Little. "The prospects of excitonic superconductivity", contenido en: From high temperature superconductivity to microminiature refrigeration; Edited by B. Cabrera, H. Gutfreund, V. Kresin. 1996 Plenum Press, New York
- [34] J. Ruhman, P. A. Lee. "Superconductivity at very low density: The case of strontium titanate". *Phys. Rev. B*, **94** (2016) 224515
- [35] F. Marsiglio. "Eliashberg theory: A short review". *Ann. Phys.*, **417** (2020) 168102
- [36] W. L. McMillan and J. M. Rowell. "Lead phonon spectrum calculated from superconducting density of states". *Phys. Rev. Lett.*, **14** (1965), 108
- [37] Y. Tian, J. Toudert. "Nanobismuth: Fabrication, optical, and plasmonic properties-emerging applications". *J. Nanotech.*, **2018** (2018), 3250932
- [38] R. Tediosi, N. P. Armitage, E. Giannini, D. van der Marel. "Charge carrier interaction with a purely electronic collective mode: Plasmarens and the infrared response of elemental bismuth". *Phys. Rev. Lett.*, **99** (2007), 016406
- [39] C. A. Hoffman, J. R. Meyer, F. J. Bartoli, A. Di Venere, X. J. Yi, C. L. Hou, H. C. Wang, J. B. Ketterson, G. K. Wong. "Semimetal-to-semiconductor transition in bismuth thin films". *Phys. Rev. B*, **48** (1993), 11431
- [40] Z. Wu, J. Hao. "Electrical transport properties in group-V elemental ultrathin 2D layers". *npj 2D Mat. and Applications*, **4** (2020), 4
- [41] A. C. Gandhi, S. S. Gaikwad, J.-C. Peng, C.-W. Wang, T. S. Chan, S. Y. Wu. "Strong electron-phonon coupling in superconducting bismuth nanoparticles". *APL Mater.*, **7** (2019), 031111
- [42] S. Koley, M. S. Laad, A. Taraphder. "Dramatically enhanced superconductivity in elemental bismuth from excitonic fluctuation exchange". *Scient. Rep.*, **7** (2017), 10993
- [43] K. Behnia. "The fragility of distant Cooper pairs". *Science*, **355** (2017)26
- [44] R. González-Campuzano, J. M. Saniger, D. Mendoza. "Plasmonic resonances in hybrid systems of aluminum nanostructured arrays and few layer graphene within the UV-IR spectral range". *Nanotechnology*, **28** (2017), 465704
- [45] R. González-Campuzano, D. E. Martínez-Lara, D. Mendoza. "Lead plasmonics on texturized substrates: Pb metafilms". *Appl. Phys. Lett.*, **117** (2020), 031603
- [46] D. E. Martínez-Lara, R. González-Campuzano, J. L. Benítez, D. Mendoza. "Localized overheating on aluminum metafilms mediated by surface plasmons". *Rev. Mex. Fis.*, **67** (2021), 051001
- [47] C. Bautista-Flores, J. S. Arellano-Peraza, R. Y. Sato-Berrú, E. Camps, D. Mendoza. "Sulfur and few-layer graphene interaction under thermal treatments". arXiv:1607.08293, 2016. Una versión modificada está publicada en: *Chem. Phys. Lett.*, **665** (2016), 121
- [48] R. R. da Silva, J.H. Torres, Y. Kopelevich. "Indication of superconductivity at 35 K in graphite-sulfur composites". *Phys. Rev. Lett.*, **87** (2001), 147001.
- [49] Claudia Bautista Flores. "Transferencia de carga y modificación de las propiedades ópticas y electrónicas de grafeno y multicapas de grafeno". Tesis Doctoral, UNAM, 2016.
- [50] D. Mendoza. "The Cooper pair problem in an external periodic potential". *Rev. Mex. Fis.*, **46** (2000), 304

Blindajes balísticos compuestos inspirados en la naturaleza

Yessica Lizbeth Avila Avila, Ricardo Martínez Villa,
Gabriel Ángel Lara Rodríguez

Instituto de Investigaciones en Materiales,
Universidad Nacional Autónoma de México,
Cd. Universitaria, C.P. 04510 México, CDMX, México

lizbethiqm@gmail.com

Antecedentes

Desde la aparición del ser humano en la Tierra, los diversos tipos de materiales han jugado un papel crucial para el desarrollo y crecimiento. Los primeros materiales fueron empleados en la forma inicial en la que se presentaba la materia prima, por ejemplo, madera utilizada para la elaboración de viviendas, materiales cerámicos como piedras y rocas que eran afilados y utilizados como armas y que posteriormente también fueron dispuestos como materiales de construcción. En seguida llegaron los metales, el primer uso que se les dio a estos fue meramente comercial y de estatus; sin embargo, era también necesario tener elementos fuertes y resistentes que permitieran un mejor funcionamiento de sus utensilios y armas, para lo cual los materiales metálicos significaron un gran avance tanto tecnológico como cultural. En la actualidad los materiales metálicos son de gran importancia en la cotidianidad de nuestro día a día y se encuentran a nuestro alrededor, Fig 1.



Figura 1. Primeras herramientas primitivas [1]

Naturaleza como modelo a seguir

La naturaleza es un modelo admirable de un sistema ingenieril diseñado perfectamente para un correcto funcionamiento. Es por ello que muchos de los materiales actualmente empleados están inspirados en ella, tal es el caso de los materiales porosos. Los panales de abejas son un claro ejemplo de ello, Figura 2. Su maravillosa estructura es capaz de proporcionar un material con alta resistencia debido a las interconexiones formadas por los canales hexagonales huecos, haciendo de este un material poroso, que finalmente nos arroja como resultado un material liviano y tenaz. Por eso se copia dicha estructura para el desarrollo de materiales artificiales.

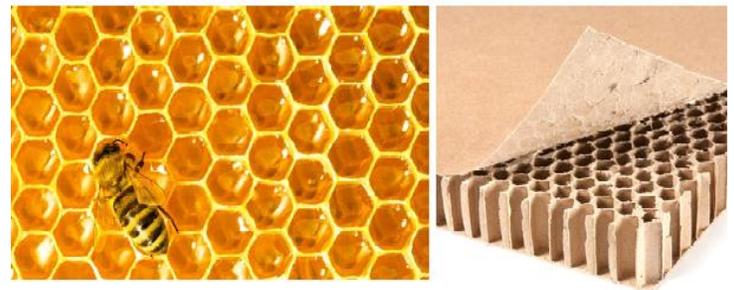


Figura 2. Estructuras panal de abejas,
a) Natural, b) Artificial, cartón de panal [2,3]

Los huesos del cuerpo humano son materiales porosos, por su gran similitud con una esponja son denominados "huesos esponjosos". Su morfología está diseñada para brindar resistencia, estructura y movilidad. El hueso del cráneo,

por ejemplo, es un hueso plano y su principal característica es que es más ancho y largo que grueso, su función es la de proteger tejidos blandos y la inserción de grandes masas musculares. La configuración esponjosa de los huesos del cráneo, Figura 3, protege principalmente al cerebro. Esta protección es crucial para funciones como la actividad cardíaca, respiración, regulación de temperatura, así como la conciencia. Su estructura porosa lo hace altamente resistente a impactos, absorbiendo la energía de estos a través de los poros que lo conforman. Como lo comprueba la naturaleza, los materiales porosos cuentan con grandes propiedades mecánicas. Por eso los científicos e ingenieros del mundo se han dado a la tarea de reproducir este tipo de estructuras y de enriquecer las ya existentes, logrando así crear un material metálico con esta morfología denominado “espuma metálica”.

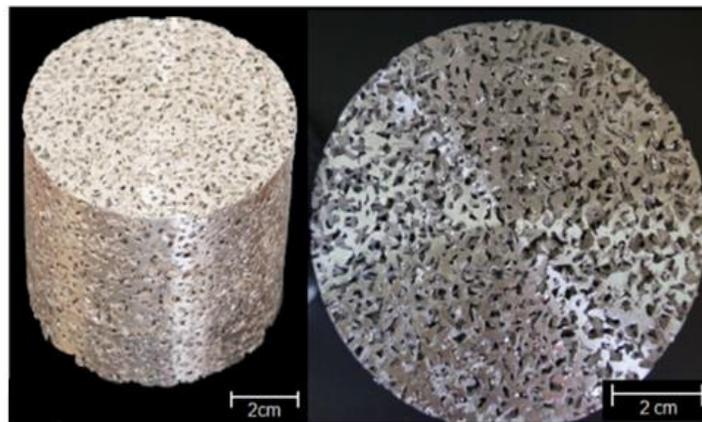


Figura 4. Imagen de la sección transversal de una espuma de magnesio de poro abierto [7]

¿Qué es una espuma metálica?

Las espumas metálicas son una clase especial de metales celulares, que generalmente se originan a través de un proceso metal-líquido. En estas, la forma de las celdas son redondas o poliédricas, separadas una de la otra mediante una capa delgada y cuya interconexión entre ellas puede ser de celda abierta, es decir, que tengan interconexión entre ellas o también pueden ser de celda cerrada, las que presentan celdas sin interconexión. Un arreglo celular puede ser bidimensional o tridimensional [6], un ejemplo de una espuma se muestra en la Figura 4. Recientemente, las espumas metálicas han tenido una gran importancia como materiales de ingeniería, esto es por las grandes propiedades que poseen: baja densidad (y por ende menos peso y ahorro en material), alta capacidad de absorción de energía al impacto, resistencia química, aislamiento acústico, alta permeabilidad, entre otras, Figura 4.

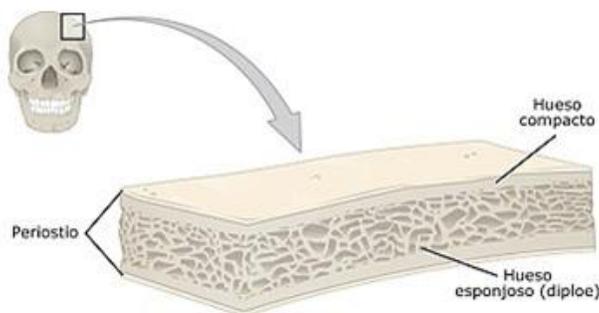
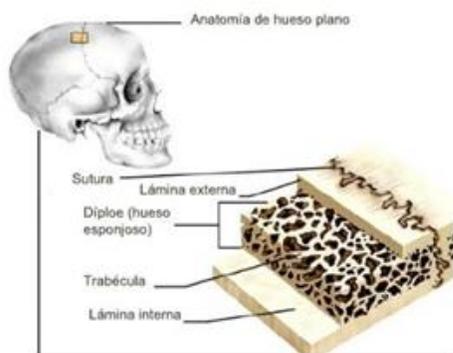


Figura 3. Huesos del cráneo conformado por estructura de hueso plano [4,5]

Principales aplicaciones

En la industria de la construcción, las espumas metálicas juegan un papel de suma importancia, aportando a elementos estructurales (vigas), propiedades tales como su alta resistencia a compresión y ahorro en recursos energéticos. Esto debido a que las espumas permiten el paso de la luz y el aire a través de ellas, así como una mejor estética en la construcción.

Para el área de la medicina, las espumas también representan un alto impacto. Se han desarrollado implantes porosos de diversos metales, ayudando así a conservar las características de la parte remplazada. Al introducir una espuma metálica en el cuerpo humano, como sustituto de hueso, las células comenzarán a desarrollarse a través de los poros de la estructura, consiguiendo la regeneración del tejido y posteriormente la completa recuperación. Una vez logrado el objetivo, el cuerpo humano es capaz de desechar el material metálico por sí solo.

Las espumas metálicas contribuyen a un gran avance tecnológico, sus peculiares características la consolidan como materiales clave para el desarrollo ingenieril. Como se observa, las aplicaciones de este tipo de materiales son sumamente variadas: desde intercambiadores de calor, filtrado para purificación, aislantes acústicos, hasta llegar a la industria aeroespacial y marítima.

Actualmente, las espumas metálicas están siendo comercializadas y son utilizadas para un gran número de aplicaciones, como en el caso de la industria automotriz, donde se requieren materiales resistentes, con bajo peso y que permitan al automóvil un ahorro de combustible y material. Se han fabricado estructuras tipo “sándwich” con láminas en sus extremos y espuma metálica en el centro, proporcionando mejores propiedades del material con una disminución significativa en el peso.

Comportamiento mecánico de las espumas metálicas

Las espumas metálicas tienen grandes propiedades mecánicas, de ello depende gran parte de su aplicación. Sin embargo, dichas propiedades dependen de diversas variables, tales como: tamaño, forma, distribución y porcentaje de poro. Actualmente se han hecho gran variedad de estudios para determinar una relación entre estas y comprender el comportamiento ante la aplicación de fuerzas externas.

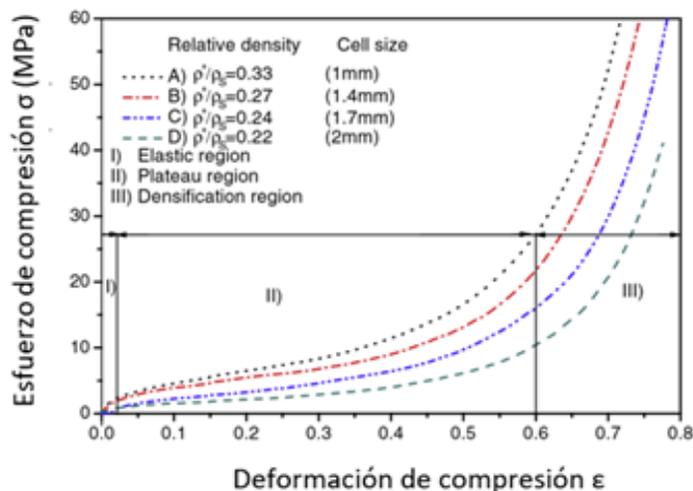


Figura 5. Curva de esfuerzo de compresión- deformación de compresión para una espuma de Mg con diferente tamaño de poro [8]

Un grupo de investigadores en el Instituto de Investigaciones en Materiales han enfocado estudios sobre técnicas de fabricación y caracterización de algunas espumas metálicas, entre otras, las espumas metálicas de magnesio con celda abierta (open-cell), en donde se observó una relación entre el aumento en las propiedades mecánicas del material conforme se disminuye el tamaño de poro [8].

En la Figura 5, se muestran 3 zonas distintas en donde se pueden observar dichas propiedades mecánicas. Primero se tiene a la **Zona I:** Es una región elástica lineal inicial con un esfuerzo de compresión muy bajo (aproximadamente de 0,024) sin la presencia de esfuerzo máximo. **Zona II:** Esta zona es una meseta extendida a un nivel de esfuerzo constante relativo donde el esfuerzo aumenta lentamente a medida que las celdas se deforman plásticamente, las curvas de compresión obtenidas en las regiones de meseta son suaves, sin la presencia de oscilaciones o discontinuidad. **Zona III:** Es una región del gráfico donde se muestra una densificación registrada en torno a la tensión de 0.5 - 0.6 %, donde las celdas colapsadas se compactan juntas [9].

En la Tabla I, se muestra una comparativa de las propiedades mecánicas de las espumas metálicas de Mg en función del tamaño y porcentaje de poro.

Tabla I. Propiedades mecánicas experimentales y capacidad de absorción de energía de las espumas de Mg de células abiertas [8]

Muestra	Esfuerzo de fluencia r_f (MPa)	Módulo de Young E (GPa)	Esfuerzo medio de la meseta r_{pl} (MPa)	Energía de absorción W (MJ/m ³)
(A) 1 mm	2.5	0.72	8.1	5.5
(B) 1.4 mm	1.9	0.69	7.5	4.6
(C) 1.7 mm	1.5	0.65	6.4	3.1
(D) 2 mm	1.2	0.61	5.2	1.9

Se puede observar que las propiedades mecánicas (esfuerzo de fluencia, módulo de Young, esfuerzo medio y la energía de absorción) tienen un valor más alto con un tamaño de poro pequeño; conforme el tamaño de poro aumenta, todas las propiedades disminuyen significativamente.

Otro factor que debe considerarse en este comportamiento es la densidad relativa, entendiendo por esto la comparación de densidades entre una sustancia y otra. A mayor densidad relativa el porcentaje de poros es menor y por ende la densidad de la espuma es mayor, lo que indica que tendrá una mejor resistencia mecánica, ya que los huecos entre la celda son menores, dicha tendencia se observa en la Tabla 2.

Tabla 2. Densidades experimentales y porcentaje de porosidad (%) de las espumas de mg de células abiertas [8]

Muestra	Densidad de las espumas, ρ (kg/m ³)	Densidad relativa $\rho/\rho_{Al_2O_3}$	Porcentaje de poros (%)
(A) 1 mm	572.5	0.33	67
(B) 1.4 mm	463.4	0.27	73
(C) 1.7 mm	414.6	0.24	76
(D) 2 mm	385.1	0.22	78

Posible aplicación de las espumas metálicas a los blindajes

Para aplicaciones en blindajes, los requerimientos de las protecciones que emplean las fuerzas de seguridad han evolucionado y mejorado día con día, conforme se desarrollan nuevos materiales que deben combinar una alta resistencia mecánica, protección y ergonomía para el uso del ser humano. Esto ha determinado un creciente interés por el estudio y diseño de protecciones inspiradas en la naturaleza.

Las soluciones óptimas usadas en los blindajes contra proyectiles de alta velocidad varían desde el uso de aceros de alta resistencia y polímeros. Adicionalmente a estos materiales, la utilización de espumas metálicas compuestas tipo sándwich podrían mejorar la eficiencia en la absorción de energía ante impactos al portador, aminorando las lesiones por contusión.

Propiedades de los materiales empleados para blindaje

A la fecha no existe un chaleco flexible compuesto por una sola capa de tejido que, por sí solo, pueda proteger al portador de todo tipo de proyectil. Sin embargo, con cada capa del chaleco se puede brindar una determinada protección. A esa protección por capa se le ha denominado "nivel de protección", distinguiéndose seis diferentes niveles de acuerdo con la protección que ofrecen. Por ejemplo, el nivel I, es el nivel mínimo de protección con un peso de entre 2.6 kg hasta los 6.2 kg, protegiendo contra proyectiles de pistola calibre .22" y .38" de una velocidad de impacto de 320 m/s y 312 m/s, respectivamente. El nivel IV, con un peso de aproximadamente 10.8 kg brinda protección para proyectiles de rifles que tienen calibre .30-06" con una velocidad de impacto de 868 m/s, [9] provee el más alto nivel de protección; sin embargo, requiere de una placa de metal o cerámico entre las capas del tejido para

aumentar su resistencia al impacto, esta placa además de incrementar el peso del chaleco también disminuye la movilidad del portador, una de las grandes desventajas es que la placa se debe cambiar cada vez que recibe un impacto.

