

Número 30

Año 2019

Reseña del libro:

“Breve historia de la Química”

Rodrigo Alejandro Arreola Barroso

Noticias: *superconducción, enrejados organometálicos y ADN*

Biografía: José Antonio Alzate y Ramírez

Laura Adriana Moreno Mendoza

Fotografía artística

Carlos Ignacio Mendoza Ruiz

Material de apoyo a la docencia:

crucigrama

Óxidos y telururos de molibdeno por transporte de vapor a corta distancia

Osvaldo de Melo y Guillermo Santana

Desarrollo de piezas porosas de titanio grado 2, con superficies de poros recubiertas con vidrio base sílice

Ángel José Meléndez

La fibra de carbono irrumpe en el automovilismo y Las fibras sintéticas revolucionan el automovilismo

Alan Joel Miralrio Pineda

La fracción material

Astron Rigel Martínez Rosas

La nanotecnología al alcance de tus manos

Marlene Covarrubias Sánchez, Lorena Meza

Puente y Yareli Rojas Aguirre

Degradación electroquímica: una alternativa para el tratamiento de contaminantes emergentes en aguas

Ricardo Enrique Palma Goyes,

Issis Claudette Romero Ibarra, Mario Fidel García

Sánchez y Jorge Gabriel Vázquez Arenas

Pirroles 1,2,5-trisustituidos

Nuevos semiconductores orgánicos

Olivia Monroy, Lioudmila Fomina,

María Elena Sánchez-Vergara, Rubén Gaviño,

Alonso Acosta y Roberto Salcedo



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

Héctor Domínguez Castro

Secretario Académico

Estrella Ramos Peña

Editora responsable

Astron Rigel Martínez Rosas

Coordinador editorial y de divulgación

Comité Editorial:

Patricia Guadarrama Acosta

Diego Solís Ibarra

Ilich Argel Ibarra Alvarado

Larissa Alexandrova

Francisco Morales Leal

Ateet Dutt

Bertha O. Aguilar

Producción:

Editorial IIM

Editor científico: Estrella Ramos Peña

Editor digital: Alberto López Vivas

Fotografía artística: Carlos Ignacio Mendoza Ruiz

Diseño editorial: Astron Rigel Martínez Rosas

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

Presentamos el número 30 de la revista Materiales Avanzados. Iniciaremos, como es habitual, con la reseña de un libro que, en esta ocasión, se ha convertido en un clásico para la ciencia: Breve historia de la química. Este 2019, año internacional de la Tabla Periódica, hemos visto adaptaciones de la obra del gran Isaac Asimov en series televisivas, películas, caricaturas y una que otra mención en cursos de química orgánica o de ciencias; esta vez acercamos a los estudiosos de los Materiales a su historia con este texto. Seguiremos con algunas cuantas noticias trascendentes para el mundo de los materiales y para nuestro quehacer como científicos. Posteriormente, tendremos la brillante pluma de una joven promesa: la física por la UAEMex, poeta y divulgadora científica Adriana (Chica Ciencia) hace una exhaustiva biografía de uno de los pioneros de la ciencia y la divulgación en México, el gran José Antonio Alzate. Barroca e ingeniosa como el personaje que retrata, esta publicación (una exclusiva para Materiales Avanzados) se posiciona como una de las únicas biografías existentes de este importantísimo titan de la historia de la ciencia.

Artículos de lo más diverso componen el cuerpo de nuestra revista, hablando de temas como: novedosos métodos de síntesis de óxidos y telururos de molibdeno; tratamiento de aguas por medio de electroquímica, que es una bastante activa línea de investigación en el Instituto Politécnico Nacional; metodologías que tienen un buen prospecto para crear biomateriales e implantes médicos en un artículo, contribución venezolana, que nos muestra la elaboración de piezas de titanio porosas recubiertas de vidrio base sílice; también hallará un brillante y bellamente ilustrado artículo, apto para todo público, que verdaderamente pondrá *La nanotecnología al alcance de SUS manos*. Contamos con un artículo que expone algunas ideas sobre la filosofía de la ciencia de los materiales y la materialidad como una forma de entender el mundo; también leerá dos apasionantes artículos que los fanáticos del automovilismo y de los autos de carreras hallarán fantásticos. Teoría y experimentación se conjuntan en el artículo sobre pirroles trisustituidos con aplicaciones en el campo de semiconductores orgánicos. La fotografía artística estuvo a cargo de nuestro colega del Instituto de Investigaciones en Materiales, Carlos Mendoza. Al final hallarán material didáctico y de apoyo a la enseñanza, como igual esperamos que algunos de los artículos de este número sirvan de guía docente.

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, editor 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.

Índice

3 Presentación

8 Reseña del libro: “Breve historia de la Química”

Rodrigo Alejandro Arreola Barroso

15 Noticias: Superconducción, enrejados organometálicos y ADN

20 Biografía: José Antonio Alzate y Ramírez

¡Vivan los antihéroes que nos dieron Ciencia!

Laura Adriana Moreno Mendoza

Artículos:

38 Óxidos y telururos de molibdeno por transporte de vapor a corta distancia

Oswaldo de Melo y Guillermo Santana

44 Desarrollo de piezas porosas de titanio grado 2, con superficies de poros recubiertas con vidrio base sílice

Ángel José Meléndez

56 La fibra de carbono irrumpe en el automovilismo

Alan Joel Miralrio Pineda

62 La fracción material

Astron Rigel Martínez Rosas

66 La nanotecnología al alcance de tus manos

Marlene Covarrubias Sánchez, Lorena Meza Puente y Yareli Rojas Aguirre

72 Degradación electroquímica: una alternativa para el tratamiento de contaminantes emergentes en aguas

*Ricardo Enrique Palma Goyes,
Issis Claudette Romero Ibarra, Mario Fidel García Sánchez y
Jorge Gabriel Vázquez Arenas*

76 Pirroles 1,2,5-trisustituidos

Nuevos semiconductores orgánicos

*Olivia Monroy, Lioudmila Fomina,
María Elena Sánchez-Vergara, Rubén Gaviño,
Alonso Acosta y Roberto Salcedo*

86 Las fibras sintéticas revolucionan el automovilismo

Alan Joel Miralrio Pineda

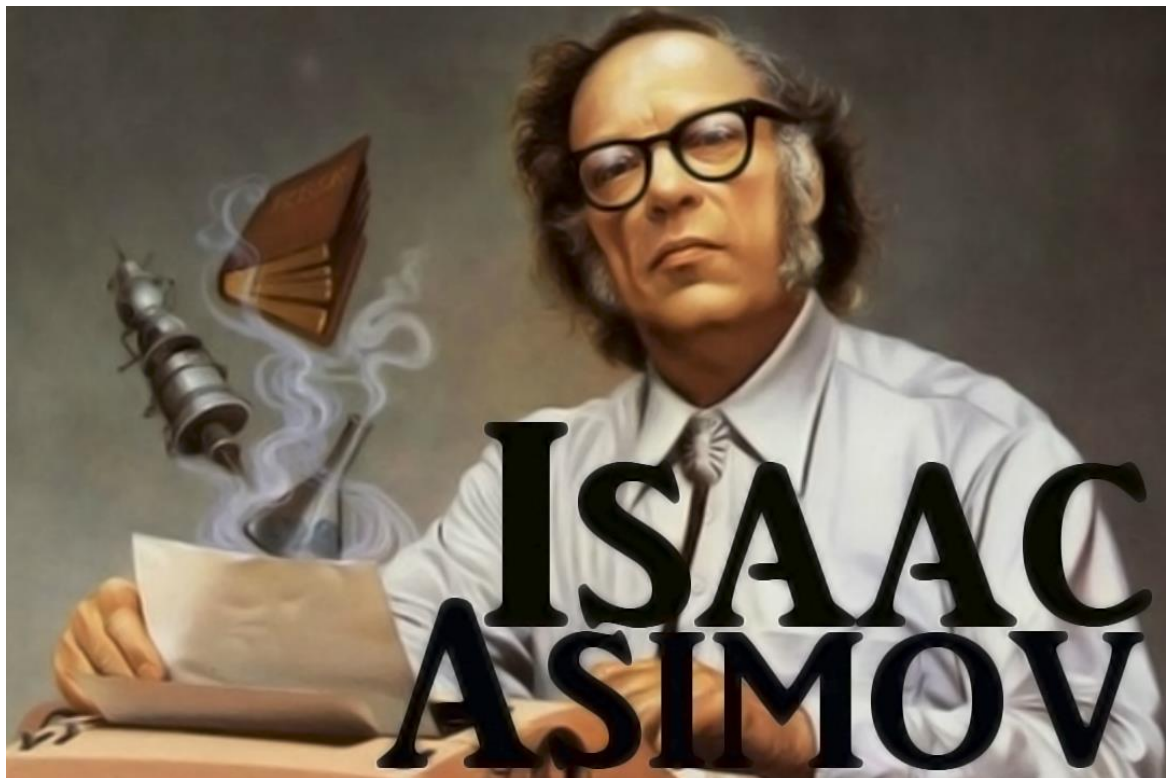
94 Fotografía artística

Carlos Ignacio Mendoza Ruiz

96 Material de apoyo a la docencia

Crucigrama





Reseña

Breve historia de la Química

Rodrigo Alejandro Arreola Barroso

Instituto de Biotecnología, UNAM
Av. Universidad # 2001, Col. Chamilpa.
C.P. 62210 Cuernavaca, Morelos. México
rarreolb@ibt.unam.mx

Acercar a los químicos a su historia

La piedra filosofal se describe como un material que permite crear el elixir de la vida, ¡vida eterna!, o al menos así lo es en Harry Potter. Al inicio de esta saga el villano Lord Voldemort busca obtenerla para dejar de ser sombra y recuperar su poder. Durante siglos, la búsqueda de la piedra filosofal (a la que también se le atribuía el poder de transformar cualquier metal en Oro) fue el motor que dirigió el trabajo de generaciones de alquimistas. Como señala Isaac Asimov en su *Breve historia de la química*, el fruto de esta búsqueda no fue el ansiado oro, cuya abundancia

hubiera hecho colapsar el mercado de este valioso metal, sino el de una ciencia capaz de cambiar el mundo que nos rodea: **la Química**.