El desarrollo de nuevos materiales hace que, poco a poco, los chalecos antibalas vayan reduciendo su peso y grosor. Al aumentar la capacidad de protección y adaptándose a las necesidades de los portadores, cada vez se pretende que las prendas sean más ligeras y confortables. Esto nos lleva, también, a un cambio en el modelo de protección, ya que pasamos de un material rígido con poca deformación a un material cada vez más flexible y evolucionado, cuya finalidad es distribuir la energía absorbida en el impacto sobre toda la superficie del chaleco, deformar o fragmentar el proyectil y, además, "amoldarse" al cuerpo del portador. Analizando las necesidades se emplean fibras para los chalecos de protección balística como el Dyneema® [10], el Spectra® [11], el Twaron® [12], el Zylon® [13] y el Kevlar® [14], estos materiales poseen las propiedades enlistadas en la Tabla 3; sin embargo, para una mayor protección se precisa incorporar placas adicionales, por lo general se emplean de tipo cerámico. Actualmente, los nuevos materiales compuestos han resultado una excelente opción, tal es el caso de los nanocompuestos basados en grafeno [15].

Tabla 3. Propiedades de los diferentes tipos de fibras empleadas para la fabricación de chalecos antibalas y su comparación con fibras textiles de uso común [16]

Fibra	Tenacidad (g/d)	Módulo de Young (g/d)	Elongación %	Densidad (g/cm ³)
Dyneema	30	1470	1.5	1.59
Spectra	35	2000	3.1	0.97
Twaron	24	600	3	1.4
Zylon	23.5	587	3.5	1.54
Kevlar	26	850	3.5	1.43

Con el objetivo de analizar los nuevos materiales basados en el grafeno para su aplicación en sistemas de protección balística, el Departamento de Ingeniería Química y Ambiental de la Universidad Politécnica de Cartagena llevó a cabo un estudio de la influencia de la adición de grafeno a un material compuesto, analizando sus propiedades mecánicas de impacto (energía absorbida) y propiedades balísticas. Se presentan los resultados obtenidos utilizando una serie de nanocompuestos preparados a base de una resina de poliéster reforzada con fibra de vidrio y adicionada con grafeno.

Comportamiento de un chaleco antibalas reforzado con nanocompuestos poliméricos

En la Figura 6 se muestra que la adición del grafeno aumenta la energía absorbida del impacto, a partir del 0.25 % de grafeno, con una energía absorbida de 0.213 MJ/m² [15]. Sin embargo, después de este porcentaje de adición se tiene un estancamiento, es decir, no hay un aumento en cuanto a la energía absorbida.

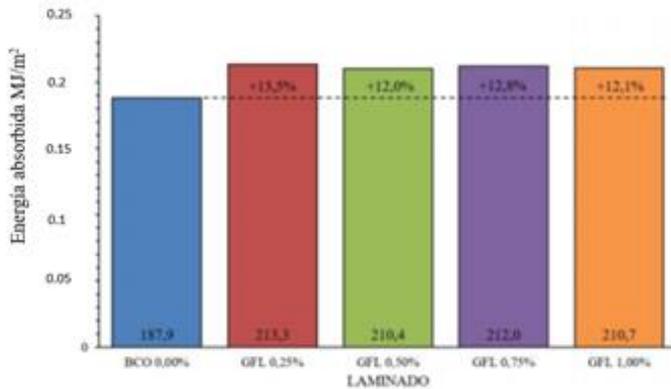


Figura 6. Representación gráfica de los datos experimentales obtenidos para la resistencia en impacto de Charpy según el grado de dopaje (% de grafeno) y con sus correspondientes valores numéricos en la base de cada columna (MJ/m²) [15]

En la Figura 7 se muestran los datos obtenidos experimentalmente de la curva de tracción. Los resultados muestran que la adición de grafeno produce, en la mayoría de los casos, una mejora en la resistencia mecánica (tensión de rotura y del módulo de Young en tracción) respecto al laminado sin adición de grafeno. Estas mejoras presentan un máximo en ambas propiedades mecánicas para el porcentaje de adición del 0.25 %, con valores relativos del 10.9 % (394.4 MPa que equivale a 0.394 GPa) y del 12.7 % (37.7 MPa que equivale a 0.0377 GPa), respectivamente [15].

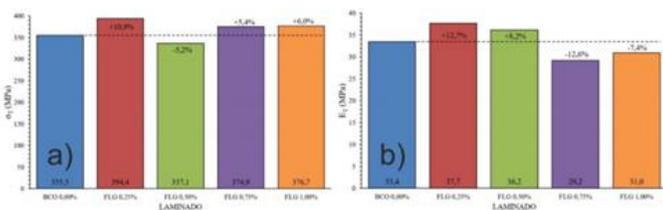


Figura 7. Representación gráfica de los datos experimentales obtenidos para la tensión de rotura (a) y el módulo de Young (b) a tracción según el grado de dopaje (% de grafeno) [15]

Cuando un proyectil golpea la superficie de un chaleco reforzado con nanocompuestos su punta es distorsionada, tal como se observa en la Figura 8. [16]

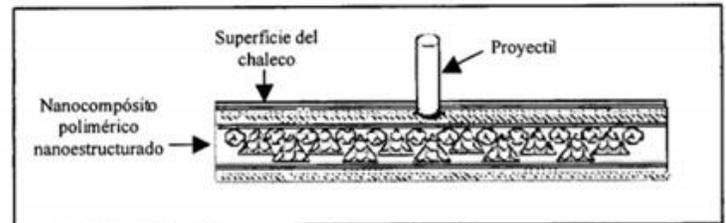


Figura 8. Comportamiento de un proyectil al impactar en un chaleco reforzado con nanocompuestos [16]

Por otra parte, debido a que el proyectil no puede penetrar el nanocompuesto detiene su movimiento. No obstante, la inercia de este provocará la fractura y deformación total del resto del proyectil, evitando de esta manera que pueda penetrar en el chaleco, tal como se muestra en la Figura 9. [17]

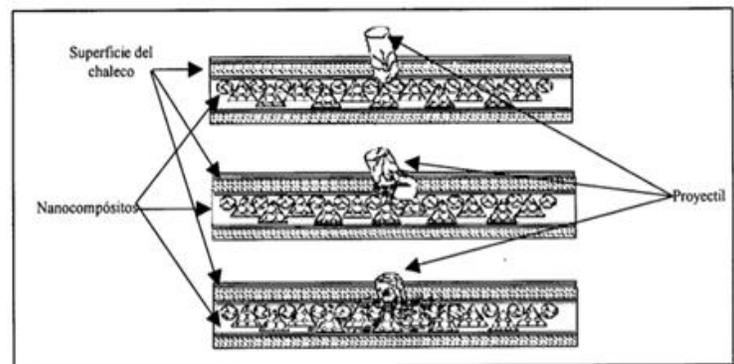


Figura 9. Deformación progresiva del proyectil al intentar penetrar en un chaleco reforzado con nanocompuestos [16]

Como se puede observar, la incorporación de los nanocompuestos poliméricos en la estructura del chaleco antibalas mejora su resistencia al impacto, teniendo la ventaja de no incrementar demasiado su peso [18].

Comparación de las propiedades mecánicas de las espumas metálicas vs. nanocompuestos a base de grafeno para la fabricación de chalecos antibalas

Como se mencionó anteriormente, las espumas metálicas forman parte de los materiales que se pueden emplear como protección balística, debido a sus propiedades como módulo de Young y resistencia al impacto (energía de absorción). Los valores obtenidos de las espumas metálicas de Mg son comparables con los datos obtenidos de los nanocompuestos a base de grafeno (ver Tabla 1 y Figura 7). En la energía de absorción, las espumas metálicas con un tamaño de poro de 1 mm y un porcentaje de poro del 67 % absorben mayor cantidad de energía [8], mientras que los nanocompuestos absorben energías menores, con un porcentaje de grafeno del 0.25 % [15]. En cuanto al módulo de Young, las espumas metálicas de Mg se encuentran en un orden de magnitud de 0.72GPa [7], mientras que los compuestos de grafeno se encuentran en el orden de 0.394 GPa [15], el módulo elástico de las espumas metálicas es casi el doble de los nanocompuestos de grafeno.

Las propiedades mecánicas ya mencionadas de las espumas metálicas pudieran ser de gran interés para esta aplicación, ya que son capaces de absorber, disipar y amortiguar la energía del impacto. Actualmente, los blindajes empleados provocan lesiones específicas, generalmente de tipo contuso. La energía del impacto es transmitida del proyectil al cuerpo del portador y se distribuye como ondas de presión o choque, dañando tejidos, estructuras óseas y órganos, producidas por la deformación del chaleco antibalas. Este tipo de lesiones, poco descritas en la literatura científica en español, son conocidas por su acrónimo en inglés como lesiones tipo BAPT (*Behind Armor Blunt Trauma*) [19].

Las espumas metálicas por sí solas no podrían realizar este trabajo, ya que se tratan de materiales porosos y el proyectil podría atravesarlas con facilidad al impactar las interconexiones. Por tal motivo es necesario fabricar un material de capas empleando las espumas metálicas de Mg compuestas tipo sándwich, ya que al ser un material compuesto (placa-espuma metálica-placa), posee grandes características, incluso rebasando las propiedades mecánicas que por sí solas las espumas metálicas de Mg (en este caso), poseen. Se muestra en la Figura 10 un esquema de cómo estaría conformada esta espuma metálica tipo sándwich.

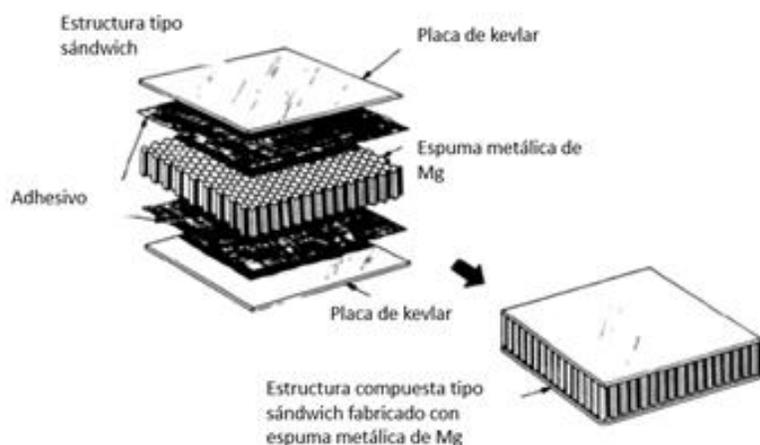


Figura 10. Estructura tipo sándwich empleando una espuma metálica [22]

Este material compuesto tipo sándwich formaría parte de las capas que conforman el chaleco antibalas, tal como se muestra en la Figura 11, siendo una alternativa interesante para contribuir y aminorar el problema que se traduce en daños físicos al portador después de un impacto.

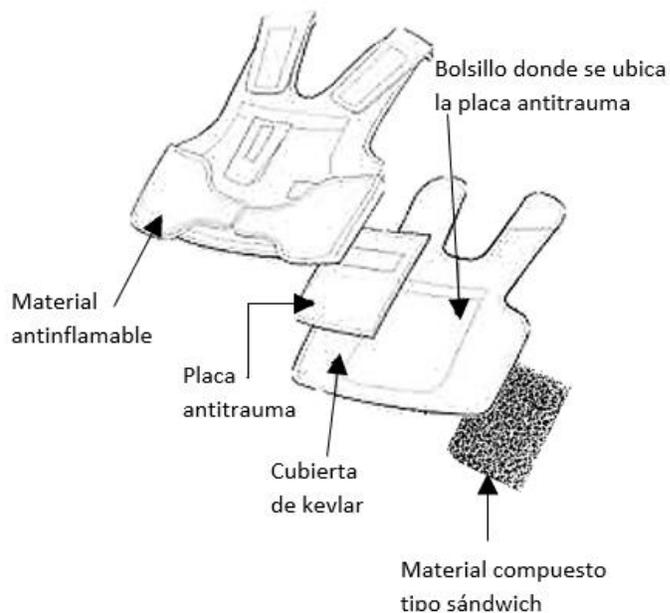


Figura 11. Posible aplicación de las espumas metálicas en un chaleco antibalas [propia]

Conclusión

El desarrollo de nuevos materiales y la combinación de estos involucra la atención multidisciplinaria de los conocimientos de ingenieros mecánicos, ingenieros químicos, físicos, entre otros, enfocados en la ciencia e ingeniería de materiales, para asemejar estructuras que existen en la naturaleza, tan antiguas como la existencia de vida en la Tierra.

En el Instituto de Investigaciones en Materiales, actualmente, se realizan estudios para el desarrollo de espumas metálicas compuestas de Mg, Al y sus aleaciones, enfocadas a diferentes aplicaciones en la ingeniería. Un caso particular es el de contribuir en la mejora de los blindajes balísticos, con el objetivo de beneficiar y garantizar la integridad del portador. Los portadores son principalmente policías y militares que se encargan de resguardar la seguridad de la población, y requieren de un equipo de protección adecuado que no ponga en riesgo su vida. Para el Instituto es de gran importancia realizar aportaciones científicas que beneficien a diferentes sectores de la sociedad.

Referencias

- [1] <https://mundoantiguo.net/herramientas-la-prehistoria/>
- [2] <https://miel.kim/panal/>
- [3] <https://cartonlab.com/blog/tipos-de-carton-aplicaciones/>
- [4] <https://materiascolares.com/el-esqueleto-humano-los-huesos-del-cuerpo-humano/>
- [5] <https://es.wikipedia.org/wiki/Hueso>
- [6] M. Ashby, L. Gibson. Cellular solids structure and properties. Cambridge solid state science series, 2nd edition. Inglaterra, 1999
- [7] G.A. Lara-Rodríguez, I.A. Figueroa, M.A. Suarez, O. Novelo-Peralta, I. Alfonso, R. Goodall, "A replication-casting device for manufacturing open-cell Mg foams". Journal of Materials Processing Technology. *Volume 243*, May 2017, Pages 16-22
- [8] JO Osorio-Hernández, MA Suarez, R Goodall, GA Lara-Rodríguez, Alfonso a, I.A. Figueroa, "[Manufacturing of open-cell Mg foams by replication process and mechanical properties](#)", Materials & Design 64, 2014, 136-14.
- [9] Luis Javier Egido Pueyo, "Lesiones contusas ante impactos no penetrantes sobre la protección balística", Universidad de Salamanca, Facultad de enfermería, Trabajo Fin de Grado de revisión bibliográfica narrativa, enero 2020.
- [10] Dyneema® UHMWPE fiber. <http://www.dsm.com/products/dyneema/enGB/producttechnologies/iber.html>. DSM. 2017.
- [11] Spectra®. UHMWPE fiber. <http://www.honeywell-advancedfibersandcomposites.com/products/fibers/>. Honeywell. 2017.
- [12] Twaron®. Aramid fiber. <http://www.tejinaramid.com/aramids/twaron/>. Teijin. 2017.
- [13] Zylon®. Pbo fiber. <http://www.toyobo-global.com/seihin/kc/pbo/>. Tojobo. 2017.
- [14] www.dupont.com/kevlar/whatiskevlar.html.
- [15] Gago, Israel; del Río, Manuel; Carretero, Julián; Ibarra, Isidro; León, Gerardo; Miguel, Beatriz "Nanocompuestos basados en el grafeno para chalecos antibalas: límite balístico y propiedades en tensión e impacto" 2017. Departamento de Ingeniería Química y Ambiental, Universidad Politécnica de Cartagena. Paseo de Alfonso XIII, n° 52, 30203. Cartagena. España.
- [16] Ydelio Miguel Valencia Ortega, "Chalecos antibalas. constitución y desempeño antibalístico", centro de investigación de química aplicada, trabajo para obtener el grado de especialización en ingeniería de proceso de polimerización, Saltillo Coahuila Mex., agosto 2006, p22.
- [17] Howard L. Thomas et al "An Overview of Industrial Fabric Ballistic Protection for Police and Military Personnel", Auburn University, 2001, pp. 1-35.
- [18] Kal R. Sharma "Processing Methodology for Transparent Armor Nanocomposites", ANTEC, 2000, pp. 1-4.
- [19] Cannon L. Behind armour blunt trauma emerging problem. Journal of the royal army medical corps. 2001;147(1):87-96.
- [20] U.S. Department of Justice, "Selection and Application Guide to Personal Body Armor", National Institute of Justice, 2001, pp. 1-42.
- [21] Álvaro García Rincón, "Impacto sobre tejidos de alto rendimiento en modelos híbridos", 2019, Trabajo de grado Universidad Carlos III de Madrid.
- [22] <http://bibing.us.es/proyectos/abreproy/60307/fichero/I-PFC.pdf>

Nanocapa SakCu[®]: Diseño conceptual y desarrollo

J. M. Bello-Lopez¹, P. Silva-Bermudez², G. Prado³,
C. Ramos-Vilchis⁴, A. Martínez⁴, R. de la Torre⁴,
G. Ibáñez-Cervantes¹, M. Alethia Cureño-Díaz¹,
A. Almaguer-Flores⁵, S. E. Rodil⁴

¹Dirección de Investigación. Hospital Juárez de México
Av. Instituto Politécnico Nacional 5160, Magdalena de las
Salinas. Gustavo A. Madero, 07760, CDMX, México

²Unidad de Ingeniería de Tejidos, Terapia Celular y Medicina
Regenerativa; Instituto Nacional de Rehabilitación Luis
Guillermo Ibarra-Ibarra. Av. México-Xochimilco No. 289
Col. Arenal de Guadalupe C.P. 14389, CDMX, México

³Laboratorio de Biotecnología; Instituto Nacional de
Rehabilitación Luis Guillermo Ibarra-Ibarra
Av. México-Xochimilco No. 289 Col. Arenal de Guadalupe
C.P. 14389, CDMX, México

⁴Instituto de Investigaciones en Materiales,
Universidad Nacional Autónoma de México.
Circuito Exterior. Ciudad Universitaria, 04510. CDMX

⁵Laboratorio de Biointerfases, Facultad de Odontología,
División de Estudios de Posgrado e Investigación,
Universidad Nacional Autónoma de México, 04510, CDMX

Sandra E. Rodil Posada : srodil@unam.mx

Resumen

El presente artículo describe paso a paso el desarrollo conceptual y experimental de la nanocapa de plata-cobre registrada como SakCu[®] para su uso como material filtrante con propiedades antimicrobiales en cubrebocas reutilizables. Se demuestra que puede inactivar el 80 % de los virus SARS-CoV-2 a las 4 horas de contacto, así como a un conjunto de bacterias multidrogoresistentes de origen hospitalario. La nanocapa no presenta citotoxicidad alguna hacia células mesenquimales, fibroblastos o queratinocitos humanos.

Introducción

La emergencia sanitaria del SARS-CoV-2 ha puesto en evidencia la necesidad del uso de equipos de protección personalizados como el mejor método de prevención, para aquellas personas que no puedan mantenerse bajo aislamiento total. También representa un método para permitir el retorno a actividades de forma progresiva, tomando las adecuadas medidas de protección.

El uso de cubrebocas para la población en general, así como los sistemas más avanzados de protección (mascarillas o respiradores) para el personal de salud, serán una necesidad a lo largo de los siguientes años [1, 2]. La evidencia científica acumulada durante estos meses de lucha contra la pandemia causada por el virus SARS-CoV-2, así como los antecedentes respecto a las células humanas atacadas por los coronavirus (SARS-CoV y MERS-CoV), indican que todos causan infecciones respiratorias [3, 4]. La nariz y boca son las principales vías de entrada, y la severidad de la enfermedad depende, por un lado, de la carga viral [5] y por otro de la capacidad del virus para infectar células del sistema superior o inferior respiratorio. En el caso de COVID-19, se ha visto que el virus tiene la capacidad de infectar a nivel de la garganta (a diferencia de MERS-CoV y SARS-CoV-1, que no lo logran) y de los pulmones. En el primer caso, los síntomas pueden ser menores y la tasa de mortalidad es reducida (~1 %), pero si la carga viral es alta (por ejemplo, por partículas-gotas expedidas por otra persona infectada a corta distancia) y llegan hasta los pulmones, la infección es más severa y la tasa de mortalidad se multiplica por diez [6, 7]. Estas dos condiciones están determinadas a su vez por los modos de transmisión: gotas,

aerosoles, contacto directo con gotas o a través de fómites (superficies contaminadas) [8, 9]. Para los últimos, se sugiere el lavado continuo de manos y la limpieza de superficies, ya que el virus puede permanecer activo, incluso durante días [9-11]. Las gotas y aerosoles pueden evitarse con el uso adecuado de sistemas de protección personal, que llamaremos en general mascarillas.

Actualmente, estos sistemas de protección funcionan basados en el principio físico de filtración de partículas y bacterias. Dependiendo del tipo y de la calidad del ajuste a la cara, así como el tipo y tamaño de partícula filtrada, se define el nivel de protección, tal como se describe en las Tablas 1 y 2. La Tabla 1 indica las propiedades que deben cumplir en cuanto a filtrado, presión diferencial, resistencia a las salpicaduras, flamabilidad, etc. En la Tabla 2 se desglosan las diferentes normas que aplican en diversas regiones del mundo.

Puede verse en la Tabla 1 que la “respirabilidad” (medida en términos de la presión diferencial) se ve comprometida respecto a la eficiencia al filtrado. Mientras mayor sea dicho diferencial, más difícil será respirar. Es decir, a mayor nivel del filtrado, la respirabilidad se reduce de forma significativa. La respirabilidad impacta en que las personas utilicen la mascarilla de forma adecuada y constante.

Las recomendaciones durante la emergencia de COVID-19 fueron que el personal médico expuesto a procedimientos que generan mayor cantidad de aerosoles (broncoscopias, nebulizaciones, procedimientos de entubación o succionado), requieren el máximo nivel de protección (respiradores del Tipo IIR, N95 o más). Mientras que al resto del personal hospitalario se les recomendó utilizar mascarillas quirúrgicas, las cuales usadas correctamente protegen de la transmisión de virus proveniente de pacientes sintomáticos en hospitales o en domicilio, e incluso pueden proteger a personas vulnerables cuando son expuestas a condiciones de riesgo. Sin embargo, observando la gran cantidad de personal médico que se ha visto afectado en esta pandemia, es importante reevaluar la eficiencia de las mascarillas quirúrgicas. En la Tabla 2 puede observarse que los requerimientos para mascarillas quirúrgicas son muy diferentes según el país. Mientras que en EUA se exige un filtrado eficiente (>95 %) a partículas de $0.1 \mu\text{m}$; en China solo se exige un 30 % de eficiencia, y para Europa el filtrado a este tamaño no es evaluado. Estas diferencias podrían explicar las fallas en protección observadas en nuestro país, ya que $0.1 \mu\text{m}$ cae dentro del intervalo de aerosoles. Sobre todo, considerando que después de mucho debate, hoy en día se ha aceptado que el SARS-CoV-2 puede transmitirse vía aérea en ambientes cerrados [12-14].

Tabla 1. Clasificación general de las diferentes mascarillas

	Tipo I	Tipo II	Tipo IIR
Uso	Uso para pacientes o público general para evitar la diseminación de infecciones en caso de epidemias o pandemias	Mascarilla para uso médico- Mascarillas quirúrgicas	Respiradores
Nombre	Cubrebocas	Mascarilla quirúrgica	Tipo N95
Funcionalidad	Previene contaminación por gotas	Previene contaminación por gotas	Previene contaminación por aerosoles
Eficiencia de filtrado bacteriano (%)	≥ 95	≥ 98	≥ 98
Presión diferencial (Pa/cm^2 o $\text{mmH}_2\text{O}/\text{cm}^2$)	< 29.4 o < 5	< 29.4 o < 6	< 49.0
Resistencia a las salpicaduras (kPa)	No requerida	No requerida	≥ 16.0
Limpieza microbiana (UFC/g)	≤ 30	≤ 30	≤ 30
Flamabilidad		Clase I (≥ 3.5 segundos)	
Biocompatibilidad		ISO 10993	

Los aerosoles que contienen el virus pueden viajar hasta 30 metros [15], así que, aún sin estar en contacto cercano, el personal que no cuente con la protección adecuada es susceptible de infectarse.

Una duda aún mayor es cómo proteger a la población en general, que en principio no está directamente expuesta a pacientes o portadores del virus, pero podría estar expuesta a través de gotas y aerosoles producidos por portadores asintomáticos al hablar, toser o estornudar [16, 17]. El distanciamiento social asegura una protección contra las gotas de mayor tamaño, pero no del aerosol, el cual puede viajar a distancias mayores [9, 15]. La disponibilidad de mascarillas quirúrgicas y respiradores no cubre a toda la sociedad, y aunque lo hiciera, la cantidad de material desechado representaría otro problema a solucionar. Otro punto importante para considerar es que las mascarillas de alta eficiencia, una vez utilizadas por el tiempo recomendado para cada tipo (de 4 a 8 horas), deben ser desechadas. Los microorganismos filtrados permanecen en sus superficies y pueden proliferar, siendo también una fuente de contaminación que debe desecharse de forma controlada. Esto genera aumento en los costos y en la cantidad (volumen) de material de desecho biológico generado.

Una alternativa, que es la clave de la propuesta presentada a la Secretaría Educación, Ciencia y Tecnología e Innovación (SECTEI) de la Ciudad de México, es el desarrollo de materiales funcionales.

Estos no solo funcionan como filtros físicos, sino que proveen propiedades antimicrobianas (la capacidad de inactivar virus e inhibir el crecimiento de bacterias y hongos).

Diseño Conceptual

Los materiales base para la producción de mascarillas son textiles sintéticos, no-tejidos, termofijados, que impiden el paso de partículas por diferentes mecanismos electrostáticos o de difusión limitada. Algunas mascarillas contienen capas que tienen propiedades de hidrofiliidad que las mantienen secas y pueden también contener una capa o filtro de carbón activado. Al inicio de la pandemia, una de las limitantes para la producción de mascarillas fue la disponibilidad de estos textiles no-tejidos a nivel mundial. Estos materiales *per se* no tienen propiedades antimicrobianas con la funcionalidad de reducir el porcentaje de microorganismos viables (ya sean virus, bacterias, hongos). Desde hace varios años, junto al desarrollo de la nanotecnología, se han perfeccionado textiles naturales o sintéticos con propiedades funcionales, tales como hidrofílicos, antiestáticos e incluso antibacterianos [18-23]. También materiales de curación, apósitos con propiedades antibacteriales y/o de regeneración tisular [24-26]. Los nanomateriales son atractivos porque permiten reducir las concentraciones terapéuticas requeridas para presentar actividad inhibitoria. Para esto también se proponen diferentes métodos de impregnar o incluir los nanomateriales dentro de los textiles o polímeros.

Tabla 2. Eficiencia de Filtrado de las diferentes mascarillas

Tipo de mascarilla	Norma	Eficiencia de filtrado		
Uso común: cubrebocas	China: YY/T0969	3.0 µm: ≥ 95 % 0.1 µm: X		
	Mascarilla quirúrgica	China: YY0469	3.0 µm: ≥ 95 % 0.1 µm: ≥ 30 %	
Respiradores	EUA: ASTM F2100	Nivel I	Nivel 2	Nivel 3
		3.0 µm: ≥ 95 % 0.1 µm: ≥ 95 %	3.0 µm: ≥ 98 % 0.1 µm: ≥ 98 %	3.0 µm: ≥ 98 % 0.1 µm: ≥ 95 %
	Europa: EN14683	Tipo I	Tipo II	Tipo III
		3.0 µm: ≥ 95 % 0.1 µm: X	3.0 µm: ≥ 98 % 0.1 µm: X	3.0 µm: ≥ 98 % 0.1 µm: X
	EUA: NIOSH 42CFR84 China: GB2626	N95 / KN95	N99 / KN99	NI100 / KNI100
		0.3 µm: ≥95 %	0.3 µm: ≥99 %	0.3 µm: ≥99.97 %
	Europa: EN 149: 2001	FFP1	FFP2	FFP3
		0.3 µm: ≥80 %	0.3 µm: ≥94 %	0.3 µm: ≥99 %
		N (NaCl)	R (Parafina)	P (parafina)
	México NOM116	0.3 µm: ≥ 90, 95, 99.97 %	0.3 µm: ≥ 90, 95, 99.97 %	0.3 µm: ≥ 90, 95, 99.97 %
3.0 µm	Eficiencia de filtrado bacteriano			
0.1 µm	Eficiencia de filtrado de partícula			
0.3 µm	Partículas de mayor penetración			
X	No es requerido			

Existen muchos métodos basados en el uso de sales metálicas o métodos basados en el uso de soluciones químicas para proveer a superficies y textiles de propiedades antimicrobianas. Sin embargo, el uso de diferentes compuestos químicos para producir las superficies de plata, cobre u otro metal antimicrobiano tienen el riesgo de contener subproductos de las reacciones (que pueden ser dañinos a la salud). Incluso, el contacto mismo con el ambiente en el cual se apliquen puede formar dichos subproductos tóxicos. Para el desarrollo de Equipos de Protección Personal (EPP) médicos hay una enorme necesidad de encontrar métodos no químicos para proveer propiedades antimicrobianas a los textiles no-tejidos (que son los más utilizados en EPP).

Una alternativa es producir capas antimicrobianas en la superficie de los textiles, para lo cual el uso de plasmas es relevante. Este ha demostrado buenos resultados y reduce el uso de sustancias químicas de fuerte impacto ambiental [18, 27]. El depósito de capas utilizando métodos físicos tales como la evaporación térmica, evaporación catódica (MS), ablación láser y arco catódico se agrupan como métodos PVD (*Physical Vapor Deposition*). Los métodos PVD involucran el uso de plasmas para producir especies atómicas que son transportadas en el vacío hacia el sustrato, o material a recubrir, sin involucrar ninguna reacción química.

La patente USOO8066854B2 (2011) describe el proceso de arco catódico como un proceso efectivo para depositar plata (Ag) y otros metales antimicrobianos, o combinaciones de estos, para formar recubrimientos antimicrobianos con buena adherencia al sustrato y cuya liberación de iones se mantiene por periodos prolongados de tiempo. Mientras que la patente USOO5837275A describe el uso de evaporación catódica (*magnetron sputtering*) para producir recubrimientos metálicos desordenados que favorecen la continua liberación de iones metálicos y, por lo tanto, de la actividad antimicrobiana. La patente US 2005/0003019-A1 describe el uso de plasmas ionizados reactivos para producir recubrimientos de plata y óxidos de plata (además de otros metales) sobre sustratos diversos, formando una superficie con potencial propiedad antimicrobiana. Sin embargo, estos recubrimientos no han sido aplicados y evaluados en textiles sintéticos o polipropileno.

Antecedentes en la literatura científica y patentes al respecto nos indican que la funcionalización de textiles para cubrebocas ya ha sido evaluada con anterioridad, en particular durante la crisis sanitaria del virus H1N1, en 2009. Entre estas propuestas podemos mencionar: la adición de microcápsulas de sustancias antibacteriales [28]; partículas basadas en yoduros metálicos (Pt, Pd, Ag, Cu) [29]; compuestos cuaternarios [30]; nitrato de

plata y óxido de titanio aplicada a la capa externa de mascarillas quirúrgicas [31], y el equipo de BioMask™ - Medline, que tiene una capa externa hidrofílica y una capa interna con iones de Cu^+ y Zn^+ (con demostrada actividad antiviral). Actualmente, hay algunos modelos en el mercado (GAMMEX N95 Respirator and Surgical Mask, desarrollado por Ansell Healthcare; Agkilbact, mascarillas con tratamientos Silvadur® o HeiQViroblock. Agion®-Hannes) que indican ser eficientes incluso contra el SARS-CoV-2.

Antecedentes de las propiedades antimicrobianas de materiales basados en plata, cobre o mezclas

Después de varios años de estudio de las propiedades antibacteriales de diferentes capas y nanopartículas [25, 26, 32-34], en el 2019 iniciamos un trabajo para evaluar las propiedades antimicrobianas (bacterias y virus) de nanocapas de Ag-Cu depositadas por métodos asistidos por plasma sobre polímeros utilizados para la producción de mascarillas.

La actividad antibacterial de Cu y Ag ha sido ampliamente estudiada, y se puede encontrar descrita en diferentes publicaciones [26, 32-36]. En la Tabla 3 se presentan los reportes que demuestran que dichos metales tienen un interesante potencial como materiales antivirales, razón por la cual han sido seleccionados en esta investigación. En el caso antibacterial, se ha demostrado que la combinación Ag-Cu puede hacer más efectiva la respuesta, sobre todo cubriendo un rango más amplio de bacterias susceptibles, de aquí la propuesta de estudiar recubrimientos compuestos [37-39].

Muchos de los estudios presentados involucran el estudio de Ag o Cu como nanomateriales, esto debido a que la mayor área superficial de los nanomateriales incrementa su actividad biológica, permitiendo reducir la concentración sin exceder los límites de citotoxicidad.

Como ya se mencionó anteriormente, el trabajar con nanomateriales es complejo debido a las dificultades para contenerlos. Una opción es el manejo de capas de espesor nanométricas, que proveen una alta área superficial, pero no son partículas libres. En la Tabla 3 se presentan ejemplos de que las propiedades antibacteriales de capas basadas en Ag, Cu o Ag-Cu mantienen su efectividad.

Tabla 3. Antecedentes del uso de Plata y Cobre como materiales con propiedades antivirales**Actividad antiviral**

	Nanomateriales	Virus	Resultados
[40]	Ag (3-10 nm), Fe (4-70 nm), ZnO (7-35 nm)	CHIKV-alfavirus	Se obtuvieron las concentraciones para inhibir el 50 % del virus: Ag 11.73 µg/mL, Fe 15.52 µg/mL y ZnO 40.67 µg/mL. Así como los límites de citotoxicidad (> 0.5mg/mL).
[41]	Ag NPs-300 nm Ag nanoalambres 60 & 400 nm Ag coloides-30 nm-PVC coated	TGEV-Coronavirus	Reducción de la infectividad en un 80 % con 12.5 µg/mL para Ag-nanopartículas (límite de citotoxicidad de 25 µg/mL) y Ag nanoalambres (límite de citotoxicidad > 50 µg/mL).
[42]	Ag NPS en superficie	RSV-virus	Se observó un 44 % de reducción de infectividad.
[43]	Ag NPS	VIH-I	Efectivo para inhibir el virus.
[44]	Ag NPS 10 nm	HINI	Efectivo para inhibir el virus.
[45]	Ag NPS 10 nm	Monkeypox	Inhibición dependiente del tamaño, menor tamaño, mayor inhibición.
[46]	Ag Nps	HBV	Efectivo para inhibir el virus.
[47]	Ag NPS	HSV-I, HAV-10 y virus CoxB4	Efectivo para inhibir el virus.
[48]	AgNPs 5-15 nm	Influenza A	Efectivo para inhibir el virus.
[49]	Ag NPs en superficie	VIH	0.15 mg/mL requeridos para inhibir el virus.
[50]	Ag/chitosan NPs	HINI	La infectividad se reduce con la concentración.
[51]	Graphene/Ag NPs	Coronavirus felino, virus de la bursitis infecciosa	Inhibición del 25 - 23 %.
[52]	Revisión	HINI	Revisión de resultados.
[53]	Superficies de Cu	Norovirus humano	Degradación del virus en menos de 5 minutos.
[54]	Superficies de Cu	Norovirus	Se pierde la integridad de la cápside viral.
[55]	Cu	Revisión - varios	Revisión de las propiedades antibacteriales, antivirales y antifúngicas.
[56]	Superficies de Cu	Influenza A	Inactivación en 6 horas.
[57]	Iones de Cu y Ag en agua	Virus entéricos: Hepatitis A, rotavirus, adenovirus, poliovirus	Los iones de Ag y Cu no fueron más eficientes que el cloro.
[58]	Au/CuS	Norovirus	Inactivación del 50 % en 10 min a concentraciones de 0.37 µg/mL.
[59]	Película de cobre	Influenza A	99.3 % - 97.7 % de reducción en la infectividad del virus.
Antibacterial Ag/Cu			
[60]	Cu, Ag, Cu-Ag NPs 20 nm	G+ y G-	Antibacterial para ambas a concentraciones micromolares.
[39]	Nanocompuesto de Cu-Ag	<i>E. coli</i> y <i>Staphylococcus sp</i>	Efectiva a 0.4 mg/mL.
[38]	Película de Cu-Ag (65–35 at%)	Varios	Retención bacteriana del 100 % en rejillas de acero.
[61]	Ag-Cu NPs 2.1nm	<i>E. coli</i> y <i>S. aureus</i>	Inhibe completamente el crecimiento a concentraciones ultrabajas.
[62]	Ag/Cu _x O@NP-CuAg	<i>E. coli</i>	Efectivo.
[63]	Monolitos bimetálicos porosos de Ag-Cu	<i>E. coli</i> y <i>B. Subtilis</i>	Efectivo. La mínima concentración inhibitoria disminuye al incrementarse la fracción de Cu y se alcanza un mínimo para la mezcla molar 1:1.
[37]	Polvos de Ag/Cu	<i>E. coli</i> y <i>B. subtilis</i>	El crecimiento bacterial fue inhibido desde los 60 para <i>E. Coli</i> y los 15 minutos para <i>B. subtilis</i> , a concentraciones de 0.2 mg/mL.
[64]	Nanopartículas de Ag con Cu en el exterior	<i>E. coli</i> y <i>S. aureus</i>	La capacidad antibacteriana de las partículas de Cu-Ag es eficaz para ambas.