En su relato, Isaac Asimov nos lleva de la mano por los descubrimientos e ideas que dieron forma a la Química (sin dejar atrás sus vicisitudes).

La narración explica de forma amena cómo es que las personas empezaron a transformar la materia: primero imitando lo observado en la naturaleza y más tarde, mediante ensayo y error, mezclando las

sustancias a su alrededor hasta obtener compuestos inexistentes en el mundo natural tales como el teflón, las siliconas o el acero.

Saber algo de Química es muy importante en el mundo actual, puesto que estamos rodeados de sustancias químicas: tan naturales como el agua, el oxígeno que respiramos o el veneno mortal de las ranas punta de flecha; otras tantas sustancias son aisladas de fuentes naturales, como el pigmento rojo de la grana cochinilla, el algodón o la Estevia. Algunas sustancias son perfectas copias de aquellas encontradas en la naturaleza, indistinguibles de la fuente natural, tales como la insulina, la vitamina C, los estrógenos. Finalmente están las sustancias químicas que, inexistentes en el mundo natural, fueron obtenidas gracias al ingenio (o la buena suerte mezclada con aguda observación) de sus descubridores: el caucho vulcanizado de las llantas, las sulfamidas usadas como antibióticos o el Nylon.

A pesar de su impacto en la vida diaria, esta es una incomprendida, a veces temida, ciencia. Quizá porque, para explicar las transformaciones de una sustancia en otra, la Química hace uso de los átomos (partículas que no podemos ver a simple vista). De hecho, ¡no pudimos ver átomos hasta bien entrado el siglo XX! Por ello, muchos gigantes de la ciencia creyeron que eran ficciones útiles sin sustento material, cuando los experimentos empezaron a mostrar indicios de su existencia (ya propuesta por Leucipo en la Antigua Grecia). Lo anterior contrasta con lo ocurrido en otras ciencias como la Biología o la Física, cuyas observaciones del mundo que nos rodea bastaron para proponer sus ideas fundacionales, pero eso es adelantarnos demasiado. *Breve historia de la química* inicia en la prehistoria, cuando las personas aprendieron a dominar el fuego, primera

herramienta química con la que contamos como humanidad. Si bien esta parte del relato es universal, la historia narra la genealogía de la industria y de las ciencias químicas actuales, cuyo desarrollo ocurrió principalmente en Europa y cuyos orígenes pueden rastrearse hasta Egipto.



El regalo de Prometeo

Desde un inicio la capacidad de transformar sustancias en otras alargó vidas, ganó guerras, forjó imperios.

Siglos de experimentación por parte de los alquimistas originaron diversos equipos especializados, técnicas y conocimientos; algunos de los cuales fueron recopilados por la publicación de 1556 de Georg Bauer titulada *De Re Metallica* (Sobre la metalurgia), tratado que se distinguió de

los textos alquímicos que le precedieron por su uso claro del lenguaje e ilustraciones de aparatos. Para ese entonces los alquimistas ya habían comenzado a darse cuenta de la futilidad de sus pesquisas (spoiler: no existe la piedra filosofal) y del gran provecho que se podía obtener del conocimiento generado. Habían descubierto ácidos inorgánicos como el ácido sulfúrico, elementos químicos tales como el Azufre, Arsénico y Mercurio, y algunos avances médicos como el uso de sales para tratar enfermedades o el uso de yeso para inmovilizar huesos rotos. La alquimia, sus técnicas y conocimientos, dieron paso a la Química cuando se empezó a **medir** con cuidado los cambios que ocurrían en los materiales.

¡Qué sería de la química sin las mediciones!

La química requirió de mediciones cuantitativas para nacer. Como muestra Asimov, las mediciones permitieron romper con la especulación que se hacía en tiempos antiguos sobre las transformaciones de la materia. Medir nos hizo conscientes de que el aire tiene masa y por lo tanto *es material*. Este importante descubrimiento despertó el interés por atrapar y pesar los hasta entonces considerados *espíritus* que se desprendían de las reacciones químicas y fue además la primera pista que delataba la existencia de los escurridizos átomos. Los gases pueden comprimirse (a diferencia de los sólidos y los líquidos) ¿Cómo comprimir algo a menos de que esté formado por vacío y partículas?

El interés por atrapar los gases y medir la cantidad de materia llevó al científico francés Antoine-Laurent de Lavoisier a construir los cimientos de lo que sería la Química moderna. Le permitió darse cuenta que cuando ocurre un cambio químico *la masa de los reactivos es igual a la de los productos* y con esto formuló la Ley de la conservación de la materia, misma que descartaría la teoría del Flogisto. Antes de esta no había otro modelo que explicara, acertadamente, por qué el hierro se vuelve herrumbre; por qué una vela arde.

¡Qué sería de la química sin las mediciones! Con ellas se descubrieron los compuestos y los isótopos, se diferenciaron átomos de elementos, se encontraron las estructuras de moléculas y se creó el concepto de valencia.



La tabla

La comunicación de la ciencia es esencial. Siempre lo ha sido. Augusto Kekulé organizó el Primer Congreso Internacional de Química ¿Sus frutos?, que todos los químicos comprendieran, ¡al fin!, la diferencia entre *peso atómico*, *peso molecular* y *peso equivalente*. Desde entonces se popularizó, también, la escritura de moléculas orgánicas con esos garabatos que todos identificamos tanto con la Química.

El congreso organizado por Kekulé asentó las bases conceptuales necesarias para la creación de la Tabla periódica. Este monumento científico construido por los químicos resume, en cierta medida, todo el saber químico, ¡hasta incluso la escala subatómica que nadie imaginaba cuando la crearon!

Al entender qué eran los pesos atómicos, los químicos empezaron a ordenar los elementos conocidos con este parámetro. Empezaron a encontrar regularidades en los elementos. Al principio todos pensaron que era una coincidencia y nadie tomó en serio las *Tríadas de Döbereiner* ni las *Octavas de Newlands*.

Tres químicos encontraron la periodicidad química correcta para todos los elementos conocidos, pero sólo uno de ellos, Mendeléiev, convenció a los demás de su modelo. Dmitri Ivánovich Mendeléiev ordenó los elementos de acuerdo a su peso atómico y, como otros, encontró regularidades en las propiedades de los elementos.

Periodische Gesetzmässigkeit der Elemente nach Mendeleieff

Reihen	Gruppe I $R^2 O$	Gruppe II RO	Gruppe III $R^2 O^3$	Gruppe IV RH^4 RO^2	Gruppe V RH^3 $R^2 O^5$	Gruppe VI RH^2 RO^3	Gruppe VII RH $R^2 O^7$	Gruppe VIII RO^4
1	H=1							
2	Li=7	Be=9,4	B=11	C=12	N=14	O=16	F=19	
3	Na=23	Mg=24	Al=27,3	Si=28	P=31	S=32	Cl=35,5	
4	K=39	Ca=40	Sc=44	Ti=48	V=51	Cr=52	Mn=55	Fe=56, Co=59 Ni=59, Cu=63
5	(Cu=63)	Zn=65	Ga=68	--=72	As=75	Se=79	Br=80	
6	Rb=85	Sr=87	Yt=88	Zr=90	Nb=94	Mo=96	--=100	Ru=104, Rh=104 Pd=106, Ag=108
7	(Ag=108)	Cd=112	In=113	Sn=118	Sb=122	Te=125	J=127	
8	Cs=133	Ba=137	Ce=137	La=139	--	Di=145?	--	-- -- --
9	(--)	--	--	--	--	--	--	
10	-- 165	-- 169	Er=170	--173	Ta=182	W=184	--	Pt=194, Os=195(?) Ir=193, Au=196
11	(Au=196)	Hg=200	Tl=204	Pb=206	Bi=210	--	--	
12	--	--	--	Th=231	--	U=240	--	-- -- --

Verlag v. J. Neumann & Neumann, Wiesbaden

¿Qué diferenció a su tabla de modelos anteriores?

Convencido de la importancia de la periodicidad de las propiedades físicas y químicas de los elementos, mientras ordenaba uno a uno los elementos por su peso atómico, tuvo el atrevimiento de reordenar algunos de ellos. Por ejemplo, colocó el Telurio (peso atómico 127.6) antes del Yodo (peso atómico 126.9)

¿Por qué lo hizo?, porque se dio cuenta que podía agrupar en familias a los elementos de todos los periodos si se fijaba en el número de enlaces que pueden formar los elementos en sus compuestos (propiedad denominada *valencia*). Y no solo esto, Mendeléiev dejó algunos huecos en su Tabla porque no encontró elementos con el peso atómico, valencia o propiedades físicas que él consideraba adecuados.

No paró allí, analizando las propiedades de los elementos que se encontraban arriba y debajo de tres de los huecos en su Tabla, propuso las propiedades físicas y químicas de los elementos que debían ocuparlos. Les llamó a estos elementos desconocidos: eka-boro, eka-aluminio y eka-silicio. El mundo volteó a ver a Mendeléiev cuando fueron descubiertos los elementos químicos Escandio, Galio y Germanio, mismos que cumplían muy bien con sus predicciones y que llenaron tres de los huecos en su Tabla.

Interdisciplina

La historia de la química muestra que la ciencia y la tecnología se benefician cuando diferentes disciplinas trabajan juntas: los físicos desarrollaron baterías con las que fue posible desentrañar la naturaleza eléctrica de la materia y aislar, por primera vez, elementos como los metales alcalinos (léase la biografía de Humphry Davy y Michael Faraday en los dos números anteriores de la Revista Materiales Avanzados); los químicos descubrieron que cada elemento tenía una *huella digital* de luz cuando se calentaba a la flama, herramienta que han usado los astrónomos para estudiar la composición de las estrellas; saber que la cantidad de carbono en el acero determinaba su dureza y flexibilidad permitió desarrollar el Convertidor de Bessemer, que revolucionó la industria acerera.