Recubrimientos depositados por PVD

[65]	Películas de AgCu	<i>E. Coli</i> y <i>P. aeruginosa</i>	La inactivación de cada cepa depende de las concentraciones de Ag/Cu.
[66]	Recubrimientos de Cu, Ag, Al, Zr, Ti	<i>E. coli</i> Coliformes totales	Antibacterial para ambas, pero mejor con recubrimiento de cobre.
[67]	Compuestos de silica con nanocúmulos de Ag	<i>S. aureus</i> y <i>E. coli</i>	Radios de inhibición de 2 mm.
[68]	Co-depósito de películas de Ag/Cu (67/33 at. %)	Bacterias resistentes a los antibióticos (MRSA)	In vitro, previenen la colonización de MRSA, pero in vivo, la capa de Ag/Cu es cubierta por una capa de proteínas que limita su actividad. Las pruebas de irritación cutánea demostraron que el material es seguro de usar.
[69]	Películas basadas en Ag, Cu y Zn producidos por Sol-Gel	VIH (100 %), dengue (97 %), influenza (77 %) y herpes (100 %)	Se demostró que el recubrimiento inhibe diferentes virus: VIH (100 %), dengue (97 %), influenza (77 %) y herpes (100 %) después de 240 minutos en contacto. Sin embargo, para el VIH, la inhibición es del 99.5 - 100 % desde los primeros 20 minutos. El recubrimiento fue hecho por inmersión de sustratos de vidrio en el sol formado a partir de sales metálicas y polímeros.
[70]	Coloides de Ag, Cu y bimetalicos Ag/Cu	<i>Candida albicans</i> , <i>Escherichia coli</i> y <i>Staphylococcus aureus</i>	Las nanopartículas se inmovilizaban sobre textiles de algodón-sintético y en todos los casos se observa propiedades antimicrobianas, que varían dependiendo del tamaño, geometría y agente estabilizador utilizado.
[62]	Materiales nanocompuestos conformados de Ag/CuOx y nanopartículas bimetalicas de plata-cobre	<i>E. coli</i>	Buenas propiedades antibacteriales.
[71]	Recubrir filtros de papel	Varios	Se utilizaron películas gruesas de entre 300 nm y 1 micra de espesor de plata o de cobre, observándose reducciones de 2 a 3 órdenes de magnitud en los primeros 30 minutos.
[72]	Películas compuestas de TiO ₂ -Cu y ZnO-Cu depositadas sobre poliéster	Varios	Demuestran que el Cu funciona como bactericida en condiciones aeróbicas y anaeróbicas.
[73]	Nanocompuestos de CuO-grafeno	Influenza	El CuO-grafeno afectan la estabilidad estructural de la envoltura y las proteínas externas del virus impactando en la habilidad del virus de penetrar en las células huésped.

Reportes recientes de SARS-CoV-2

[74]	Recubrimientos basados en plata y silica (SiO ₂)	SARS-CoV-2	Capas de Ag/SiO ₂ depositadas directamente en la cara externa de equipos de protección tipo FFP3. Se observó que con la mínima concentración de plata (0.55 at. %) se reduce un orden de magnitud la infectividad del virus. No se presentan estudios de citotoxicidad o sensibilización. La mascarilla luce totalmente plateada al exterior, indicando que la concentración de Ag debe ser significativamente mayor.
[75]	CuS incorporado en mascarillas tricapa	SARS-CoV-2	Impregnación y depósito de CuS con diferentes concentraciones en cada capa formada por fibras de Nylon, poliéster y Spandex. La impregnación se realiza durante la manufactura del tejido. Se observa efectividad contra el virus desde la primera media h en contacto para concentraciones totales de CuS de 15 %. Para concentraciones de 5 y 10 %, la inactivación del virus se alcanza a los 60 minutos.
[76]	Mascarilla de polipropileno recubierta con cobre	SARS-CoV-2	El recubrimiento de Cu se realiza por evaporación catódica (<i>magnetron sputtering</i>) obteniendo una película de 20 nm depositada en la parte externa de una mascarilla KF94. Se reporta una reducción del 75 % en la cantidad del virus después de 1 hora en contacto.
[77]	Revisión	Varios	En esta revisión se mencionan nanorrecubrimientos de plata y de cobre, pero no compuestos de plata-cobre.

Nanocapa de plata-cobre

Con base en la información propusimos una investigación respecto del uso de nanocapas de plata-cobre como material antimicrobiano para aplicar en cubrebocas. Se propuso como una tesis de licenciatura e iniciamos el estudio haciendo películas delgadas o capas con un sistema de co-depósito que permite variar las concentraciones tanto de plata como de cobre, ya que se aplican voltajes diferentes a cada blanco de forma independiente.

La tecnología de películas delgadas está basada en el uso de sistemas de vacío que permiten controlar la composición del material depositado con precisión de manera fácil y efectiva. Se pueden distinguir dos métodos de formación: a) Depósito por Fase Química (CVD) y b) Depósito por Fase Física (PVD). Ambos promueven la formación de capas bidimensionales por la agregación de átomos, iones o moléculas sobre un sustrato. La película resultante tiene propiedades que dependen de: el material del sustrato, la adhesión película-sustrato, la composición, tipos de enlaces químicos, la micro/nano estructura y la morfología del recubrimiento mismo.

La técnica de depósito propuesta para la nanocapa de plata-cobre es *magnetron sputtering* (MS), la cual cae dentro del grupo de técnicas tipo PVD. En español es conocida con diversos nombres: pulverización catódica, evaporación catódica o espurreo con magnetrón. En esta técnica, los iones formados en un plasma son acelerados hacia el material que se desea depositar (el blanco) mediante un campo eléctrico. El plasma está formado por gases de proceso, en este caso argón, el cual es ionizado por la aplicación del campo eléctrico. Los iones de argón son acelerados hacia el blanco con la energía suficiente para arrancar átomos de su superficie por un proceso de transferencia de momento. Cuando el ion golpea la superficie del blanco, transfiere parte de su energía a los átomos de la superficie y se produce una cascada de colisiones dentro del blanco. Las múltiples colisiones hacen posible que algunos átomos del blanco adquieran la energía suficiente para abandonar la superficie del blanco y salir expedidos a alta velocidad. Los átomos arrancados del blanco son transportados a través del vacío hacia el sustrato donde se condensan formando una capa o película delgada.

En general, todas las técnicas asistidas por plasmas son sistemas no-térmicos, donde no se puede definir una temperatura de equilibrio para todas las partículas, iones, electrones, átomos y radicales. En consecuencia, es de esperarse que los materiales sintetizados presenten propiedades o microestructuras

diferentes a aquellos sintetizados por procesos termodinámicamente estables. La ventaja de utilizar la técnica de *magnetron sputtering* es que es escalable y existen ya sistemas comerciales que aseguran el escalamiento. A nivel del laboratorio, se trabaja en escalas pequeñas y en el caso de la nanocapa de plata-cobre para determinar las concentraciones adecuadas de cada metal se acoplaron dos magnetrones de 2" de diámetro, cada uno de manera confocal hacia un sustrato en el que convergen los flujos de ambos átomos, formando así una capa compuesta de plata-cobre (Fig. 1)

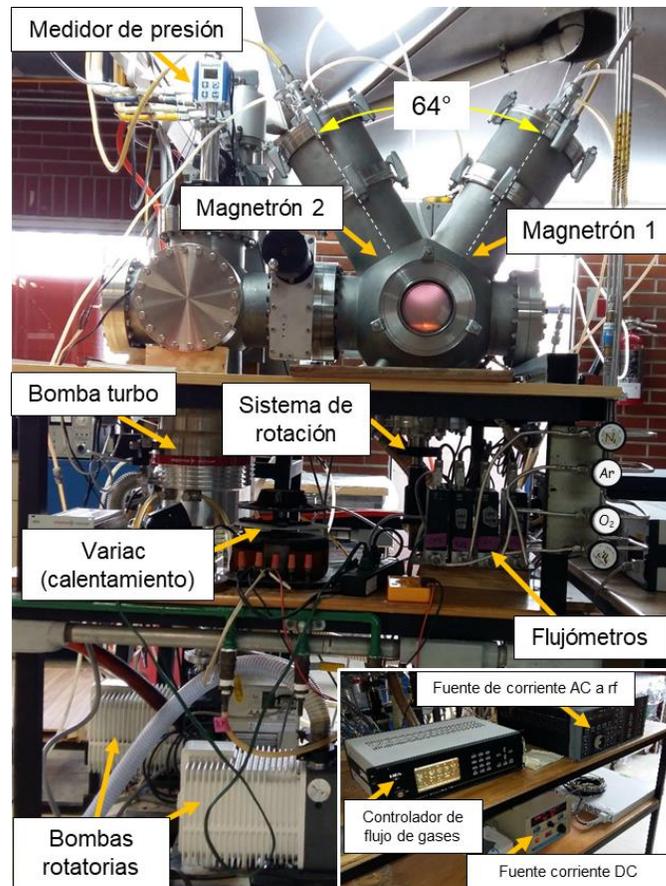


Figura 1. Esquema del sistema de co-depósito.
Cortesía O. Depablos-Rivera

Al encender ambos plasmas de forma conjunta se incorporan átomos de Ag y Cu a la película en una tasa que depende de la potencia aplicada a cada blanco y la eficiencia de erosión de cada metal. Con el estudiante de licenciatura logramos encontrar condiciones de depósito para tener películas muy delgadas (20-40 nm en 15 segundos), con concentraciones de Ag y Cu variables, tal como se indica en la Tabla 4.

Tabla 4. Condiciones de depósito de películas compuestas de plata-cobre y la concentración elemental medida por espectroscopía de fotoelectrones

Recubrimiento	Potencia blanco de Ag (W)	Potencia blanco de Cu (W)	Concentración*	
	Radio frecuencia	Corriente directa	Ag (at. %)	Cu (at. %)
Ag	60	0	100	0
Cu	0	60	0	100
AgCu1	60	60	35.5	64.4
AgCu2	90	60	45	55
AgCu3	120	60	57.7	42.3

* Se observa oxígeno y carbono en la superficie de las muestras

Este trabajo fue interrumpido por la pandemia, a partir del 17 de marzo del 2020 fue imposible para los estudiantes de licenciatura continuar sus actividades presenciales. Sin embargo, al leer los diversos trabajos sobre la baja supervivencia del SARS-CoV-2 en las superficies de cobre [78] en comparación con otros materiales, fue evidente que era importante continuar con la investigación, aun con las condiciones limitadas de acceso y apoyo en los equipos que son de uso general.

El primer resultado obtenido con las muestras ya depositadas sobre cubrebocas de polipropileno no fue muy alentador, ya que se hicieron los ensayos microbiológicos estándar de prueba en agar. Este ensayo está diseñado para evaluar la actividad antimicrobiana de materiales que liberan los agentes biocidas eficientemente en el agar. Una característica, que determinamos posteriormente, es que la nanocapa de Ag-Cu depositada sobre el polipropileno no libera los iones metálicos fácilmente. Sin embargo, se pudo observar que las muestras bimetalicas producían un halo inhibitorio para *Staphylococcus aureus* y *Escherichia coli* ligeramente mayor que en los metales individuales, resultados que concuerdan con lo reportado recientemente para nanopartículas [79].

Con esta información se seleccionó un intervalo de concentraciones relativas de Ag y Cu con el que se continuó la investigación, ahora en un sistema de depósito de un solo blanco compuesto. La importancia de cambiar a esta

configuración estaba en el tamaño de la cámara de depósito, ya que, pensando en la posible aplicación hacia la producción de cubrebocas, resultaba importante hacer depósitos en muestras de mayor diámetro y sobre todo implementar un sistema continuo de depósito que permitiera obtener suficiente material.

El nuevo equipo se configuró para funcionar como un sistema de depósito para rollos de unos 20 metros lineales y anchos máximos de rollo de 23 cm. Se iniciaron nuevos depósitos en rollos de polipropileno con una concentración de Ag-Cu fija determinada por la composición del blanco (50 % - 50 %). En este caso, el espesor de la nanocapa debe regularse utilizando la potencia aplicada al blanco, en lugar del tiempo de depósito, el cual queda definido por la velocidad de giro del rollo. Como se ilustra en la Fig. 2, el polipropileno pasa enfrente del blanco a una distancia de 5 cm y una velocidad de 10 rpm. De estos depósitos se prepararon muestras uniformes de 1 cm de diámetro con las cuales se realizaron todas las caracterizaciones posteriores (Fig. 3a). La morfología de la nanocapa depositada sobre las fibras del polipropileno a escala nanométrica se presenta en la Fig. 3 b, donde puede observarse que es una capa continua que recubre de forma uniforme las fibras de polipropileno. La concentración es de aproximadamente 50 Cu - 50 Ag at.%, aunque hay una pequeña discrepancia entre las concentraciones medidas por espectroscopía de fotoelectrones y dispersión de fluorescencia de rayos-X, debido al diferente volumen que fue analizado por cada técnica.

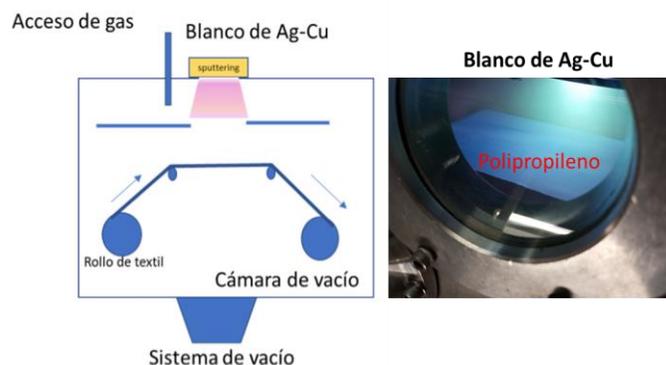


Figura 2. Esquema y fotografía del sistema de depósito continuo

A continuación, se describen los experimentos realizados para evaluar la funcionalidad y no-citotoxicidad de la nanocapa de plata-cobre depositada en el polipropileno. Para las pruebas antimicrobianas se presentan los resultados de la nanocapa depositada sobre una sola cara del polipropileno, aunque en

una publicación anterior ya se reportaron los datos para la nanocapa depositada en ambas caras [80]. En el caso de la citotoxicidad, todos los ensayos se realizaron en muestras con depósitos en ambas caras del polipropileno.

Propiedades antimicrobianas

Los ensayos descritos a continuación contaron con la aprobación de los comités institucionales (Investigación, Ética y Bioseguridad) para la toma de muestras y especímenes infectocontagiosos, y para el manejo de los mismos para fines que son exclusivamente de investigación por parte del Hospital Juárez de México (HJM).

Actividad antibacterial

La alta incidencia de infecciones hospitalarias está relacionada con la presencia de un conjunto de bacterias multidrogorresistentes (MDR), lo cual se ha convertido en un problema de salud pública en el mundo. Estas cepas MDR varían entre hospitales y se describen agrupados con el acrónimo de ESKAPE, que incluye *Enterococcus faecium*, *Staphylococcus aureus*, *Klebsiella pneumoniae*, *Acinetobacter baumannii*, *Pseudomonas aeruginosa* y *Enterobacter cloacae*.

Las cepas bacterianas del grupo ESKAPE utilizadas para estas pruebas forman parte de la colección de patógenos microbianos de la unidad de investigación del HJM. Las cepas se aislaron previamente de pacientes ingresados con neumonía asociada a ventilación mecánica en la Unidad de Cuidados Intensivos del HJM y se identificaron genéticamente.

Los ensayos de contaminación se llevaron a cabo en una cabina de bioseguridad. Se generaron dos grupos: A (problema) y B (control) constituidos por 5 discos de 1 cm de diámetro. El grupo A consistió en el propileno recubierto con la nanocapa de plata-cobre, y el grupo B (polipropileno) pero sin el recubrimiento. Se colocaron los inóculos bacterianos ESKAPE en concentraciones de 10^6 , 10^5 , 10^4 , 10^3 y 10^2 correspondientes al número de unidades formadoras de colonias (UFC) por cada 50 μ L. Posteriormente, los inóculos se incubaron a temperatura ambiente durante 2, 4, 8 y 24 horas sobre las muestras A y B. La actividad antimicrobiana se obtuvo a partir de la recuperación de las bacterias ESKAPE mediante cultivo bacteriano y el posterior recuento de bacterias viables después de cada tiempo estipulado.

Los resultados se presentan como Valores de Reducción Logarítmica (VRL) y su equivalente Valor de Reducción Porcentual (VRP) definidos como:

$$\text{VRL: } L = \text{Log}_{10} (\text{UFC}_A) - \text{Log}_{10} (\text{UFC}_B)$$

$$\text{VRP: } P = [(1 - 10^{-L}) (100)]$$

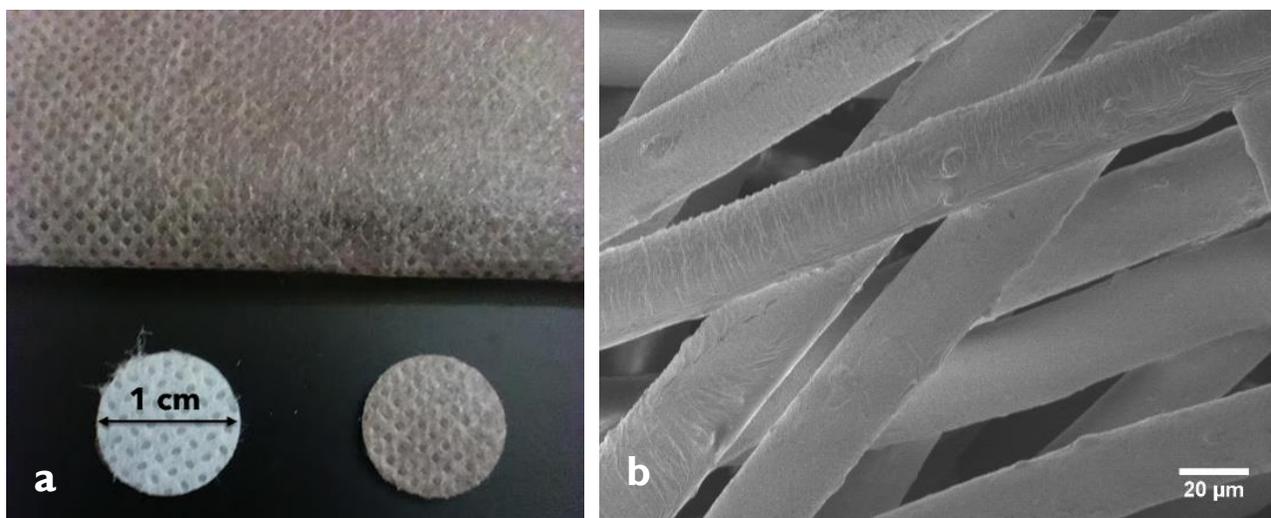


Figura 3a. Muestras preparadas del polipropileno, sin y con la nanocapa de Ag-Cu de 1 cm de diámetro. **Figura 3b.** Micrografía de alta resolución obtenida con el microscopio electrónico de barrido.

Log_{10} (UFC_x) significa el valor logarítmico de Unidades Formadoras de Colonias contabilizadas después del tiempo de incubación en la muestra X

Los resultados se presentan resumidos en la Tabla 5 para las cinco cepas bacterianas, los cuatro tiempos de incubación (2, 4, 8 y 24 h) y las cinco concentraciones inoculadas.

Puede observarse que la nanocapa de plata-cobre fue eficaz para inactivar al 100 % a *Citrobacter freundii*, *Klebsiella pneumoniae* y *Staphylococcus aureus* después de dos horas de contacto para las cinco concentraciones utilizadas, mientras que la inactivación de *Acinetobacter baumannii* y *Pseudomonas aeruginosa* fue gradual en función del tiempo de contacto, aunque a las dos horas, el valor porcentual de inhibición es superior al 85 %.

Tabla 5. Valores de reducción logarítmica y porcentual de inhibición bacteriana

Concentraciones bacterianas probadas (UFC/50 μ L)		2 horas		4 horas		8 horas		24 horas	
Teóricas	Valor logarítmico experimental	VRL	VRP %	VRL	VRP %	VRL	VRP %	VRL	VRP %
<i>Acinetobacter baumannii</i>									
10^2	1.82	1.82	100	1.82	100	1.82	100	1.82	100
10^3	2.56	2.56	100	2.56	100	2.56	100	2.56	100
10^4	3.83	3.83	100	3.83	100	3.83	100	3.83	100
10^5	4.29	4.29	100	4.29	100	4.29	100	4.29	100
10^6	5.19	0.85	85.9	1.52	97.0	0.82	84.9	5.19	100
<i>Pseudomonas aeruginosa</i>									
10^2	1.91	1.91	100	1.91	100	1.91	100	1.91	100
10^3	2.9	2.90	100	2.90	100	2.90	100	2.90	100
10^4	3.87	3.87	100	3.87	100	3.87	100	3.87	100
10^5	4.77	4.77	100	4.77	100	4.77	100	4.77	100
10^6	5.36	0.82	85.2	1.06	91.3	1.8	98.4	5.36	100
<i>Citrobacter freundii</i>									
10^2	1.72	1.72	100	1.72	100	1.72	100	1.72	100
10^3	2.89	2.89	100	2.89	100	2.89	100	2.89	100
10^4	3.36	3.36	100	3.36	100	3.36	100	3.36	100
10^5	4.52	4.52	100	4.52	100	4.52	100	4.52	100
10^6	5.68	5.68	100	5.68	100	5.68	100	5.68	100
<i>Klebsiella pneumoniae</i>									
10^2	1.86	1.86	100	1.86	100	1.86	100	1.86	100
10^3	2.29	2.29	100	2.29	100	2.29	100	2.29	100
10^4	3.43	3.43	100	3.43	100	3.43	100	3.43	100
10^5	4.53	4.53	100	4.53	100	4.53	100	4.53	100
10^6	5.64	5.64	100	5.64	100	5.64	100	5.64	100
<i>Staphylococcus aureus</i>									
10^2	2.21	2.21	100	2.21	100	2.21	100	2.21	100
10^3	2.41	2.41	100	2.41	100	2.41	100	2.41	100
10^4	3.76	3.76	100	3.76	100	3.76	100	3.76	100
10^5	4.38	4.38	100	4.38	100	4.38	100	4.38	100
10^6	5.75	5.75	100	5.75	100	5.75	100	5.75	100

Actividad viricida

El virus seleccionado fue el SARS-CoV-2, el cual era obtenido de muestras de exudados nasofaríngeos de pacientes sintomáticos ingresados al Hospital Juárez de México para detectar el virus SARS-CoV-2 mediante PCR de acuerdo con protocolos establecidos. Para este propósito, se extrajo y se purificó el material genético del virus y se realizó una amplificación de los genes del virus: N, ORF a1b y RNAse P. En todos los ensayos de PCR se utilizaron controles positivos proporcionados por el Instituto de Diagnóstico y Referencia Epidemiológicos (InDRE-México). El virus SARS-CoV-2 fue conservado en solución de preservación de virus y se mantuvo a 8 °C para los experimentos de contaminación artificial. En un experimento anterior [80] se prepararon diluciones del virus SARS-CoV-2 observándose que, en dilución, la inactivación debido al contacto con la nanocapa de plata-cobre ocurría dentro de las dos primeras horas, por lo que para el presente trabajo, se utilizó únicamente la muestra clínica conteniendo al virus SARS-CoV-2 sin diluir.

De forma similar a las bacterias, los dos grupos: A (problemas) y B (controles) se sometieron a la recuperación y detección de SARS-CoV-2 mediante PCR. Se realizó la extracción de ARN para la detección del virus y utilizando la metodología descrita en referencias anteriores [80], se cuantificó la carga viral en función del tiempo de contacto. La Figura 4 presenta el porcentaje de inactivación viral estimado utilizando la misma ecuación del VPR. Los resultados revelaron que la carga viral de SARS-CoV-2 disminuye en función del tiempo de contacto con la nanocapa de plata-cobre, en 4 horas el porcentaje de inactivación del virus es del 70 % y desde las 8 horas, alcanza casi el 100 %. Los experimentos han sido repetidos en tres ocasiones para verificar la reproducibilidad, obteniéndose resultados congruentes y similares a los que se presentan en la Fig. 4, independientemente de si el recubrimiento se encuentra en una o en las dos caras del polipropileno [80].

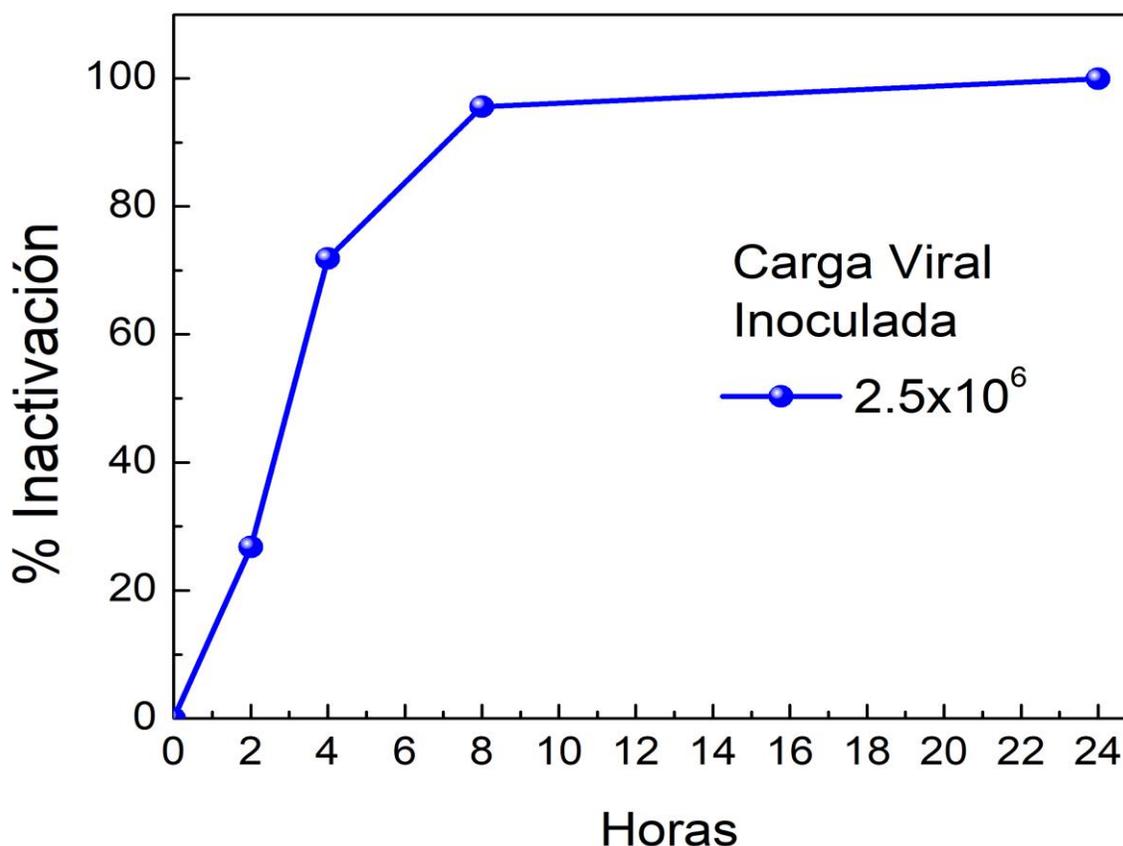


Figura 4. valor porcentual de inactivación del virus SARS-CoV-2 en función del tiempo de contacto.

Citotoxicidad

Una de las preocupaciones del uso de nanomateriales impregnados en textiles es la liberación de compuestos o elementos que puedan afectar la viabilidad celular. La liberación puede ocurrir en forma de nanopartículas o de iones que podrían entrar en contacto con la piel, ojos, boca o el sistema respiratorio causando daños [81-83], lo que demanda pruebas exhaustivas para asegurar su bioseguridad.

Para estudiar la posibilidad de ocurrencia de algún efecto dañino o no deseado que pudiese ejercer la nanocapa de plata-cobre en el organismo, se diseñaron diferentes pruebas *in vitro*, que, si bien no son pruebas directamente en las condiciones de uso de los cubrebocas, sí son pruebas biológicas que nos indican si existe un efecto citotóxico, es decir, si existe algún efecto dañino de los cubrebocas recubiertos hacia las células. Estas pruebas son un indicador de los potenciales efectos dañinos que pudiesen presentarse durante el uso (contacto con el cuerpo humano) de los cubrebocas recubiertos. Para esto, en condiciones de esterilidad, se sembraron en una placa de cultivo individuales y de forma independiente: A) células troncales mesenquimales (células madre) obtenidas de muestras de médula ósea humanas (ATCC™ PCS-500-012), B) fibroblastos (HDFa, ATCC™ PCS-201-012) que corresponden a las células más abundantes en la epidermis (la segunda capa de la piel) y C) queratinocitos (HaCaT, CLS™ 300493) que corresponden a las células más abundantes en la dermis (la capa más externa de la piel), y se incubaron durante 24 h en condiciones estándar de cultivo para cada fenotipo celular a 37 °C, y en una atmósfera con 5 % de CO₂ y 95 % de humedad (día 1). Simultáneamente, en un ensayo independiente, muestras estériles de polipropileno recubierto con la nanocapa de plata-cobre y de polipropileno no recubierto (como control) se sumergieron individualmente en medio de cultivo celular y se incubaron durante 4, 8 y 24 h en condiciones de cultivo celular (37 °C, 5 % de CO₂ y 95 % de humedad). En cada tiempo de incubación se retiró el medio de cultivo que había estado en contacto con las muestras recubiertas y no recubiertas, y se almacenaron los sobrenadantes para su posterior uso en los cultivos celulares. Cabe mencionar que estos sobrenadantes contienen los iones de plata y cobre que son liberados al estar sumergidos y que serían los mismos que podrían inducir un daño celular.

En las pruebas que se realizaron con las células madre (células muy sensibles a los efectos citotóxicos de cualquier material) también se usaron sobrenadantes recolectados de muestras de

polipropileno recubiertas con la nanocapa de plata-cobre y de muestras de propileno no recubiertas, que fueron lavadas previo a su incubación con medio de cultivo y recolección de los sobrenadantes, esto para verificar si el lavado de las nanocapas provocaba algún cambio en la respuesta.

En el día 2, los medios de cultivos de los pozos con células se retiraron y los sobrenadantes recolectados de las muestras, tanto las cubiertas como las no recubiertas, se pusieron en contacto con las células y estos cultivos se regresaron al incubador celular, para ver el efecto que tenían los sobrenadantes recolectados de los cubrebocas sobre la viabilidad celular (supervivencia celular) después de un periodo de 24 horas de contacto de los sobrenadantes con las células. En el día 3 se retiraron todos los medios de cultivo y se realizó una prueba de MTT-formazan en las células que habían sido incubadas con los sobrenadantes y sobre células que fueron cultivadas en medios de crecimiento ideal (controles; Ctrl+) para los diferentes fenotipos celulares estudiados. Estos controles nos sirven para determinar la supervivencia celular en condiciones ideales (100 % de viabilidad celular) y poder comparar así cualquier disminución que exista en la viabilidad celular debido al contacto con los sobrenadantes obtenidos de las muestra recubiertas o no recubiertas de cubrebocas. La prueba de MTT mide indirectamente la viabilidad celular (células viables y con una actividad metabólica adecuada) a través de la evaluación del metabolismo celular. En todos los experimentos se incluyó un disco similar (de 1 centímetro de diámetro) de cubrebocas comercial tipo quirúrgico.

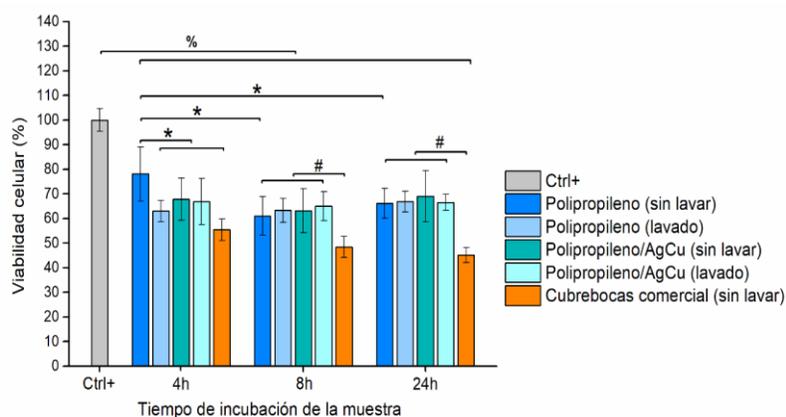


Figura 5. Viabilidad celular de las células mesenquimales cultivadas por 24 horas en medio que contiene los sobrenadantes de los materiales de estudio, siguiendo la metodología de la norma ISO10933-12. *, #, % diferencias significativas a $p < 0.05$.

La Figura 5 presenta la comparación de la nanocapa de plata-cobre, el polipropileno sin recubrir y un cubrebocas comercial tipo quirúrgico. Se incluyen las pruebas antes y después de un lavado previo a la obtención de los sobrenadantes. Se observa que la viabilidad es superior al 60 % en los tres periodos de tiempo e incluso superior a lo observado para el cubrebocas comercial. La alta sensibilidad de las células mesenquimales se identifica porque la viabilidad es reducida con respecto al control para todas las muestras.

El segundo experimento se orientó a las células que estarían en contacto directo con los iones de plata y cobre que pudieran ser liberados debido a las condiciones de humedad que prevalecen en los cubrebocas.

La Figura 6 presenta los resultados de los cultivos celulares por 24 h utilizando fibroblastos y queratinocitos humanos. Los controles son, nuevamente, las células sin sobrenadante y un cubrebocas comercial. Debido a que los resultados anteriores indicaron que el lavado previo no cambiaba la respuesta, solo se presentan sin lavado previo (que en todo caso sería el caso más severo de liberación iónica). Se puede observar que, para ambos fenotipos celulares, la viabilidad celular es similar a la del control, no se observa ninguna tendencia que apunte hacia la toxicidad al aumentar el tiempo de inmersión. Por lo que podemos concluir que no hay citotoxicidad inducida por la nanocapa de plata-cobre para ninguno de los tipos celulares.

En estudios posteriores, ajustamos el experimento para replicar totalmente la norma ISO10933-12, colocando 6 cm²/mL de material y aunque hay una ligera disminución en la viabilidad celular, los valores son superiores al 60 % en todos los casos [80].

Bajo las condiciones de la norma ISO10933-12, la concentración de plata y cobre presente en los sobrenadantes fue medida por la técnica de espectroscopia de plasma de acoplamiento inductivo (ICP), la cual se utiliza para analizar simultáneamente muchos elementos y en niveles tan bajos como 1-10 partes por mil millones o ppb. Los medios de cultivo resultan bastante agresivos para los metales debido a la concentración de cloro, fosfatos y carbonatos. Los valores se reportan en la tabla 6, de modo que puede concluirse que dichas concentraciones no generan toxicidad para los tres fenotipos celulares estudiados. Aunque cabe mencionar que en soluciones acuosas las concentraciones liberadas fueron un orden de magnitud menor [80].

Tabla 6. Resultados de ICP que indican la concentración atómica de plata y cobre presente en los sobrenadantes.

Tiempo de inmersión (h)	Ag (ppm)	Cu (ppm)
4	0.230 ± 0.004	0.610 ± 0.004
8	0.320 ± 0.002	0.650 ± 0.007
24	0.550 ± 0.009	0.670 ± 0.007

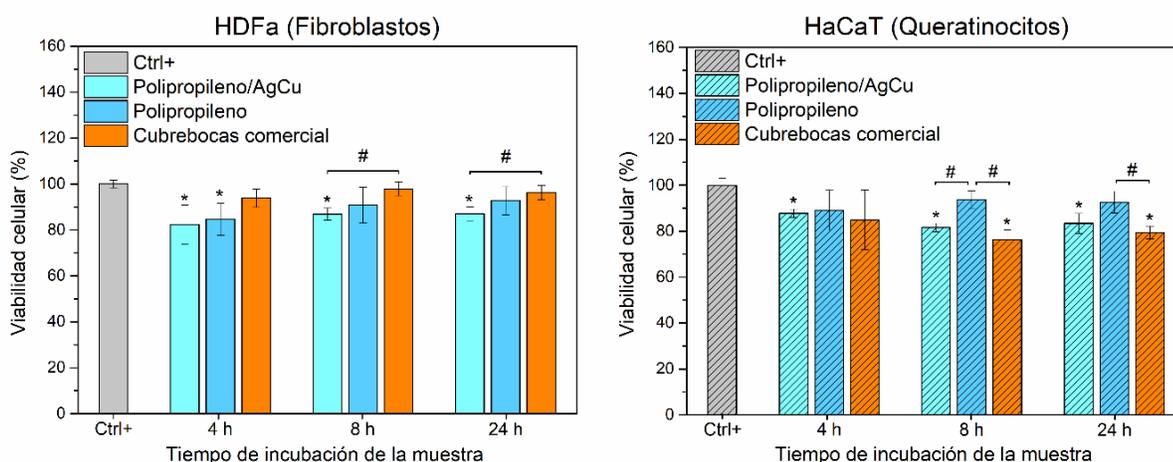


Figura 6. Viabilidad celular de los fibroblastos y queratinocitos humanos cultivados por 24 horas en medio que contiene los sobrenadantes de los materiales de estudio, siguiendo la metodología de la norma ISO10933-12. *, # diferencias significativas a p < 0.05.