Aunque Asimov hace poca referencia a las vidas de los personajes en su historia (tarea imposible al hacer una *breve historia*), a veces, las vidas de los personajes se asoman para clarificar e ilustrar momentos en la historia de la química. Denuncia, por ejemplo, la muerte de Antoine de Lavoisier en la guillotina durante la revolución francesa (que interrumpió su tarea de unificación y generalización de la química) y la migración temporal de Wilhelm von Hofmann a Londres, desde Alemania (que fortuitamente contribuyó a que la Química Orgánica llegara Inglaterra).

¿Anacrónico o clásico de bolsillo?

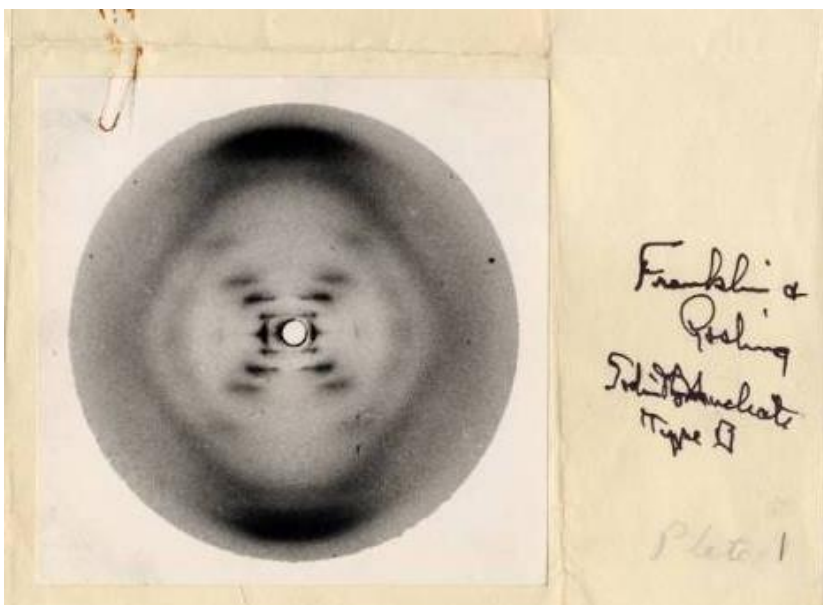
Los radicales cambios sociales hallarán, bajo nuestra óptica contemporánea, verdaderos errores y desatinos en este libro. Debo decir que la historia narrada por Isaac Asimov es una historia construida por los *onvres* (sic). Su relato menciona solo a tres mujeres: Marie Curie, Irene Joliot-Curie y Lise Meitner. Sus nombres aparecen apenas al final del libro, cuando se empiezan a desdeñar los secretos del núcleo atómico y la radioactividad. Asimov también omitió la muy importante contribución de Rosalind Franklin en el descubrimiento del ADN. Ella fue la autora de la famosa placa 51, la “foto” del ADN con la cual James Watson y Francis Crick propusieron su famoso modelo de la Doble hélice. Watson, Crick y Wilkins ganaron el premio Nobel de Química en 1962, ¡apenas 4 años después de la muerte de Franklin y 3 años antes de la publicación de la *Breve historia de la química*! Debido a las circunstancias bajo las que Watson y Crick adquirieron la placa 51, el premio Nobel de Química de 1962 es, a la fecha, uno de los más controvertidos.

No se preocupe si al leer el libro no reconoce la conocida fórmula química del cloruro de sodio, pues ésta está escrita al revés (ClNa y no NaCl). Todas las fórmulas de compuestos inorgánicos en el libro están, anacrónicamente escritas, de acuerdo a la pronunciación en español del compuesto. El lector atento probablemente habrá identificado rápidamente de qué compuesto se trata, mientras que para el neófito pudo pasar inadvertido lo que contradice la actual notación acordada por los químicos. Esta magna errata evidencia que en la traducción y creación de textos de divulgación científica deben involucrarse activamente los divulgadores de la ciencia: personas entrenadas en el manejo del lenguaje, tanto el de la audiencia como el científico (tal como Astron Martínez, la persona que me invitó a colaborar en este número de la Revista).

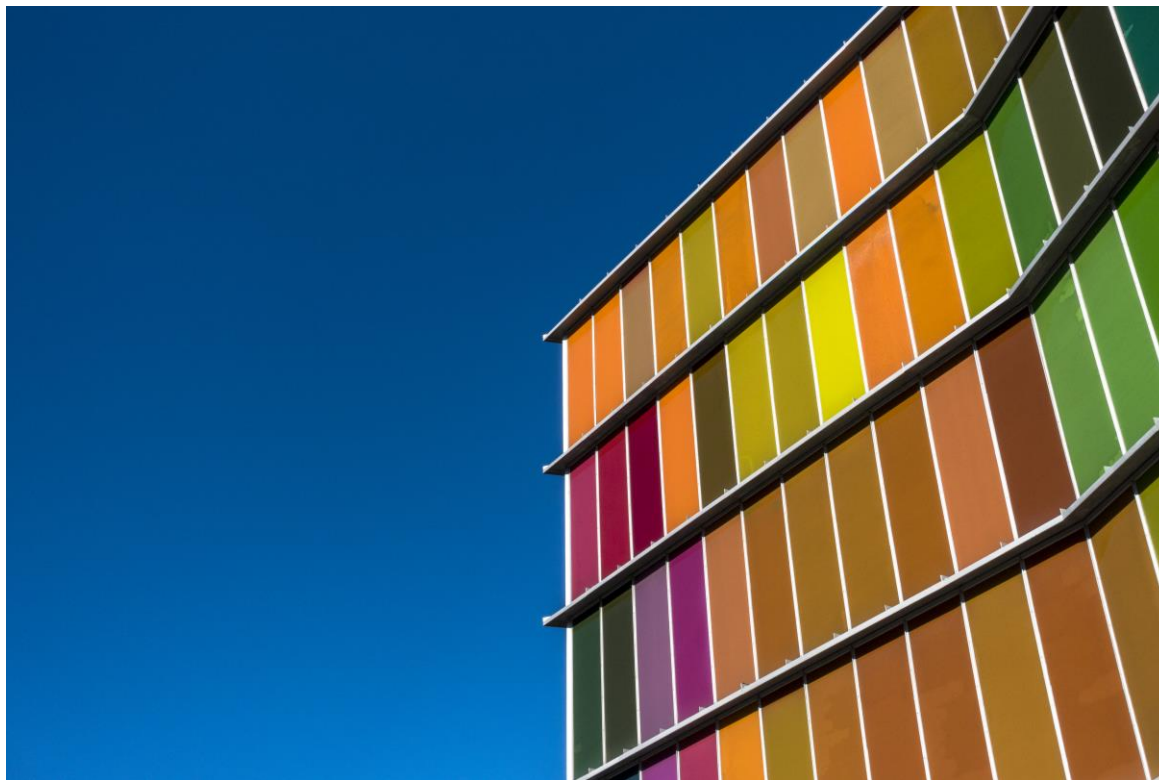
Los aciertos del libro son mayores que sus faltas. La discusión que genera el libro alrededor de los químicos y de la Química aumenta cuantas más veces se lea el libro y se investigue sobre sus personajes y sus investigaciones.

Espero que *Breve historia de la química* acerque más a los lectores a esta ciencia y a los químicos a su historia. Conmigo lo logró.

Steger, Volker. (2012). *Sketches of Science. Photo Sessions with Nobel Laureates. An Art Book on the Occasion of the Travelling Exhibition “Sketches of Science” by the Nobel Museum*. Alemania: Stiftung Lindauer Nobelpreisträgertreffen am Bodensee. ISBN 978-3-939201-04-5







Noticias

Super conducción, enrejados organo- metálicos y ADN

Superconductividad a temperatura ambiente

Por: Miriam García Vargas y Mario Rojas Rodríguez

El estudio de materiales con temperaturas de transición (T_c) al estado superconductor a temperatura ambiente es un gran reto que enfrenta la ciencia de materiales y la física del estado sólido. El descubrimiento de los superconductores cerámicos representó un gran avance, ya que en el $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_8$ sometido a una presión de 40 GPa se observa una T_c aproximada a 160 K (1 atmósfera equivale aproximadamente a 10^5 Pa). Basándose en predicciones teóricas se estudió el H_3S con presiones altas, encontrando que este hidruro sometido a 150 GPa transita al estado superconductor con T_c de 203 K. En esta línea de investigación se ha continuado el estudio de la combinación de metal e hidrógeno, materiales denominados superhidruros.

El superhidruro formado con Lantano (La) se ha estudiado recientemente. El estudio contempló la parte estructural y la medida de resistencia eléctrica en función de la temperatura, sometiendo el material a presiones altas. Los experimentos se realizaron en una celda de diamante con la que se pueden lograr presiones hasta de 300 GPa. El estudio demuestra que el superhidruro de La tiene una estructura cubica centrada en las caras con fórmula LaH_{10} a presiones de 170 GPa. Las medidas de resistencia eléctrica se realizaron con la técnica de 4 terminales, técnica empleada usualmente para medir esta característica en materiales con comportamiento metálico. Las medidas de resistencia eléctrica, en función de la temperatura y aplicando una presión de 195 GPa, muestran una

disminución drástica a 280 K, típica de una transición superconductor. Sin duda esta medición es una fuerte evidencia de superconductividad, sin embargo, se requiere demostrar que el LaH_{10} presenta diamagnetismo a temperaturas menores de la transición. La referencia en donde se pueden consultar los detalles de este estudio es: M. Somayazulu, et al. *Physical Review Letters* 122, 027001 (2019).

Un mundo con MOFs

Por: Jonathan Emmanuel Sánchez Bautista

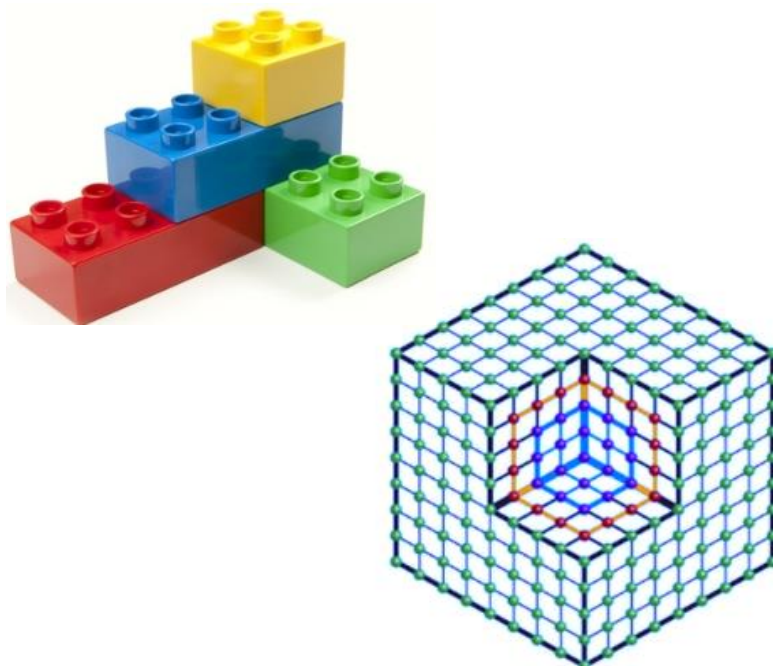
Un enrejado organometálico o MOF (*Metal-Organic Framework*, por sus siglas en inglés) es un compuesto formado por una parte metálica y una orgánica que se acomoda de manera periódica, formando un patrón tipo enrejado. Esto da como resultado propiedades y características únicas y diferentes que pueden variar de acuerdo con la naturaleza de sus componentes.¹

En la actualidad existen una gran variedad de MOFs cuya composición y propiedades se pueden diseñar de acuerdo a una necesidad específica. Una de estas propiedades es su estructura porosa, que nos ha permitido abrir un mundo de posibilidades en diversas aplicaciones, como almacenamiento y separación de gases,² captura de gases de efecto invernadero,³ catálisis,⁴ entre otros.

Una de las publicaciones más recientes acerca de estos materiales fue realizada por N. L. Rosi y colaboradores.⁵ Su investigación se centra en la posibilidad de síntesis y construcción de un super MOF conformado de diferentes capas, cada una con

una aplicación distinta, para obtener un material multifuncional.

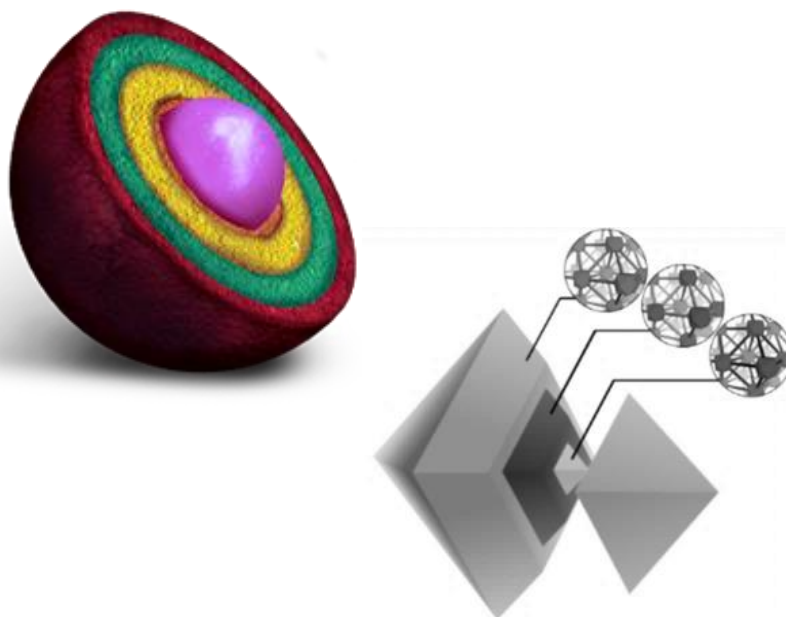
El diseño del super MOF, o bien como lo llaman en la publicación, sMOF (*stratified MOF* o MOF estratificado), se puede entender como bloques de construcción estilo Lego®, donde el metal le da el color y el ligante la forma. Para que cada uno de los MOFs embonen, es necesario que tengan la misma estructura, pero diferente composición. Esto se logra cambiando el metal y el ligante para darle las características deseadas.⁶



Bloques de construcción y representación de sMOF (i ca ce), donde podemos observar las distintas capas del que se encuentra construido en diferentes colores

La construcción del sMOF se inició con un MOF central que se fue recubriendo con capas sucesivas de distintos MOFs, cada una con propiedades y características determinadas. Una forma de visualizarlo es haciendo alusión a una paleta de

dulce mexicana, que está compuesta de capas sucesivas de diferentes colores, texturas y sabores, pero que conservan la forma central inicial.



Representación de paleta visualizando cada una de las capas y representación gráfica de la composición estructural de un sMOF

El objetivo principal de esta investigación era determinar la estabilidad, la composición y el intercambio de componentes entre las capas. Dichas características han sido estudiadas y reportadas individualmente con anterioridad en otras publicaciones.⁷⁻¹⁰ Sin embargo, este trabajo plantea una sinergia de estas características que debe estudiarse para entender su alcance y potencial en nuevas aplicaciones.

En conclusión, la diversidad estructural, composicional y funcional de los MOFs puede ser incrementada exponencialmente para obtener un material sumamente prometedor. Incluso podrían

diseñarse para funciones muy especializadas que nos permitirían realizar captura y secuestro de moléculas específicas para filtros de alta selectividad. Esto nos da el poder de tener lo mejor de dos mundos, ayudar a resolver un problema general con la virtud de la especificidad de este tipo de material.

Referencias

1. D. Farrusseng. *Metal-Organic Frameworks: Applications from Catalysis to Gas Storage*, Wiley VCH, Alemania, 2011.
2. B. Li, H.-M. Wen, W. Zhou, B. Chen. "Porous Metal-Organic Frameworks for Gas Storage and Separation: What, How and Why?", *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 5 (2014), 3468-3479.
3. J. R. Álvarez, P. G. M. Mileo, E. Sánchez-González, J. A. Zárate, J. Rodríguez-Hernández, E. González-Zamora, G. Maurin, I. A. Ibarra. "Adsorption of 1-Propoanol in the Cahnnel-Like InOF-1 Metal-Organic Framework and Its Influence on the CO₂ Capture Performances", *The Journal of Physical Chemistry C*, 122 (2018), 5566-5577.
4. Y.-Z. Chen, R. Zhang, L. Jiao, H.-L. Jiang. "Metal-organic framework-derived porous materials for catalysis", *Coordination Chemistry Reviews*, 362 (2018), 1-23.
5. T.-Y. Luo, C. Liu, X. Y. Gan, P. F. Muldoon, N. A. Diemler, J. E. Millstone, N. L. Rosi. "Multivariate Stratified Metal-Organic Frameworks: Diversification Using Domain Building Blocks", *Journal of the American Chemical Society*, 141 (2019), 2161-2168.
6. H. Furukawa, K. E. Cordova, M. O'Keeffe, O. M. Yaghi. "Multiple Functional Groups of Varying Ratios in Metal-Organic Frameworks", *Science*, 327 (2010), 846-850.
7. J. H. Cavka, S. Jakobsen, U. Olsbye, N. Guillou, C. Lamberti, S. Bordiga, K. P. Lillerud. "A New Zirconium Inorganic Building Brick Forming Metal Organic Frameworks with Exceptional Stability", *Journal of the American Chemical Society*, 130 (2008), 13850-13851.
8. K. E. deKrafft, W. S. Boyle, L. M. Burk, O.Z. Zhou, W. Lin. "Zr- and Hf-based nanoscale metal-organic frameworks as contrast agents for computed tomography", *Journal of Materials Chemistry*, 22 (2012), 18139-18144.
9. D.-X. Xue, A. J. Cairns, Y. Belmabkhout, L. Wojtas, Y. Liu, M. H. Alkordi, M. Eddaoudi. "Tunable Rare-Earth fcu-MOFs: A Platform for Systematic Enhancement of CO₂ Adsorption Energetics and Uptake", *Journal of Materials Chemistry*, 135 (2013), 7660-7667.
10. M. Lammert, M. T. Wharmby, S. Smolders, B. Bueken, A. Lieb, K. A. Lomachenko, D. D. Vos, N. Stock. "Cerium-based metal organic frameworks with UiO-66 architecture: synthesis, properties and redox catalytic activity", *Chemical Communications*, 51 (2015), 12578-12581.

Rey de tu silencio, esclavo de tus palabras... y ADN

Por: Astron Martínez

James Watson escribió uno de los artículos científicos más trascendentes de todos los tiempos. Muchos ubicamos cuál, pues es fácil dimensionar cómo el ADN revolucionó la ciencia para siempre. Toda la ciencia y las ciencias. Tan solo pensemos en cuántos proyectos e investigaciones realizadas en nuestro Instituto de Investigaciones en Materiales (IIM) han utilizado al ADN: como template para fármacos, modelado computacional, pruebas e incluso proponerlo como candidato de un material superconductor si torturamos a un gato sumergiéndolo en un baño de nitrógeno líquido (tal como un investigador emérito de nuestro Instituto, bromea en su entretenido artículo sobre superconductores en el número 29 de la revista Materiales Avanzados).

Pero Watson no hizo este trabajo solo. El coautor del afamado paper, James Crick, y el físico Wilkins, obtuvieron, todos, *su pedazo* del premio Nobel. Todos, pero no todas: Rosalind Franklin fue ignorada. Por misóginos y por su ego, pero de este tema ya se ha hablado muchísimo (hasta por el comité Nobel) y recientemente se revivió la noticia en las secciones de divulgación de The Guardian, NatGeo, Popsi, BBC, Forbes, El País, El Universal e incluso en la parte final de nuestra reseña de libro para este número 30 de la revista del IIM, Materiales Avanzados (revisen también la biografía de Franklin en el número 23 de Materiales Avanzados del 2014, año internacional de la cristalografía). Esta vez hablaremos de cuando Watson no supo quedarse callado.