Resumen

Con estos resultados aseguramos que la nanocapa de plata-cobre depositada sobre el polipropileno es eficiente para inactivar el virus SARS-CoV-2 desde las dos primeras horas de contacto, obteniéndose para las 4 horas de contacto inactivación del más del 50 % en muestras sin diluir, es decir, con la concentración típica de un paciente ingresado en calidad de COVID 19 grave al HJM. La nanocapa, a su vez, inhibe el crecimiento bacteriano al 100 % de tres de las cepas bacterianas multidrogoresistentes evaluadas y es superior al 85 % para las otras dos cepas, desde las dos primeras horas de contacto. En ambos casos, a las 24 horas la inhibición es total. Esto indica que la nanocapa puede utilizarse para evitar el contagio bacteriano en entornos hospitalarios. Las pruebas de citotoxicidad indican que los lixiviados de plata y cobre liberados por el contacto con la humedad no significan un riesgo a nivel celular; evaluados para células mesenquimales, fibroblastos y queratinocitos humanos. Esta nanocapa de plata-cobre depositada sobre el polipropileno fue registrada en la UNAM con el nombre de SakCu® (registro otorgado por el IMPI 2248928) para su aplicación en cubrebocas de protección que no son de uso médico. Esto con el propósito de generar cubrebocas con propiedades antimicrobiales que consideramos como una opción segura y eficiente para combatir las infecciones bacterianas, y en particular inactivar al virus SARS-CoV-2. Como se mencionaba en la introducción, el principal interés era incluir la nanocapa como un componente del material filtrante para mascarillas reutilizables que pudieran ser utilizadas para la población general. El diseño de la mascarilla está basado en las recomendaciones provistas por las diferentes agencias europeas, que recomiendan una triple capa, con algodón (100 %) al exterior e interior y una capa intermedia de material filtrante basada en polipropileno (*spunbound*, el cual es de fácil acceso a nivel mundial) [84, 85]. El diseño debe cumplir un conjunto de propiedades tales como filtración superior al 70 % para partículas de 3.0 μm , un mínimo de 5 lavados a 60 °C y la presión diferencial no debe exceder 60 Pa/cm². Para evaluar dichas propiedades fueron diseñados, en el Instituto de Investigaciones en Materiales, experimentos y equipos que serán descritos en un artículo posterior.

Agradecimientos: Proyecto financiado por la SECTEI bajo contrato SECTEI/096/2020. Se reconoce el apoyo parcial de los proyectos CONACyT 313771 y DGAPA-UNAM PAPIIT (IT201121, IN101419). Los autores agradecemos el apoyo de los técnicos académicos del Instituto de Investigaciones en Materiales: F. García-López, O. Novelo, L. Bazan, L. Huerta, A. Ortega, E. Hernández.

Referencias

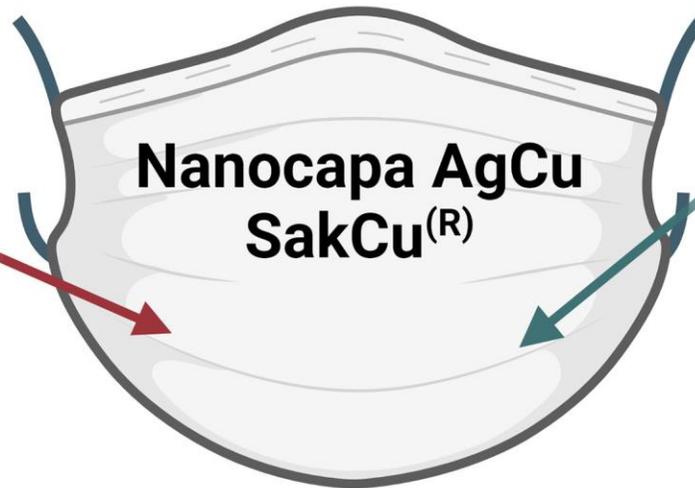
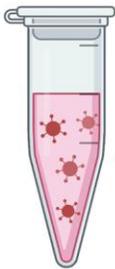
- [1] L.V. Tse, R.M. Meganck, R.L. Graham, R.S. Baric, The Current and Future State of Vaccines, Antivirals and Gene Therapies Against Emerging Coronaviruses, *Frontiers in Microbiology* 11(658) (2020).
- [2] R. Aiello, PM plans to take COVID-19 antibody test, says more PPE coming, *Canada News, Ottawa News Bureau Online Producer*, 2020.
- [3] M. Cevik, K. Kuppalli, J. Kindrachuk, M. Peiris, Virology, transmission, and pathogenesis of SARS-CoV-2, *BMJ* 371 (2020) m3862.
- [4] H.A. Rothan, S.N. Byrareddy, The epidemiology and pathogenesis of coronavirus disease (COVID-19) outbreak, *Journal of Autoimmunity* 109 (2020) 102433.
- [5] E. Pujadas, F. Chaudhry, R. McBride, F. Richter, S. Zhao, A. Wajnberg, G. Nadkarni, B.S. Glicksberg, J. Houldsworth, C. Cordon-Cardo, SARS-CoV-2 viral load predicts COVID-19 mortality, *The Lancet Respiratory Medicine* 8(9) (2020).
- [6] D. Cyranovsky, Profile of a killer virus, *Nature* 581 (2020) 22-26.
- [7] H. Ledford, How does COVID-19 kill? Uncertainty hampers doctor's ability to choose treatments, *Nature* 580 (2020) 311-312.
- [8] H. Huang, C. Fan, M. Li, H.-L. Nie, F.-B. Wang, H. Wang, R. Wang, J. Xia, X. Zheng, X. Zuo, J. Huang, COVID-19: A Call for Physical Scientists and Engineers, *ACS Nano* 14(4) (2020) 3747-3754.
- [9] N. van Doremalen, T. Bushmaker, D.H. Morris, M.G. Holbrook, A. Gamble, B.N. Williamson, A. Tamin, J.L. Harcourt, N.J. Thornburg, S.I. Gerber, J.O. Lloyd-Smith, E. de Wit, V.J. Munster, Aerosol and Surface Stability of SARS-CoV-2 as Compared with SARS-CoV-1, *New England Journal of Medicine* 382(16) (2020) 1564-1567.
- [10] A.W.H. Chin, J.T.S. Chu, M.R.A. Perera, K.P.Y. Hui, H.-L. Yen, M.C.W. Chan, M. Peiris, L.L.M. Poon, Stability of SARS-CoV-2 in different environmental conditions, *The Lancet Microbe* 1(1) (2020) e10.
- [11] S.B. Kasloff, A. Leung, J.E. Strong, D. Funk, T. Cutts, Stability of SARS-CoV-2 on critical personal protective equipment, *Scientific Reports* 11(1) (2021) 984.
- [12] L. Morawska, J. Cao, Airborne transmission of SARS-CoV-2: The world should face the reality, *Environment International* 139 (2020) 105730.
- [13] C.R. MacIntyre, M.R. Ananda-Rajah, Scientific evidence supports aerosol transmission of SARS-COV-2, *Antimicrobial Resistance & Infection Control* 9(1) (2020) 202.

- [14] E.L. Anderson, P. Turnham, J.R. Griffin, C.C. Clarke, Consideration of the Aerosol Transmission for COVID-19 and Public Health, *Risk Analysis* 40(5) (2020) 902-907.
- [15] B. Gorbunov, Aerosol particles laden with COVID-19 travel over 30m distance, Preprints (2020).
- [16] C.Y.H. Chao, M.P. Wan, L. Morawska, G.R. Johnson, Z.D. Ristovski, M. Hargreaves, K. Mengersen, S. Corbett, Y. Li, X. Xie, D. Katoshevski, Characterization of expiration air jets and droplet size distributions immediately at the mouth opening, *Journal of Aerosol Science* 40(2) (2009) 122-133.
- [17] P. Anfinrud, V. Stadnytskyi, C.E. Bax, A. Bax, Visualizing Speech-Generated Oral Fluid Droplets with Laser Light Scattering, *New England Journal of Medicine* 382(21) (2020) 2061-2063.
- [18] P.J. Rivero, A. Urrutia, J. Goicoechea, F.J. Arregui, Nanomaterials for Functional Textiles and Fibers, *Nanoscale Research Letters* 10(1) (2015) 501.
- [19] A.-B.N. G., S.S. E, Imparting Antimicrobial Properties to Polyester and Polyamide Fibers-State of the Art, *Journal of the Textile Association* 78(3) (2017) 179-201.
- [20] B. Hilgenberg, A. Prange, L. Vossebein, Testing and regulation of antimicrobial textiles, *Antimicrobial Textiles 2016*, pp. 7-18.
- [21] K. Laird, K. Riley, Antimicrobial textiles for medical environments, *Antimicrobial Textiles 2016*, pp. 249-262.
- [22] J. Zhuo, Photoactive chemicals for antimicrobial textiles, *Antimicrobial Textiles 2016*, pp. 197-223.
- [23] D. Gupta, S. Bhaumik, Antimicrobial treatments for textiles, *Indian Journal of Fibre & Textile Research* 32 (2007) 253-263.
- [24] G. Prado-Prone, P. Silva-Bermudez, M. Bazzar, M.L. Focarete, S.E. Rodil, X. Vidal-Gutiérrez, J.A. García-Macedo, V.I. García-Pérez, C. Velasquillo, A. Almaguer-Flores, Antibacterial composite membranes of polycaprolactone/gelatin loaded with zinc oxide nanoparticles for guided tissue regeneration, *Biomedical Materials* 15(3) (2020) 035006.
- [25] G. Prado-Prone, P. Silva-Bermudez, A. Almaguer-Flores, J.A. García-Macedo, V.I. García, S.E. Rodil, C. Ibarra, C. Velasquillo, Enhanced antibacterial nanocomposite mats by coaxial electrospinning of polycaprolactone fibers loaded with Zn-based nanoparticles, *Nanomedicine: Nanotechnology, Biology and Medicine* 14(5) (2018) 1695-1706.
- [26] A. Almaguer-Flores, P. Silva-Bermúdez, S.E. Rodil, 4 - Nanostructured biomaterials with antimicrobial activity for tissue engineering, in: V. Guarino, M. Iafisco, S. Spriano (Eds.), *Nanostructured Biomaterials for Regenerative Medicine*, Woodhead Publishing 2020, pp. 81-137.
- [27] D. Depla, S. Segers, W. Leroy, T. Van Hove, M. Van Parys, Smart textiles: an explorative study of the use of magnetron sputter deposition, *Textile Research Journal* 81(17) (2011) 1808-1817.
- [28] Y.-F. Wang, F. Kang, S.-J. You, C.-H. Tsai, G.-L. Lin, Preparation and Characteristic of Antibacterial Facemasks with Chinese Herbal Microcapsules, *Aerosol and Air Quality Research* 17 (2017) 2119-2128.
- [29] Y. Fujimori, Y. Jikihara, T. Sato, F. Y., T. Nakayama, US201201982876A1, USA, 2012.
- [30] D. Gray, R.M. Hume, M.A. Litman, WO 2012/087812 A2, 2012.
- [31] Y. Li, P. Leung, L. Yao, Q.W. Song, E. Newton, Antimicrobial effect of surgical masks coated with nanoparticles, *Journal of Hospital Infection* 62 (2006) 58-63.
- [32] A.C. Burdusel, O. Gherasim, A.M. Grumezescu, L. Mogoanta, A. Ficai, E. Andronescu, Biomedical Applications of Silver Nanoparticles: An Up-to-Date Overview, *Nanomaterials (Basel)* 8(9) (2018).
- [33] L. Ge, Q. Li, M. Wang, J. Ouyang, X. Li, M.M.Q. Xing, Nanosilver particles in medical applications: synthesis, performance, and toxicity, *Int J Nanomedicine* 9 (2014) 2399-2407.
- [34] G. Schneider, Antimicrobial silver nanoparticles – regulatory situation in the European Union, *Materials Today: Proceedings* 4 (2017) S200-S207.
- [35] G. Borkow, J. Gabbay, Copper as a biocidal tool, *Curr Med Chem* 12(18) (2005) 2163-75.
- [36] M. Khalaj, M. Kamali, Z. Khodaparast, A. Jahanshahi, Copper-based nanomaterials for environmental decontamination - An overview on technical and toxicological aspects, *Ecotoxicol Environ Saf* 148 (2018) 813-824.
- [37] A. Nowak, J. Szade, E. Talik, M. Zubko, D. Wasilkowski, M. Dulski, K. Balin, A. Mroziak, J. Peszke, Physicochemical and antibacterial characterization of ionocyt Ag/Cu powder nanoparticles, *Materials Characterization* 117 (2016) 9-16.
- [38] P. Dinca, B. Butoi, M. Lungu, C. Porosnicu, I. Jecu, C. Staicu, C. Lungu, A. Niculescu, I. Burducea, O. Trusca, M. Diaconu, I. Cretescu, G. Soreanu, Antibacterial Efficiency of Stainless-Steel Grids Coated with Cu-Ag by Thermionic Vacuum Arc Method, *Coatings* 10(4) (2020) 322.
- [39] A.M. Azzama, Mahmoud M. Hazaa, A.M.E. Saeed, M.A. Abdel-Naemb, Antibacterial activity of Cu@Ag nanocomposites against water bacterial pollution, *Journal of Basic and Environmental Sciences* 3 (2016) 85-89.

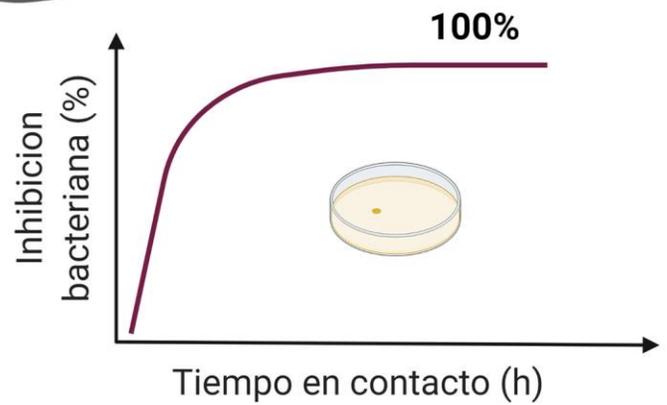
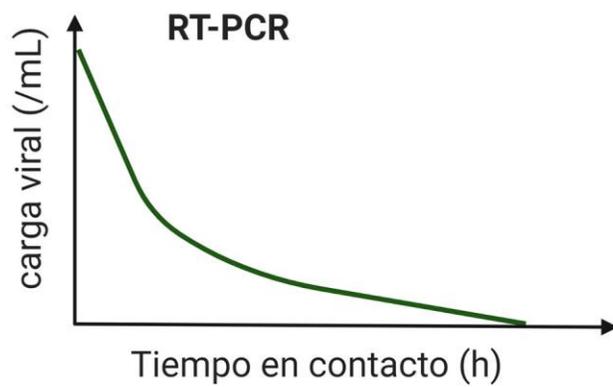
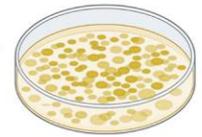
- [40] S. Choudhary, R. Kumar, U. Dalal, S. Tomar, S.N. Reddy, Green synthesis of nanometal impregnated biomass – antiviral potential, *Materials Science and Engineering: C* 112 (2020) 110934.
- [41] X. Lv, P. Wang, R. Bai, Y. Cong, S. Suo, X. Ren, C. Chen, Inhibitory effect of silver nanomaterials on transmissible virus-induced host cell infections, *Biomaterials* 35(13) (2014) 4195-4203.
- [42] L. Sun, A.K. Singh, K. Vig, S.R. Pillai, S.R. Singh, Silver nanoparticles inhibit replication of respiratory syncytial virus, *Journal of Biomedical Nanotechnology* 4(2) (2008) 149-158.
- [43] J.L. Elechiguerra, J.L. Burt, J.R. Morones, A. Camacho-Bragado, X. Gao, H.H. Lara, M.J. Yacaman, Interaction of silver nanoparticles with HIV-1, *J. Nanobiotechnol.* 3(6) (2005).
- [44] D.-x. Xiang, Q. Chen, L. Pang, C.-l. Zheng, Inhibitory effects of silver nanoparticles on H1N1 influenza A virus in vitro, *Journal of Virological Methods* 178(1) (2011) 137-142.
- [45] J.V. Rogers, C.V. Parkinson, Y.W. Choi, J.L. Speshock, S.M. Hussain, A Preliminary Assessment of Silver Nanoparticle Inhibition of Monkeypox Virus Plaque Formation, *Nanoscale Research Letters* 3(4) (2008) 129.
- [46] L. Lu, R.W.Y. Sun, R. Chen, C.K. Hui, C.M. Ho, J.M. Luk, G.K.K. Lau, C.M. Che, Silver nanoparticles inhibit hepatitis B virus replication, *Antiviral Ther.* 13(2) (2008).
- [47] Haggag EG, Elshamy AM, Rabeah MA, Gabr NM, Salem M, Youssif KA, Samir A, Bin Muhsinah A, Alsayari A, A. UR, Antiviral potential of green synthesized silver nanoparticles of *Lampranthus coccineus* and *Malephora lutea*, *Int J Nanomedicine* 14 (2019) 6217-6229.
- [48] T.V.M. Sreekanth, P.C. Nagajyothi, P. Muthuraman, G. Enkhtaivan, S.V.P. Vattikuti, C.O. Tettey, D.H. Kim, J. Shim, K. Yoo, Ultra-sonication-assisted silver nanoparticles using *Panax ginseng* root extract and their anti-cancer and antiviral activities, *Journal of Photochemistry and Photobiology B: Biology* 188 (2018) 6-11.
- [49] H.H. Lara, L. Ixtepan-Turrent, E.N. Garza-Treviño, C. Rodriguez-Padilla, PVP-coated silver nanoparticles block the transmission of cell-free and cell-associated HIV-1 in human cervical culture, *Journal of Nanobiotechnology* 8(1) (2010) 15.
- [50] Y. Mori, T. Ono, Y. Miyahira, V.Q. Nguyen, T. Matsui, M. Ishihara, Antiviral activity of silver nanoparticle/chitosan composites against H1N1 influenza A virus, *Nanoscale Research Letters* 8(1) (2013) 93.
- [51] Y.-N. Chen, Y.-H. Hsueh, C.-T. Hsieh, D.-Y. Tzou, P.-L. Chang, Antiviral Activity of Graphene–Silver Nanocomposites against Non-Enveloped and Enveloped Viruses, *Int. J. Environ. Res. Public Health* 13 (2016) 430.
- [52] H. Ghaffari, A. Tavakoli, A. Moradi, A. Tabarraei, F. Bokharaei-Salim, M. Zahmatkeshan, M. Farahmand, D. Javanmard, S.J. Kiani, M. Esghaei, V. Pirhajati-Mahabadi, S.H. Monavari, A. Ataei-Pirkooh, Inhibition of H1N1 influenza virus infection by zinc oxide nanoparticles: another emerging application of nanomedicine, *Journal of Biomedical Science* 26(1) (2019) 70.
- [53] C.S. Manuel, M.D. Moore, L.A. Jaykus, Destruction of the Capsid and Genome of GII.4 Human Norovirus Occurs during Exposure to Metal Alloys Containing Copper, *Applied and Environmental Microbiology* 81(15) (2015) 4940.
- [54] S.L. Warnes, E.N. Summersgill, C.W. Keevil, Inactivation of Murine Norovirus on a Range of Copper Alloy Surfaces Is Accompanied by Loss of Capsid Integrity, *Applied and Environmental Microbiology* 81(3) (2015) 1085.
- [55] M. Vincent, R.E. Duval, P. Hartemann, M. Engels-Deutsch, Contact killing and antimicrobial properties of copper, *Journal of Applied Microbiology* 124(5) (2018) 1032-1046.
- [56] J.O. Noyce, H. Michels, C.W. Keevil, Inactivation of Influenza A Virus on Copper versus Stainless Steel Surfaces, *Applied and Environmental Microbiology* 73(8) (2007) 2748.
- [57] F.X. Abad, R.M. Pintó, J.M. Diez, A. Bosch, Disinfection of human enteric viruses in water by copper and silver in combination with low levels of chlorine, *Applied and Environmental Microbiology* 60(7) (1994) 2377.
- [58] J.J. Broglie, B. Alston, C. Yang, L. Ma, A.F. Adcock, W. Chen, L. Yang, Antiviral Activity of Gold/Copper Sulfide Core/Shell Nanoparticles against Human Norovirus Virus-Like Particles, *PLOS ONE* 10(10) (2015) e0141050.
- [59] Sundberg K, Champagne V, McNally B, Helfritsch D, S. R, Effectiveness of Nanomaterial Copper Cold Spray Surfaces on Inactivation of Influenza A Virus, *J Biotechnol Biomater* 5 (2015) 205.
- [60] M. Valodkar, S. Modi, A. Pal, S. Thakore, Synthesis and antibacterial activity of Cu, Ag and Cu–Ag alloy nanoparticles: A green approach, *Materials Research Bulletin* 46(3) (2011) 384-389.
- [61] L. Yang, L. Chen, Y.-C. Chen, L. Kang, J. Yu, Y. Wang, C. Lu, T. Mashimo, A. Yoshiasa, C.-H. Lin, Homogeneously alloyed nanoparticles of immiscible Ag–Cu with ultrahigh antibacterial activity, *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces* 180 (2019) 466-472.
- [62] C. Qin, M. Zhang, B. Li, Y. Li, Z. Wang, Ag particles modified Cu_xO (x = 1, 2) nanowires on nanoporous Cu–Ag bimetal network for antibacterial applications, *Materials Letters* 258 (2020) 126823.
- [63] M. Sharma, S. Hazra, S. Basu, Synthesis of heterogeneous Ag–Cu bimetallic monolith with different mass ratios and their performances for catalysis and antibacterial activity, *Advanced Powder Technology* 28(11) (2017) 3085-3094.