AMERICAN MASTERS: Decoding Watson

1,883 vistas

42

0

COMPARTIR

GUARDAR

...

A principios de este 2019 salió al aire el documental *American Masters: Decoding Watson*. En él se le escucha decir que:

“hay una diferencia entre el coeficiente intelectual promedio de negros y blancos (refiriéndose a humanos)

yo diría que la diferencia es genética”, esto es lo que respondió tras preguntarle si en algo habían cambiado sus opiniones racistas expresadas en el pasado. El documental completo puede verse en línea, escúchelo usted mismo. Me permitiré enlistar algunos de sus *políticamente incorrectos* comentarios:

- En el *Sunday Telegraph*, en 1997: ***“If you could find the gene which determines sexuality and a woman decides she doesn't want a homosexual child, well, let her”***.
- Sobre el deseo sexual y los latinoamericanos, en 2000: ***“That's why you have Latin lovers. You've never heard of an English lover. Only an English patient”***.
- Durante una conferencia en la Universidad de California en Berkeley, en 2000: ***“Whenever you interview fat people, you feel bad, because you know you're not going to hire them”***.
- En el *Sunday Times* en 2007: ***“all our social policies are based on the fact that their intelligence is the same as ours – where all the testing says not really”***.
- En la revista *Esquire* en el 2007: ***“some anti-Semitism is justified”***.
- La revista *Independent*, del Reino Unido escribió en el 2019: ***“he has said that female scientists won't be taken seriously if they had children, implied women are not good at maths and said that while having more women around in science makes things more fun for the men, they are probably less effective.”***

Quiero finalizar con algo menos deprimente, aunque tenga que desviarme radicalmente del tema para hacerlo. Para ello utilizaré la bella fotografía (siguiente hoja) del doctor Carlos Mendoza, investigador del IIM. Al verla no hago mas que pensar en la domesticación de las plantas, la agricultura y el pináculo de las contribuciones de México para el mundo: el maíz. La domesticación y las técnicas de mejoramiento de cultivos pueden entenderse como biotecnología aplicada. Genética aplicada. Aunque quizá debería aprender de Watson y no hablar de más, particularmente sobre temas controversiales o de interés para la política científica nacional. Nuestro país atraviesa transformaciones en materia de ciencia y tecnología que seguramente quedarán registradas en los anales de la historia. Serán los estudiosos de la historia y la filosofía de la ciencia del futuro quienes discutan las condiciones de nuestro presente una vez que hayamos muerto. Si bien nos va, y no como le tocó (en vida) a James Watson que celebra este año 91 años de edad.



Biografía

José Antonio Alzate y Ramírez

*¡Vivan los antihéroes
que nos dieron
Ciencia!*

*A Raquel Huerta-Nava**

Laura Adriana Moreno Mendoza

“Chica Ciencia” (divulgadora científica)

DiVU: Diversidad, cultura, género,
alimentación y ciencia A.C. México

lamm.005@gmail.com



Se desdobra la calle bajo los pies del peatón que la recorre, la alfombra de asfalto se extiende desde la Avenida de los Maestros hasta Avenida Insurgentes, quien la corta para cambiarle el nombre.

El día es soleado, es fin de semana y tiene tiempo. Entra a un simpático local donde pretende calmar la sed con alguna bebida espirituosa; recuerda que, en otros tiempos, ahí cerquita, a Buenavista llegaba el

tren procedente de Tlaxcala, con barriles cargados del aguamiel que habría de convertirse en pulque “la bebida que suple aquí la escasez del vino”, dice el ahora comensal al ordenar con una sonrisa. Cuando le traen el néctar, levanta el tarro alegre, pues de suerte tiene vista a la calle donde una placa que anuncia el nombre de la avenida le da la oportunidad, al menos simbólica, de brindar con el autor de la cita.

Del maguey, del pulque, la grana, las golondrinas y más escribió José Antonio Alzate, el personaje que hoy nos ocupa. Ciertamente para ganarse un lugar entre tanto intelectual que engalana la colonia Santa María la Ribera, hizo bastante durante las seis décadas de la vida que aquí se narran, y si bien no se caracterizó por ser un prócer particularmente carismático, ni el inventor de vida interesantísima o el científico riguroso, se las arregló para convertirse en **el símbolo de la cultura de su tiempo**.

Tal y como pasa con todos, *su historia* inicia con otros. Desde Irún Iruanzú, en las Vascongadas, llegó un día la familia formada por Juan Alzate, Josefa Garro y su hijo Juan Felipe, a establecerse en las cercanías del valle del lecho del lago de Chalco, zona próspera por su riqueza agrícola. En 1733, cuando Juan Felipe ya empezaba a hacer sus propios negocios, la norma dictaba que era hora de encontrar una esposa de buena familia con quien iniciar la propia; encontraría a la indicada casi a las faldas del volcán Popocatepetl, en Santa María Ozumba —poblado famoso por su tianguis—. María Josefa, de muy honorable genealogía, cosa muy importante para la época, vivía con sus padres, Don Cristóbal Ramírez de Santillana y Lugarda Pérez, dueños de una hacienda de labor.

Nadie vio inconveniente en la unión, Juan Felipe se mudó a Ozumba y se casaron el 24 de febrero de 1737 recibiendo por ello una dote por parte de Don Cristóbal de 3529 pesos y 6 tomines. Nueve meses después, el 20 de noviembre, cuando reinando España estaba Felipe V y gobernando la Nueva España el arzobispo-virrey Juan Antonio de Vizarrón, vino al mundo un niño, nacido en el corazón de la Villa de Ozumba, bautizado al día siguiente como **Joseph Antonio Alzate**, apadrinado por sus tíos José Marulanda y Estefanía Ramírez. El niño nació y creció en una casa ubicada en lo que hoy es el frente sur del Jardín Municipal de Ozumba, cercada por las calles Nicolás Bravo, Benito Juárez García y la Avenida que hoy lleva su nombre —edificación que resultó dañada por el sismo del 19 de septiembre de 2017—.

No es difícil imaginarlo en aquellos felices años observando a las aves, explorando los pequeños manantiales donde pescaba ajolotes, atesorando ramitas de plantas de la región y piedras volcánicas en los bolsillos, y no es difícil imaginarlo porque escribiría sobre todas aquellas maravillas de la naturaleza muchos años después. A pesar de ser un niño delgado, “de genio retirado”, decían para describir su carácter reservado y su inclinación a los estudios, al pequeño *Joseph* le gustaba jugar con los hijos de los labriegos, quienes —con toda probabilidad— le enseñaron su lengua y él, que disfrutaba de observarlo todo, se embebía y admiraba por sus costumbres.

Don Juan Felipe era buen administrador, entre las propiedades de la familia estaban la hacienda agrícola donde *Joseph* vivía, una casa de campo en San Antonio de las Huertas y dos propiedades en la Ciudad de México, una en San Agustín de las Cuevas

y otra sobre la calle que iba de la Iglesia de Santa Inés a la Iglesia de la Santísima Trinidad —hoy Moneda—, frente al Real Hospital del Amor de Dios, donde se trataba “el mal de bubas”, como coloquialmente se denominaba a la sífilis —la edificación alberga en nuestros días la Academia de San Carlos—, propiedad a la que se mudaron en 1747 tras la muerte de Don Cristóbal. La familia abrió una de las cuarenta y ocho panaderías que existían en la ciudad —convenientemente el trigo para el pan venía de los molinos de Chalco— y de inmediato *Joseph* fue inscrito en el Colegio de San Ildefonso.

Ilustrados como eran, los padres del muchacho apoyaron su amor por el saber, tal vez la memoria familiar recordaba con cariño a cierta tía, la tía Juana, que cuando niña se fijaba como meta el aprendizaje de cierta lección y si fallaba en instruirse ella misma se castigaba contándose los rizos, pues no le parecía correcto tener una cabeza llena de cabellos más no de ideas¹, y le alentaron dedicarse a una profesión que era propicia para el estudio: el sacerdocio. A los trece años de edad, *Joseph* ingresó a la Real y Pontificia Universidad de México, primero a la facultad menor, que era de Artes, donde obtuvo el grado de bachiller el 12 de enero de 1753, tras casi un lustro de intenso estudio. Ese año, mientras nuestro personaje seguía disfrutando de su vida como estudiante, ahora cursando otra carrera en una facultad mayor, nació su hermana Joaquina Mariana.



Sobre la calle que va de la Iglesia de Santa Inés a la Iglesia de la Santísima Trinidad, a un costado de la Academia de San Carlos, la familia Alzate se mudó desde Ozumba en 1747-

¹ Alzate era sobrino nieto de Juana de Asbaje, quien en «*Respuesta a Sor Filotea de la Cruz*», relata que este era el

castigo que se autoimponía cuando no se aprendía las lecciones.

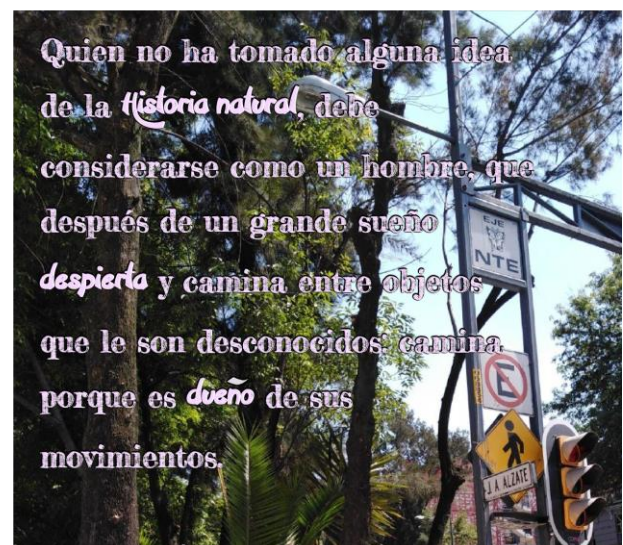
Emprendió uno de sus primeros proyectos a los dieciocho años de edad, cuando se dedicó a la búsqueda de los manuscritos de Francisco Hernández, protomédico del siglo XVI al servicio del Rey Felipe II, textos que formaban parte de la primera expedición científica ultramarina efectuada en nuestro territorio y describían a más de 400 especies de animales, plantas y minerales usados en medicina por los mexicanos. Rastreó la *obra hernandina* por diversas bibliotecas con ayuda de fray Agustín de Morfi, Diego José Abad y Francisco Javier Clavijero; este trabajo sería génesis de publicaciones, encargos y anotaciones que *Joseph* haría años después.

Por fin, el 30 de abril de 1756, el chico se graduó del bachillerato en Teología y continuó sus estudios sacerdotales. En la universidad se leían los textos canónicos y la filosofía aristotélica en latín, pero estos conocimientos no eran suficientes para satisfacer la curiosidad de *Joseph* ni respondían a todas las preguntas que su espíritu inquisitivo se hacía sobre la naturaleza y su movimiento, así que ya no aspiró a obtener el grado de licenciado, pues la educación peripatética no era lo suyo; su pensamiento se torna antiescolástico y encuentra un refugio intelectual en la experimentación y sus propias lecturas. Tras aprender de *geometría, filosofía y teología* en la escuela, como autodidacta estudió física *experimental y matemática*, lo que lo llevó también a ser capaz de fabricar sus propios instrumentos. El cultivo de las ciencias naturales y exactas, la razón y la verdad sobre todas las cosas, fueron los valores que José Antonio y Ramírez de Santillana defendería durante toda su vida, sin importarle mucho el costo.

Para facilitarle una vida entregada al conocimiento, Juan Felipe decidió invertir en su hijo y el 18 de

octubre de 1758 gravó sus casas en la Ciudad de México, aportando con este dinero 3000 pesos para fundar una capellanía en la que *Joseph* se desempeñara como sacerdote y tuviera una renta de 150 pesos para sobrevivir. El muchacho obtuvo así en 1760 su primer grado clerical, la tonsura, incorporándose entre 1761 y 1766, con carácter de presbítero domiciliario al Arzobispado, evitando el ejercicio parroquial, dándose el tiempo para el trabajo científico y la lectura.

¿Qué leía Alzate? Entre sus variadas lecturas a lo largo de todos sus años encontramos al conde de Buffon, Nicolás Copérnico, William Cullen, René Descartes, Galileo Galilei, Antoine Lavoisier, Carlos Linneo, Alexandre Savérien, Benjamin Franklin y Willem's Gravesande, entre varios otros. Como muchos sabios de la época, Alzate forma parte de la ruptura entre la forma filosófica de estudiar a la naturaleza —y enseñarla— y hacer ciencia ya propiamente, valiéndose de las matemáticas. Leyó por tanto a Isaac Newton, a la física, matemática y filósofa Émilie du Chatelet —quien estudió y tradujo los trabajos tanto newtonianos como los de Gottfried Wilhelm Leibniz— y a Benito Jerónimo Feijoo, quien divulgaba la obra del científico inglés en España.



Trabajando en el Arzobispado para Francisco Antonio de Lorenzana, le dedica el *Nuevo mapa geográfico de la América septentrional* y empezó a preparar el *Atlas eclesiástico del Arzobispado de México*. Su hermana, Joaquina Mariana, había fallecido a principios de ese año, en febrero, pero otro evento relevante sucedería en 1767: el 26 de julio presentaría al Cabildo el primer proyecto para el bien público de los muchos que habría de llevarles: **«Proyecto para desaguar la laguna de Texcoco y las de Chalco y San Cristóbal»**. Recordemos que oriundo de la región como era y vecino de la Ciudad de México, entendía el riesgo constante de inundación que la amenazaba; presentó un cuadernillo acompañado de un mapa — que se dio a conocer al público y a la comunidad científica hasta 1890 por la sociedad que llevaba como homenaje el nombre de nuestro presbítero, Alzate no proponía un desagüe completo, sino solamente del excedente del vital líquido a comparación de las lluvias regulares, pues consideraba que drenar por completo las aguas dañarían a la población por los costos de la empresa y a quienes tenían a la pesca como su actividad económica principal.

El Cabildo ignoró la propuesta, como ignoraría otras tantas: el 29 de abril lleva una memoria sobre el cultivo del cacao y en diciembre les escribe en otra memoria sobre las mejoras a la construcción de las cañerías que abastecían de agua a la ciudad, incluyendo una ilustración del método. ¿Fue el 68 un año difícil? **A los 30 años de edad, el 12 de marzo, iniciaría su carrera como periodista científico al publicar el primer número de su «Diario Literario de México»**. En un tiempo donde la ciencia se escribía en latín o en la lengua de los filósofos naturales ingleses o franceses, Alzate al ser

políglota, traducía los textos y publicaba siempre en español, con lenguaje sencillo, textos breves y comprensibles para sus lectores.



Como objetivo principal, el *Diario...* perseguía servir a la nación española y al pueblo novohispano comunicando periódicamente contenidos científicos y de otras artes, pues consideraba que el conocimiento científico elevaba la calidad de vida de la población, que era un bien público, y una de sus herramientas para hacerlo era la crítica y propiciar la conversación y el debate. Un ejemplo de ello es la descripción que incluye en el Número 5 del *Diario...* sobre la “Máquina de fuego” como alternativa al ya rudimentario uso del malacate para desaguar las minas.

Las inundaciones en las minas eran un grave problema, muy perjudicial para esta industria pues sacar el agua era muy caro, requería de conocimientos de geometría subterránea — medición de minas— que pocos expertos poseían y por tanto yacimientos completos se perdían. Durante un par de siglos el método de desagüe más usado era el malacate, un aparato de mecánica muy simple, constituido por una polea que movía una serie de recipientes de cuero que subían el agua

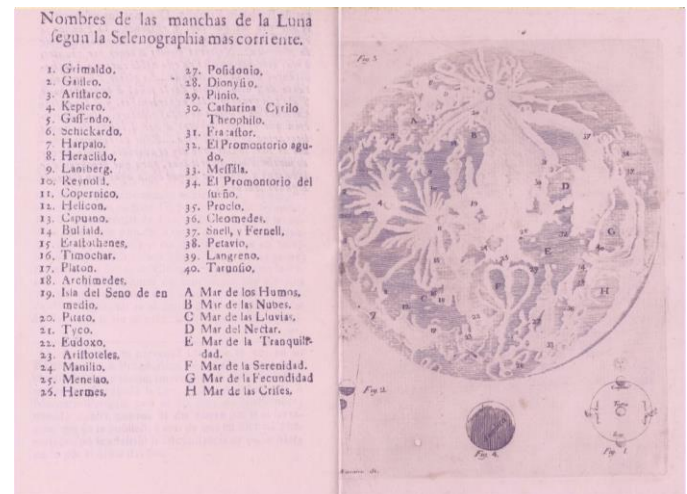
desde el fondo hasta los vertederos; tan tosca era la máquina que se valía de la fuerza de hombre o animales, normalmente caballos, para operar. Alzate presenta a la sociedad novohispana en su periódico la *máquina de fuego*, invención del marqués de Worcester, artefacto que bombeaba el agua impulsado por vapor. Su crítica al uso del malacate terminaría siendo el centro de una polémica varios años después, situación a la que nuestro sabio no sería ajeno a lo largo de su carrera.

La primera empresa literaria de *Joseph* se vería truncada ese mismo año, el 15 de mayo, cuando tras la circulación del Número 8 del *Diario...*, sería censurada después de que apareciera en sus páginas una crítica al teatro español en una carta escrita por un amigo. Su licencia para publicar fue cancelada por el virrey Marqués de Croix, so pretexto de contener “*proposiciones ofensivas y poco decorosas a la ley y a la nación*”. ¿Sería esto preludio de la relación que el polígrafo tendría con los representantes de la corona?

Eso no impidió a *Joseph* seguir atareado investigando. Uno de los problemas a los que se enfrentaban los sabios novohispanos era a la falta de instrumentación para efectuar sus observaciones con la calidad y exactitud equiparables a sus cálculos; los relojes y telescopios eran fabricados en Europa, en países como Francia e Inglaterra y rara vez llegaban los mercaderes a ofrecerlos en las colonias; tampoco era posible crear los propios con las características deseadas pues de este lado del Atlántico no vivían los relojeros y técnicos expertos que supiesen fabricar las delicadas piececillas.

² A los gabinetes científicos se les llamaba “cuartos de maravillas” o “gabinetes de curiosidades” y muchas de esas colecciones llegaban a conformar el inventario de los primeros museos de historia natural alrededor del mundo.