- [64] K.-t. Chen, D. Ray, Y.-h. Peng, Y.-C. Hsu, Preparation of Cu–Ag core–shell particles with their anti-oxidation and antibacterial properties, *Current Applied Physics* 13(7) (2013) 1496-1501.
- [65] Y.-H. Hsu, W.-Y. Wu, Antibacterial AgCu coatings deposited using an asymmetric bipolar high-power impulse magnetron sputtering technique, *Surface and Coatings Technology* 362 (2019) 302-310.
- [66] D.M. Mihut, A. Afshar, L.W. Lackey, K.N. Le, Antibacterial effectiveness of metallic nanoparticles deposited on water filter paper by magnetron sputtering, *Surface and Coatings Technology* 368 (2019) 59-66.
- [67] C. Balagna, M. Irfan, S. Perero, M. Miola, G. Maina, M. Crosera, D. Santella, A. Simone, M. Ferraris, Antibacterial nanostructured composite coating on high performance Vectran™ fabric for aerospace structures, *Surface and Coatings Technology* 373 (2019) 47-55.
- [68] M.K. Ballo, S. Rtimi, C. Pulgarin, N. Hopf, A. Berthet, J. Kiwi, P. Moreillon, J.M. Entenza, A. Bizzini, In Vitro and In Vivo Effectiveness of an Innovative Silver-Copper Nanoparticle Coating of Catheters To Prevent Methicillin-Resistant Staphylococcus aureus Infection, *Antimicrob Agents Chemother* 60(9) (2016) 5349-56.
- [69] J. Hodek, V. Zajícová, I. Lovetinská-Šlamborová, I. Stibor, J. Müllerová, J. Weber, Protective hybrid coating containing silver, copper and zinc cations effective against human immunodeficiency virus and other enveloped viruses, *BMC Microbiology* 16(1) (2016).
- [70] M. Paszkiewicz, A. Gołębiewska, Ł. Rajski, E. Kowal, A. Sajdak, A. Zaleska-Medynska, Synthesis and Characterization of Monometallic (Ag, Cu) and Bimetallic Ag-Cu Particles for Antibacterial and Antifungal Applications, *Journal of Nanomaterials* 2016 (2016) 2187940.
- [71] D.M. Mihut, A. Afshar, Electrically assisted silver and copper coated filter papers with enhanced bactericidal effects, *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects* 606 (2020).
- [72] S. Rtimi, D.D. Dionysiou, S.C. Pillai, J. Kiwi, Advances in catalytic/photocatalytic bacterial inactivation by nano Ag and Cu coated surfaces and medical devices, *Applied Catalysis B: Environmental* 240 (2019) 291-318.
- [73] I. Das Jana, P. Kumbhakar, S. Banerjee, C.C. Gowda, N. Kedia, S.K. Kuila, S. Banerjee, N.C. Das, A.K. Das, I. Manna, C.S. Tiwary, A. Mondal, Copper Nanoparticle-Graphene Composite-Based Transparent Surface Coating with Antiviral Activity against Influenza Virus, *ACS Applied Nano Materials* 4(1) (2021) 352-362.
- [74] M. Ferraris, S. Perero, M. Miola, S. Ferraris, G. Gautier, G. Maina, G. Fucale, E. Verne, Chemical, Mechanical, and Antibacterial Properties of Silver Nanocluster-Silica Composite Coatings Obtained by Sputtering, *Advanced Engineering Materials* 12(7) (2010) B276-B282.
- [75] C. Hewawaduge, A. Senevirathne, V. Jawalagatti, J.W. Kim, J.H. Lee, Copper-impregnated three-layer mask efficiently inactivates SARS-CoV2, *Environmental Research* 196 (2021) 110947.
- [76] S. Jung, E.Y. Byeon, D.G. Kim, D.G. Lee, S. Ryoo, S. Lee, C.W. Shin, H.W. Jang, J.Y. Yang, H.J. Kim, S. Lee, Copper-coated polypropylene filter face mask with SARS-COV-2 antiviral ability, *Polymers* 13(9) (2021).
- [77] K. Shirvanimoghaddam, M.K. Akbari, R. Yadav, A.K. Al-Tamimi, M. Naebe, Fight against COVID-19: The case of antiviral surfaces, *APL Materials* 9(3) (2021) 031112.
- [78] A.A. Cortes, J.M. Zuñiga, The use of copper to help prevent transmission of SARS-coronavirus and influenza viruses. A general review, *Diagnostic Microbiology and Infectious Disease* 98(4) (2020) 115176.
- [79] J.C. Medina, V.I. Garcia-Perez, R. Zanella, Metallic composites based on Ag, Cu, Au and Ag-Cu nanoparticles with distinctive bactericidal effect on varied species, *Materials Today Communications* 26 (2021) 102182.
- [80] J.M. Bello-Lopez, P. Silva-Bermudez, G. Prado-Prone, A. Martínez, G. Ibáñez-Cervantes, M.A. Cureño-Díaz, L. Rocha-Zavaleta, J. Manzo-Merino, A. Almaguer-Flores, C. Ramos-Vilchis, S.E. Rodil, Biocide effect against SARS-CoV-2 and ESKAPE pathogens of a noncytotoxic silver-copper nanofilm, *Biomedical Materials* (2021).
- [81] Y. Yan, H. Yang, J. Li, X. Lu, C. Wang, Release behavior of nano-silver textiles in simulated perspiration fluids, *Textile Research Journal* 82(14) (2012) 1422-1429.
- [82] M.E. Üreyen, C. Aslan, Determination of silver release from antibacterial finished cotton and polyester fabrics into water, *The Journal of The Textile Institute* 108(7) (2017) 1128-1135.
- [83] L. Geranio, M. Heuberger, B. Nowack, The Behavior of Silver Nanotextiles during Washing, *Environmental Science & Technology* 43(21) (2009) 8113-8118.
- [84] AFNOR, Fabricación en serie y confección artesanal, Mascarillas, España, 2020.
- [85] UNE, Mascarillas higiénicas reutilizables para adultos y niños, España, 2020.

SARS-CoV-2



Bacterias
ESKAPE



Producción fotocatalítica de hidrógeno a partir de agua: un paso más cerca de la fotosíntesis artificial

David Ramírez-Ortega^a, Diana Guerrero-Araque^b, Próspero Acevedo-Peña^c, Rodolfo Zanella^a

^aInstituto de Ciencias Aplicadas y Tecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria, Coyoacán, 04510 CDMX, México

^bCONACyT-Universidad Autónoma Metropolitana, Departamento de Química, Av. San Rafael Atlixco 156, C. P.09340, CDMX, México

^cCONACyT-Instituto Politécnico Nacional, Laboratorio Nacional de Conversión y Almacenamiento de Energía, CICATA-Legaria, Calzada Legaria 694, Col. Irrigación, 11500 CDMX, México

rodolfo.zanella@icat.unam.mx

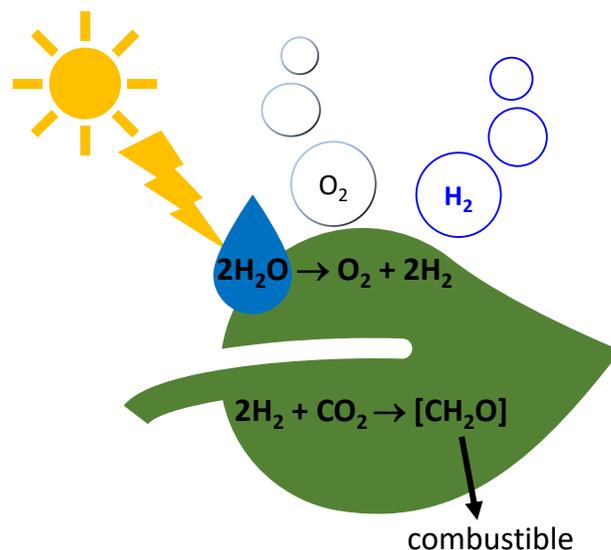
Introducción

El suministro de energía en el mundo está basado predominantemente en el uso de fuentes de energía no renovables, tales como el petróleo, carbón y gas natural. Estos recursos geológicos se han acumulado a lo largo de millones de años a través de la actividad fotosintética y, por lo tanto, se trata de energía solar almacenada. Sin embargo, el rápido consumo de los combustibles fósiles ha causado problemas

ambientales inaceptables, tales como el calentamiento global, que pueden acarrear consecuencias desastrosas para el planeta y para la humanidad.

Desarrollar fuentes sostenibles y limpias de energía se ha convertido entonces en un objetivo para resolver el problema energético y medioambiental. Desde principios de los años 70 del siglo pasado, la comunidad científica ha intentado desarrollar la tecnología para producir combustibles a partir de luz solar, agua y dióxido de carbono, de forma incluso más eficiente que la propia fotosíntesis (proceso que utilizan las plantas para convertir la luz solar en hidratos de carbono y almacenar energía). La comunidad científica llamó a este proceso “fotosíntesis artificial”.

La *fotosíntesis artificial* se divide en dos fases fundamentales: (i) La primera consiste en la captura de la luz, el transporte de los electrones generados y la ruptura de la molécula de agua, generando así oxígeno e hidrógeno. (ii) La segunda etapa consiste en la captura del dióxido de carbono (CO₂), para hacerlo reaccionar con el hidrógeno generado durante la primera etapa y así producir combustibles tales como hidrocarburos ligeros, alcoholes o ambos [1,2].



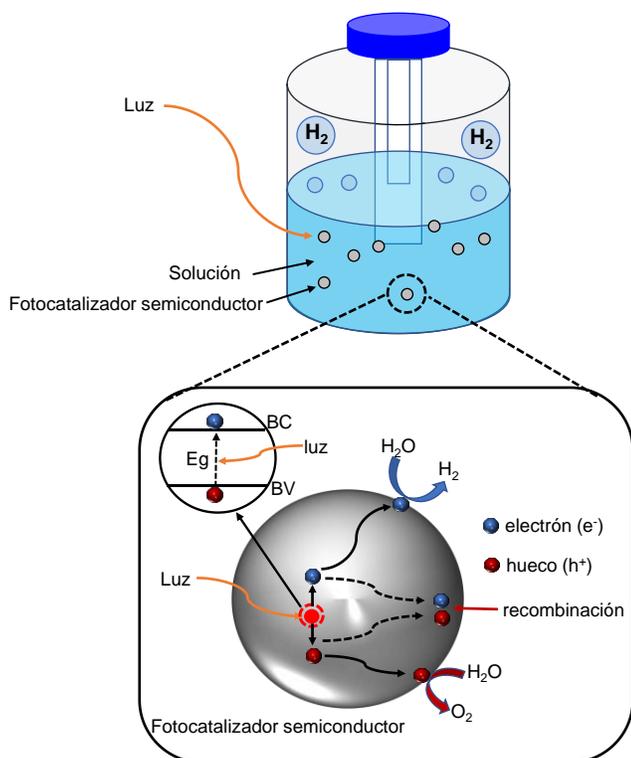
Fotosíntesis artificial

Durante la fotosíntesis artificial se convierte la energía de la luz solar en energía química, generando combustibles de manera limpia

Podemos observar que la generación de hidrógeno es un paso esencial durante el proceso de la fotosíntesis artificial. ¿Cómo podemos entonces obtener hidrógeno de manera eficiente y limpia? Para responder esta pregunta, nos centraremos en la obtención del hidrógeno por medio de la *fotocatálisis*.

Producción fotocatalítica de hidrógeno

Primero, ¿en qué consiste el proceso fotocatalítico para la producción de hidrógeno? La fotocatalisis es un proceso que puede convertir la energía de la luz en energía química y consiste en tres pasos: (i) iluminación y captura de la luz por medio de nanopartículas en solución (a las que llamaremos fotocatalizadores semiconductores); cuando se *fotoexcitan* estos fotocatalizadores se promueve un electrón a la banda de conducción (BC) generándose así un hueco en la banda de valencia (BV).

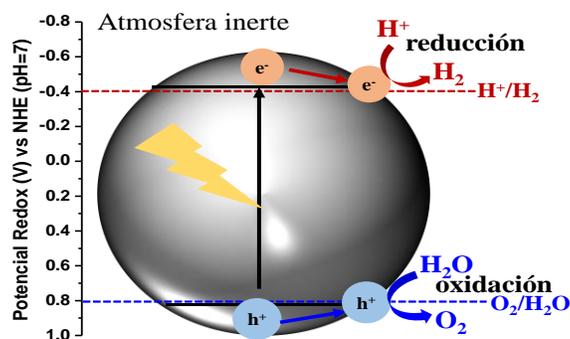


Producción fotocatalítica de hidrógeno

- (ii) Como segundo paso, los electrones (e^-) y huecos (h^+) generados pueden ya sea migrar a la superficie del fotocatalizador o también pueden recombinarse entre ellos.
- (iii) Los electrones y huecos en la superficie se encargarán de

las reacciones de reducción y oxidación, respectivamente. Los huecos oxidan las moléculas de agua a protones y O_2 , y los electrones reducen los protones liberados a H_2 [3].

Con el uso de estos materiales, llamados fotocatalizadores, se trata de imitar el proceso de la fotosíntesis natural. Debe realizarse la ruptura de la molécula de H_2O , generar O_2 y H^+ , y posteriormente H_2 ; y para llevar a cabo esta reacción en agua el potencial redox estimado es de -1.23 eV, por lo tanto puede realizarse utilizando fotocatalizadores con una energía de banda prohibida (E_g) mayor a este valor. Sin embargo, existen otros requerimientos termodinámicos que se tienen que satisfacer, por ejemplo, que la diferencia de energía entre la BC y BV se encuentre en el rango para poder llevar a cabo la reacción. Uno de los fotocatalizadores más estudiados en la reacción de ruptura de la molécula del agua es el TiO_2 . No obstante, la eficiencia fotocatalítica del TiO_2 puro cuando se irradia con luz solar es baja, debido principalmente a la rápida recombinación de los pares electrón-hueco y la incapacidad de usar luz visible debido a su alta E_g (de 3.2 eV).



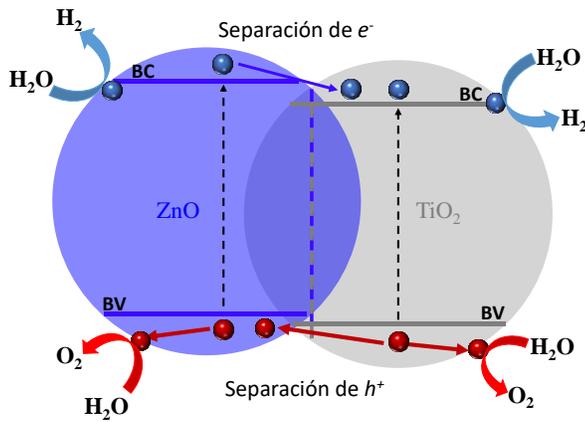
Ruptura de la molécula del agua

Recordando que los electrones y los huecos fotogenerados deben separarse y transferirse a la superficie para llevar a cabo las reacciones, la separación de los portadores de carga fotogenerados es uno de los factores más críticos que afectan la eficiencia de la producción de hidrógeno. Para mejorar este proceso de separación se han utilizado diferentes estrategias que mencionaremos a continuación:

Acoplamiento de diferentes semiconductores

El acoplamiento entre diferentes semiconductores en los sistemas fotocatalíticos fue diseñado para disminuir la velocidad de recombinación de los portadores de carga en

semiconductores individuales. Una buena combinación de los niveles de la banda de conducción y la banda de valencia puede generar una buena separación de los portadores de carga fotogenerados de uno a otro. Tras el acoplamiento, la diferencia de energía entre los niveles de banda de una partícula a su vecino genera una separación espacial entre los electrones y los huecos, disminuyendo la velocidad de recombinación y aumentando su actividad fotocatalítica [4,5].