Sin embargo, poco a poco Alzate enriqueció su *cuarto de maravillas*²; **entre sus instrumentos que ya bien consiguiera o fabricara, había un electrómetro, un hidrómetro, un termómetro, un micrómetro, un barómetro y telescopio, e incluso tenía instalado un pequeño observatorio en lo alto de su casa.**



Esquema de las manchas lunares, publicado por Alzate en 1770

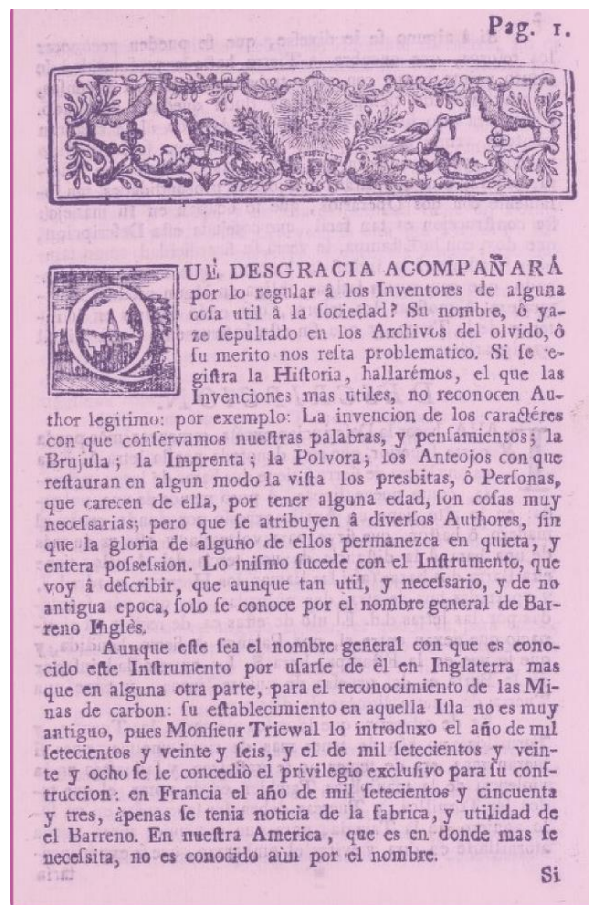
¡Vaya que tanto trabajo rendiría frutos! En 1769 se esperaba un evento astronómico de suma importancia: los cálculos matemáticos habían predicho que el día 3 de junio sería observado el paso de Venus frente al Sol, viéndose en su totalidad desde California. Este fenómeno no solo era prueba de la validez de la teoría heliocéntrica, sino que existía la hipótesis de que observando el paso de Mercurio o de Venus por el disco solar, era posible calcular la distancia absoluta entre el astro solar y nuestro planeta. Alrededor del globo se organizaron

Alzate donó parte de su colección al Museo de Longinos, que habría de convertirse años después en el Museo Nacional de Historia Natural de México.

expediciones astronómicas para recabar la mayor cantidad posible de mediciones para así obtener datos concretos y exactos. Edmund Halley ya había estimado que la observación del tránsito de Venus podía dar mejores resultados utilizando el método del paralaje solar y la tercera ley de Kepler. La Nueva España, siempre productora de científicos, tenía sabios más que capaces de estudiar el fenómeno y se encargó a uno de ellos, Joaquín Velázquez de León, amigo y colega de Alzate, que emprendiera la marcha a California, lugar donde ya había efectuado otras observaciones y apoyara a la expedición europea encabezada por el abate francés Jean-Baptiste Chappe d'Auteroche. Velázquez de León era catedrático de la Real y Pontificia Universidad de México, donde enseñaba la asignatura de Astronomía y matemáticas, luchando por modernizarla pues los temarios aún estaban plagados por la astrología. Para este evento, se puso de acuerdo con José Ignacio Bartolache y *Joseph* — a quienes el cabildo encargó desde mayo también efectuaran la observación desde la Ciudad de México, donde se vería parcialmente— para realizar mediciones que aumentaran la certeza de los datos desde lo alto del edificio del Ayuntamiento. **Este momento se considera el inicio formal del estudio científico de la Astronomía en nuestro país, ocasión que no pudo carecer de anécdotas.**

Existía cierto desprecio de los europeos a lo hecho y estudiado fuera de sus potencias y Chappe no parecía estar exento de dichos prejuicios. Velázquez de León, conocedor de la zona, se presentó con él y mientras el segundo decidió observar desde un campamento donde ya había trabajado, el abate siguió su camino hasta Cabo San Lucas. Las mediciones fueron efectuadas pero tuvieron un curioso destino: un brote de la enfermedad que

Alzate reportó como “*matlazahuatl*” o “vómito negro”, azotó la zona, contagiando a los exploradores y acabando con la vida de Chappe el 1ro de agosto, sin que éste pudiese ordenar sus anotaciones o dar crédito correcto a los novohispanos que colaboraron en la tarea. Velázquez de León fue a Cabo San Lucas para recuperar las pertenencias e instrumentos de los científicos, artefactos hermosos y de alta tecnología, a sabiendas de que en México no existían aparatos de esa clase, los quiso comprar. Siendo la Academia de Ciencias de París su dueña, no fue posible, así que los envió en un barco con destino a Europa, navío que naufragó poco después de salir del puerto de Veracruz.



Página de Descripción del barreno inglés... impreso con caracteres fabricados en la Nueva España en 1770

Si bien los instrumentos se perdieron para siempre, lo que sí vio buen puerto en Francia, fueron las anotaciones alzatianas, quien envió a la Academia una carta, **escrita en español**, con su *Nuevo mapa geográfico de la América septentrional* y una caja con muestras de rocas, plantas, artrópodos, otras *curiosidades* de nuestra tierra y su descripción. **Les habló del maíz, del maguey, cascalote, huizache, sabino, cacahuete, peces, las llamadas “piedras campana”, entre muchas otras maravillas naturales no estudiadas aún por los naturalistas europeos.** Gracias a todo esto, al reconocimiento de que de haber tenido el mapa antes se hubiesen evitado muchos dolores de cabeza y a tanta información detallada con tal cuidado, **Joseph fue admitido en la Academia de Ciencias de París** — como miembro corresponsal de Alexandre Guy Pingré, propuesto por miembros como el químico Jean-Antoine Claude y el astrónomo Jérôme Lalande—, de la cual formaría parte de 1771 a 1786, llamando la atención que fue de los pocos miembros honrados con el nombramiento que no participaron en la famosa Misión Geodésica Francesa o sin haber siquiera salido de su patria.

También en 1769, Alzate realizaría las observaciones del tránsito de Mercurio el día 9 de noviembre, de la aurora boreal que se observó en nuestro país —vista en la Ciudad de México, Guanajuato, Veracruz, San Luis Potosí, Puebla, Guadalajara, Zacatecas y Oaxaca—el 14 de noviembre de 1789, evento debatido por los sabios de la época gracias a la existencia de publicaciones periódicas, y del eclipse lunar del 12 de diciembre sobre el cual escribió en un bonito cuadernillo dedicado al Rey, que también se iría a la *Academia de Ciencias*, especificando su metodología, mediciones y cálculos.

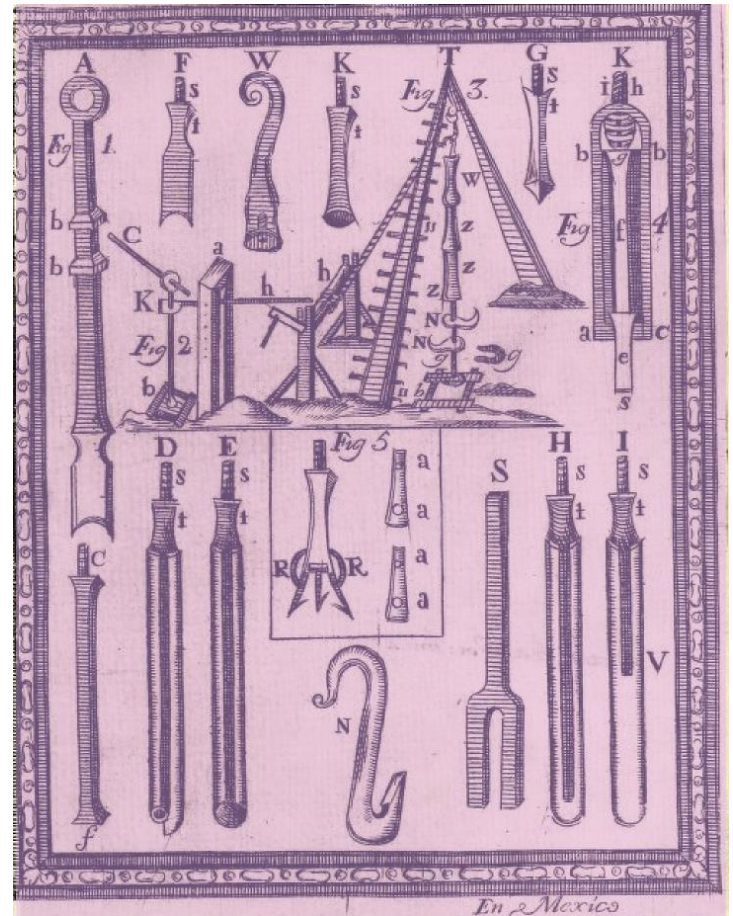


Diagrama dibujado en *Descripción del barreno inglés*

Prolífica era su pluma: en 1770 publica su *Descripción del barreno inglés, instrumento muy útil y necesario para los mineros, y labradores*, grabado por la imprenta de José de Jáuregui, que utilizaba caracteres fabricados en la Nueva España, por Francisco Javier de Ocampo en una época en la que aún era costumbre que la maquinaria y el material tipográfico se importara de la Península. Nuestro personaje, considerado también el padre del ensayo científico en México escribe en *Descripción...*:

Lámina de las ruinas de Xochicalco, publicada por Alzate en 1791



«¿Qué desgracia acompañará por lo regular a los Inventores de alguna cosa útil a la sociedad? Su nombre, o yace sepultado en los Archivos del olvido, o su mérito nos resta problemático. Si se verifica la Historia, hallaremos el que las invenciones más útiles, no reconocen autor legítimo, por ejemplo: la invención de los caracteres con que conservamos nuestras palabras y pensamientos; la brújula, la imprenta, la pólvora, los anteojos con que restauran la vista los présbitas o personas que carecen de ella por tener alguna edad, son cosas muy necesarias, pero que se atribuyen a diversos autores, sin que la gloria de alguno de ellos permanezca en quieta y entera posesión.»