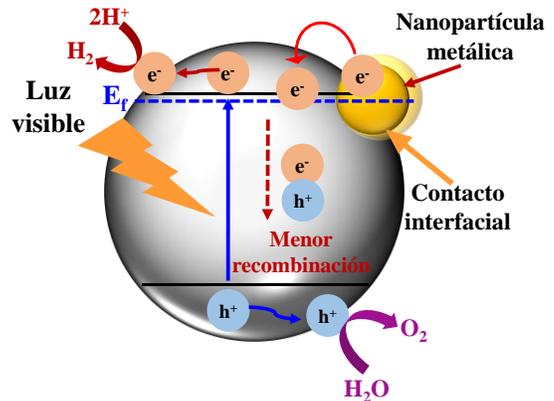
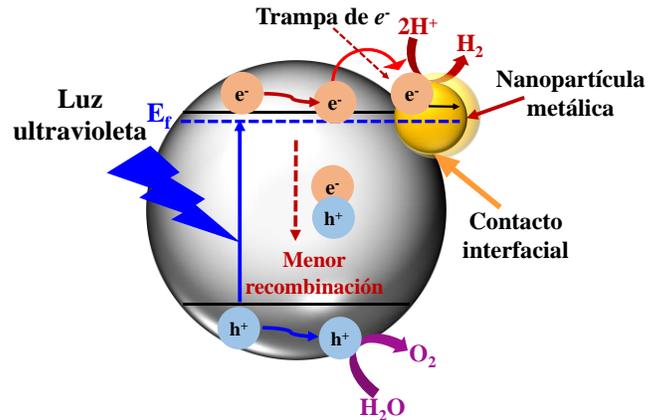


Acoplamiento entre semiconductores para mejorar la separación de los electrones y huecos generados

Modificación de fotocatalizadores con nanopartículas metálicas

Por medio de la modificación superficial de los fotocatalizadores con nanopartículas metálicas es posible modificar el flujo de los portadores de carga fotoinducidos por la irradiación del semiconductor con luz. Esto ayuda a disminuir el proceso de recombinación de los pares electrón-hueco. Además, los metales que presentan un efecto plasmónico (vibraciones específicas de los electrones por efecto de la luz) como el oro, la plata, el cobre y, en menor medida otros metales como el platino, pueden mejorar la eficiencia en la conversión de la energía solar debido a que pueden (i) extender la absorción de luz a longitudes de onda más altas, (ii) aumentar la dispersión de luz y (iii) excitar los pares electrón-hueco en el fotocatalizador, al transferir la energía plasmónica del metal al fotocatalizador. El metal con el que se modifica el semiconductor no forma parte de su estructura, más bien se encuentra en una fase separada (pero en contacto interfacial con el fotocatalizador). El comportamiento de los metales nobles que presentan efectos plasmónicos cuando son depositados en semiconductores es muy curioso: si se irradian

con luz ultravioleta, estos metales funcionan como trampa de electrones (debido a sus excelentes propiedades de almacenamiento de los mismos), por lo que reciben los electrones excitados de la banda de conducción del semiconductor y esto aumenta el tiempo de vida de los pares electrón-hueco fotogenerados (mejorando así la actividad fotocatalítica del compuesto).



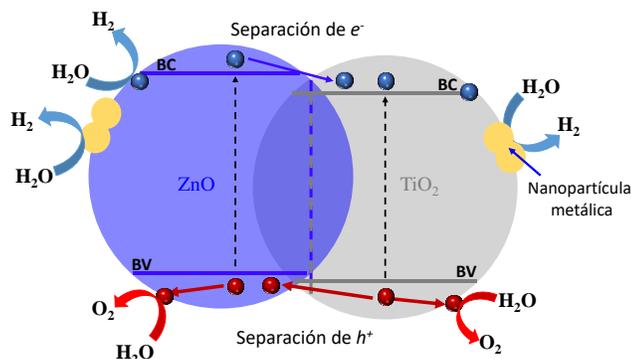
Diferentes tipos de iluminación en fotocatalizadores modificados con nanopartículas metálicas

Algunos metales pueden mejorar la eficiencia del semiconductor para la conversión de energía solar durante la producción fotocatalítica de hidrógeno

Por otro lado, si el fotocatalizador se irradia con luz visible, el funcionamiento del metal noble cambia en la dirección opuesta y este dona los electrones excitados plasmónicamente

a la banda de conducción del fotocatalizador (aumentando así la cantidad de electrones disponibles para realizar el proceso de reducción de la molécula de agua para formar H_2 [4,5]).

Ahora, ¿qué pasaría si combinamos las dos estrategias para la producción fotocatalítica de hidrógeno?



Acoplamiento entre semiconductores modificado con nanopartículas metálicas

Con la posición adecuada de las bandas de valencia y de conducción (al generar un acoplamiento entre dos fotocatalizadores modificados superficialmente con nanopartículas metálicas) se lograría, no solo aumentar la separación de los electrones y huecos fotogenerados durante la iluminación, también se incrementaría la capacidad de reducir a la molécula de agua, debido a la mayor cantidad de sitios activos generados por las nanopartículas metálicas [4,5].

Conclusiones

Los avances recientes en el desarrollo de sistemas energéticos, empleando reacciones con luz solar, han sido numerosos. En particular, la reacción de la ruptura de la molécula de H_2O para obtener H_2 , mediante el empleo de la fotocatalisis.

El desarrollo de fotocatalizadores activos y estables es otro aspecto en continuo crecimiento. Sin embargo, gracias a las estrategias para mejorar la producción fotocatalítica de hidrógeno, cada vez nos encontramos más cerca de lograr la “fotosíntesis artificial”.

Referencias

- [1] Sovacool B.K., Gross A. y Gross A. (2015) *Interface Focus*, 5(3), DOI: 10.1098/rsfs.2014.0089.
- [2] Perathoner S., Centi G. (2020) *Studies in Surface Science and Catalysis*, 179 pp. 415-430. DOI: 10.1016/B978-0-444-64337-7.00021-5.
- [3] Li R., Li C. (2017) *Advance Catalysis*, 60 pp. 1-57. DOI: 10.1016/bs.acat.2017.09.001
- [4] Ramírez-Ortega D., Guerrero-Araque D., Acevedo-Peña P., Lartundo-Rojas L., Zanella R. (2020) *Journal of Materials Science* 55 pp. 16641-16658. DOI: 10.1007/s10853-020-05188-z
- [5] Ramírez-Ortega D., Guerrero-Araque D., Acevedo-Peña P., Reguera E., Calderon H.A., Zanella R. (2021) *International Journal of Hydrogen Energy*, 46 pp. 34333-34343. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2021.08.019



Arte

Esculturas caligráficas y caligramas de Elisa Salas

(Ciudad de México, 1987)

Explorando la plasticidad del lenguaje que tanto la caracteriza, Salas se dio a la misión de construir esculturas histológicas, por su reminiscencia con la estructura de los tejidos orgánicos y la historia que cuenta cada hebra con el solo hecho de haberse formado. Interseca el origen de la forma y la palabra en una metáfora plástica. Su manera de construirlas es con un innovador material llamado ácido poliláctico que es derretido a altas temperaturas en una pluma 3D. Ella piensa que hacer estas esculturas es como dibujar en el aire.

Desde 2019 ha estado trabajando en una colección de esculturas caligráficas de posesión única mediante esta nueva tecnología, cuya característica favorita es su resultado eclipsante. Es decir, la propiedad del material de proyectar sombras efímeras e irrepetibles según quién las observe, durante cuánto tiempo, desde qué perspectiva las mire y con qué iluminación.

Su propuesta artística de caligramas postmodernos se creó dentro de un concepto visual inspirado en el poeta visual griego Simias de Rodas, la caligrafía asiática, los jeroglíficos, los textos islámicos zoomorfos, la escritura cuneiforme sumeria y los caligramas de Guillaume Apollinaire.

De hecho, algunas de las esculturas caligráficas pueden leerse a modo de poema concreto, como los desarrollados en Brasil en el siglo pasado. Ya que el proceso discursivo consiste en la aparición plástica de letras repetidas en cualquier dirección: norte, sur, este u oeste a lo extenso de la configuración dérmica de la escultura. De tal modo que el caligrama tridimensional propuesto por Salas sugiere una interacción sutil al estilo crucigrama multiespacial. Al incursionar en esculturas caligráficas, la artista lleva más lejos el caligrama para hacerle justicia al manifiesto de los poetas malditos, cuyo sueño era sacar a las palabras de los libros y materializarlas al darles

un peso y un lugar en el espacio. Elisa piensa que en la tridimensión del volumen de las palabras y la figura enfática que forman con su sombra, puede aportar algo nuevo al legado de la vanguardia del siglo XX. Así pues, se dio a la tarea de investigar sobre el tema del desarrollo de los pictogramas y jeroglíficos, porque en él encuentra la belleza que siempre buscó: la maximización del significado verbal particular y la universalización de la imagen. Por eso está escribiendo un libro sobre los antecedentes del caligrama para cuyo fin ha pasado temporadas en la Biblioteca Pública Nueva York.

Su técnica de caligramas consiste en composiciones poéticas que dibuja de tal manera que da pie a una imagen. Los temas más recurrentes de sus imágenes formadas por texto son: alebrijes, catrinas, personajes icónicos de la historia de México, caligramas en homenaje a escritores y artistas del mundo, mitología griega, referencias de esculturas en mármol de Cánova o Monteverde y personajes que surgen de su imaginación, como su obra de la Mujer Pájaro.



Salas crea imágenes y esculturas a partir de texto variando la saturación de palabras para narrar las sombras y las luces. Se sirve de la combinación de técnicas plásticas y digitales.

Ha colaborado con marcas como Montblanc, Kipling y Mexicráneos y ha exhibido su arte en lugares de interés internacional como The Museum of Broken Relationships en Los Ángeles junto a Frank Warren y su proyecto Post Secret; el Festival de Poesía de Nueva York 2017; en Wynwood Miami durante Art Basel 2016; La Fábrica de la Aurora en San Miguel de Allende, Distrito de Arte San José del Cabo, y a nivel nacional también en ciudades como Monterrey, Tulum, Todos Santos, La Paz y Oaxaca. En el ámbito internacional, la escritora también expuso su obra en Washington D.C. tras ganar un concurso sobre el tema del arte y la discapacidad. Fue reconocida por la ONU y la CNDH por impulsar el cambio del manual electoral de México para incluir y respetar el derecho al voto de las personas con discapacidad luego del reportaje de Animal Político ganador al Premio Nacional Rostros de la Discriminación 2013.

Asimismo, ha sido ganadora de concursos de filosofía y dibujo en entornos académicos y por marcas como Scribe. Su formación académica consiste principalmente en estudios de Escultura en Carrara, Italia, y El Centro Cultural El Nigromante

en San Miguel de Allende. Talleres de pintura al óleo en México con Pablo Szmulewicz y en Nueva York con Jennifer Gennari; un Diplomado en la Ibero en Arte; en la UNAM El diplomado: "Materialidad Inestable; Diálogos entre Lenguaje, Ciencia y Arte"; por parte del Museo Carrillo Gil: "Arqueología Futurista de las Artes Audiovisuales", estudios del diplomado en Composición Literaria por la SOGEM y por el Centro Cultural Helénico: " Dibujo con el hemisferio derecho del Cerebro". También estudió la carrera de Animación en 3D en la Universidad Westbridge.

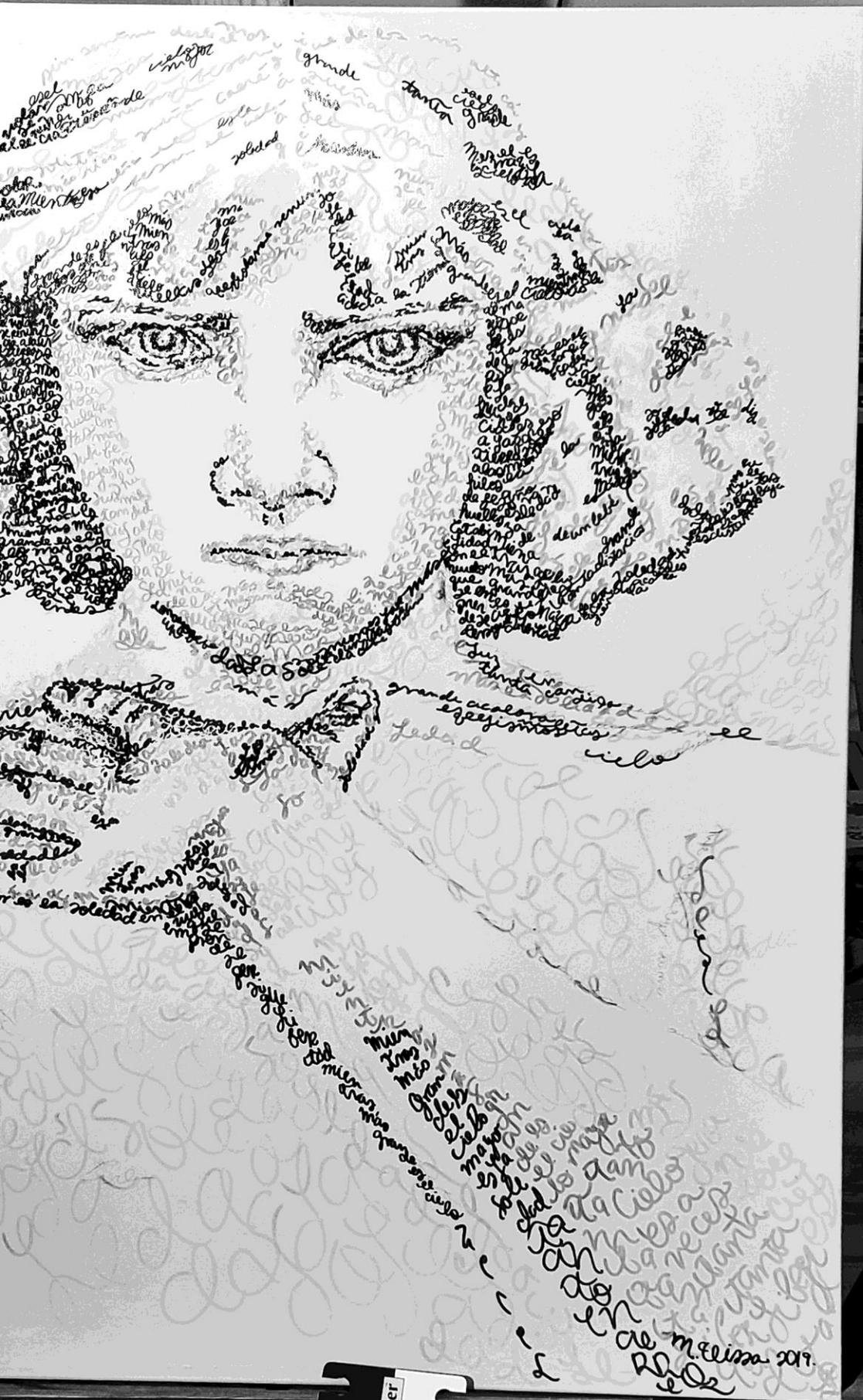
En 2017, un periodista la citó como la desarrolladora más importante del caligrama en México. A su corta edad, su obra ya ha sido presentada en Museos como el MUNAL para la exposición colectiva NO NAME, Museo Franz Mayer, Museo de Pedro Infante, Museo de la Mujer en México, el Museo del Tequila y el Mezcal en Garibaldi y el Museo Filatélico del Palacio Postal de México. En 2020 su obra se presentó en Tulum durante el evento público Art With Me y participó por segunda vez en el proyecto de Milenio Cultura curado por la crítica de arte Avelina Lésper con 2 caligramas realizados con letras de canciones de compositores mexicanos, y sus respectivas entrevistas con los compositores y Avelina que salieron al aire por Milenio TV.

Datos de contacto:

@elisalamonalisa (Twitter)
www.instagram.com/elisalamonalisa (Instagram)
www.elisalamonalisa.com
 CaligramasElisasalas (Facebook)
lamonalisaelisa@gmail.com

Ve su trabajo en las páginas 2, 7, 19, 20, 28, 29, 41, 55, 77, 100, 102 y 104 de esta revista:

- 2: Caligrama de escultura de Artemisa.
- 7: Aunque tú me olvides Colección de Hipócritas o máscaras.
- 19: Histología de una hoja poeta.
- 20: Catrina realizada para el Festival de Día de Muertos de Todos los Santos, Pueblo Mágico.
- 28: Secretos aparecen en la sombra.
- 29: Caballo de Troya en construcción.
- 41: Jaguars Mariposa.
- 55: Chez les poetes.
- 77: Caligrama de escultura del Ángel de Giulio Monteverde, creado con un poema escrito por la artista: "Aunque tú me olvides".
- 102: Santuario, caligrama inspirado en la escultura de Giulio Monteverde, formado por el poema Vuelo en Soledad, de la artista.
- 104: Catrina formada por epitafio.



Scale & Value Finder

de Melissa 2019
Rhe

10 mejores prácticas para impartir clases en línea

Las herramientas de información y comunicación son parte fundamental para ayudar a instituciones escolares a adoptar métodos de enseñanza a distancia. Estos son los mejores consejos para usar estas herramientas en un aula en línea:



1. Deja que te vean

Es importante que tu audiencia te vea para que se sienta más cómoda y que la dinámica sea más natural.



2. Incorpora rutinas en el "aula"

Por ejemplo, reunión matutina, calentamiento, preguntas esenciales, boletín de salida, correo electrónico posterior con respuestas, etc.



3. Utiliza plantillas atractivas

Herramientas como Prezi Video ofrece gráficas divertidas y atractivas, y que puedes modificar fácilmente. Puedes hacer una copia del video de otro profesor/a haciendo clic en «Crear el tuyo» para usar su plantilla.



4. Importa tus presentaciones a otras modalidades

Prezi Video permite importar presentaciones de PowerPoint al software, y utilizar las funcionalidades que la herramienta ofrece para crear un video.



5. Graba en una habitación luminosa

Con la luz frente a ti y un fondo limpio.



6. Contenido bueno y breve

Un video de 5-7 minutos es efectivo, incluso más corto también. Agrega imágenes, referencias para que los estudiantes hagan conexiones con lo que estás enseñando.



7. Comparte enlace a tu video

A través del Sistema de gestión de aprendizaje de tu escuela o un correo electrónico.



8. Utiliza herramientas de videoconferencia

Puedes proyectar en videoconferencias tus presentaciones al mismo tiempo que ves a tu audiencia. Prezi, software para hacer presentaciones funciona con Zoom, Webex, GoToMeeting y Google Hangouts.



9. Sé creativo

Resuelve problemas con estudiantes, resuelve cuestionarios tipo verdadero/falso, proyecta fotos de libros y úsalas en el video para seguir juntos una lectura.



10. Utiliza un título atractivo y descripción clara en el video

En la descripción es recomendable poner el nombre de la clase, la fecha y una oración que describa el contenido. Puedes agregar enlaces relevantes a documentos de tareas u otros materiales que necesitarán.

<https://blog.prezi.com/es/los-10-mejores-consejos-para-comenzar-a-usar-prezi-video-en-tu-aula-en-linea/>



Material de apoyo a la docencia

Lo que la pandemia nos dejó...

Eventualmente regresaremos a clases presenciales. Ni las ciencias experimentales pueden prescindir de los laboratorios ni nuestra naturaleza humana permite privarnos de la experiencia pedagógica de la proximidad física. Pero el día que regresemos ya no vamos a ser las mismas personas, y la tecno-

logía tampoco va a ser la misma. Las clases virtuales, modelos híbridos y videoconferencias llegaron para quedarse. Lo mejor que podemos hacer entonces es aprender, reaprender, innovar y ser más empáticos y tolerantes. Compartimos entonces algunos prácticos consejos para una mejor experiencia en línea.