Tal y como dejaba ver *Joseph* en cada uno de sus escritos, era su intención hacer del conocimiento de todos, los nombres, aparatos, costumbres y demás información de utilidad; emprendería en 1772, el 26 de octubre, su siguiente periódico científico al que llamó «*Asuntos varios sobre ciencias y artes*» que

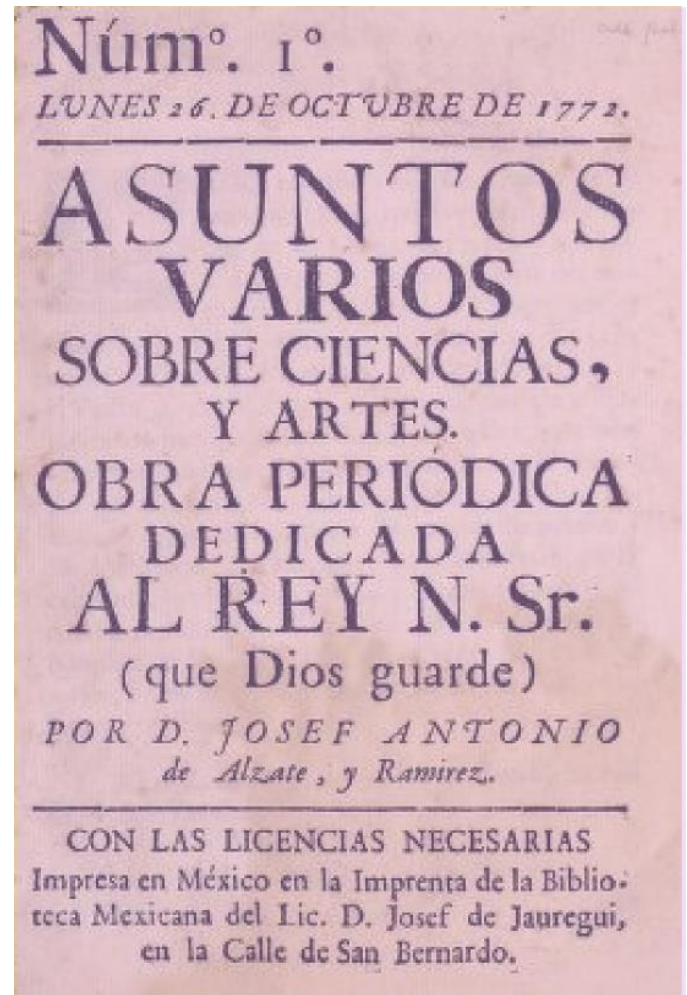
además de hablarnos del cultivo del añil, del gorgojo y de la costumbre del baño frío o caliente en maravillosos textos, es en esta publicación donde escribe un ensayo donde defiende la legalización de los *pilpitzintlis* entre los indígenas —«o sea la mariguana, la mota, que eso significaba la divertida palabreja», diría el divulgador y poeta Luis González de Alba³—, alegando además del atractivo de lo prohibido, la falta de injerencia del diablo en los efectos provocados y enfocándose en la utilidad médica del consumo.

Cerrando con un párrafo sobre una máquina para el control de tuzas y topes, que proponía se exportara a Europa, incluida en un suplemento sobre varios *Consejos útiles*, en 1773 saldría el último número de *Asuntos varios*... cuando por algún motivo desconocido para nosotros, se le retiró la licencia para su publicación. Al menos ese año habría de recibir otro honor: gestada en tertulias de 1764 se fundó la Real Sociedad Bascongada de los Amigos del País, y los Alzate, padre e hijo se convirtieron en

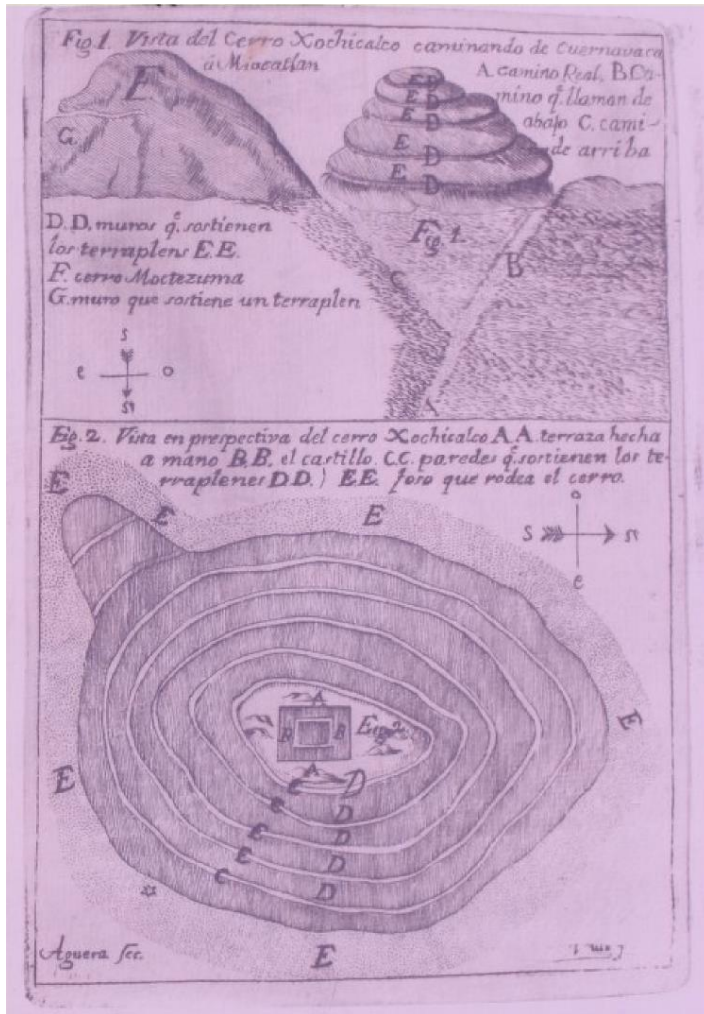
³ El divulgador Luis González de Alba escribió en un par de ocasiones sobre Alzate en su columna «La ciencia en la calle».

dos de los 500 miembros de la misma que habitaban en México; más allá de ser paisanos, los socios destacaban en los ámbitos social, económico e intelectual novohispanos. Registrado Juan Felipe como “hacendado y comerciante” y *Joseph* como “literato, sacerdote y científico”. Entre los nombres de otros miembros destacados que eran partícipes de la vida social y científica del presbítero, podemos mencionar al virrey Bucarelli, al conde de Tepa o a Melchor de Peramás, secretario de cámara del virreinato y mecenas de nuestro amigo.

Probándose útil el trabajo del científico y sus interesantes contactos, el funcionario José Antonio de Areche le pide en 1774 lo que se convertiría en su trabajo más conocido: la memoria de la grana cochinilla, insecto hemíptero amante de los nopales, altamente demandado en aquellos días para la pigmentación de telas. Proyecto relativamente pequeño al principio, se volvería empresa más larga por encargo del gobierno de Bucarelli, que aunque no le dio compensación económica, *sí le dio todo su apoyo*; no fue el único: el conde de Tepa —quien al igual que Bartolache tenía una licencia especial para tener *libros prohibidos*— autorizó a *Joseph* usar su biblioteca y Peramás le *permitió* conservar, mientras estudiaba, el microscopio que el científico —Alzate— construyó bajo su supervisión —y probablemente inversión—. Al finalizar el proyecto, listo para publicarse en 1777, el microscopio volvió a las manos de Peramás y la *Memoria sobre la naturaleza, cultivo y beneficio de la grana* vio la luz pública, siendo ampliamente elogiada en España.



1777 fue un año de mucha actividad, el 27 de junio Bucarelli le encarga un informe sobre el azogue y el 14 de octubre lo premia con 500 pesos por una memoria que presenta al Real Tribunal de Minería donde explica el uso del álcali volátil —amoniaco— para desvanecer los gases fétidos y dañinos que emanaban de las minas, y además, efectúa su primera exploración en Xochicalco, todos eventos relevantes poco después.



—había minas en Guanajuato, Zacatecas, Pachuca, Sombrerete, San Luis Potosí, Guadalajara, Durango...— y su transporte se complicaba, la razón indicaba que se emprendiera una expedición para buscar minas de cinabrio en el territorio. En sus trabajos anteriores, Alzate ya había obtenido muestras de mercurio de la mina de Tlalchiapa —Tetela del Río, en Guerrero—, así que cuando los expertos exploradores enviados desde las minas en Almadén pisaron suelo mexicano, solicitaron a Bucarelli que *Joseph* los acompañara en la comisión, cosa a la que el virrey cedió pagando un sueldo al científico —¡al fin!— de 8 pesos diarios y ayuda de costa mientras las exploraciones duraran. El líder del equipo, Rafael Andrés Helling y el contador Juan Antonio Posadas fueron quienes reconocieron en Alzate no solo la pericia científica necesaria para compartir el liderazgo en la aventura, sino que apreciaron su conocimiento de la patria novohispana y las buenas relaciones que tenía con los indígenas. Como de costumbre, entregó, redactados con sumo cuidado, los resultados recabados así como un *Mapa de viaje*.

El azogue o mercurio, se obtenía principalmente del cinabrio, mineral que está compuesto en un 85% por mercurio y 15% por azufre, y era relevante para la corona pues con él se procesaba la plata. El sinsentido radicaba en que siendo la industria argentífera tan basta en la Nueva España, el azogue se enviaba desde la Península; se importaba desde lugares tan lejanos como Austria, Perú o las Filipinas y llegaba por barco a la Colonia lo que además de elevadísimos costos, significaba un peligro por la amenaza constante de guerra contra Inglaterra. Siendo que la plata abundaba y el mineral escaseaba

Siguió rindiendo informes y haciendo propuestas al Virreinato, algunos con compensación económica, ya fuese por encargo o iniciativa propia, a lo largo de esos años. En 1780 pidió se le retirase de la comisión del azogue y escribió «*Descripción de un nuevo instrumento para secar la pólvora con prontitud y seguridad*»; se trataba de una máquina de vapor de su invención que limpiaba el salitre —nitrato de potasio— con rapidez y a menor costo que con el método normalmente utilizado, que además podía usarse en cualquier época del año⁴. A pesar de que

⁴ El salitre solía limpiarse en piletas con agua de manantial o con una disolución (traída por Dampier) fabricada con pieles de animales cocidas, en invierno no secaba bien y por tanto la pólvora no explotaba.

los especialistas Marcos Keating y Salvador Dampier despreciaron el invento de Alzate y los salitreros no tenía medios para pagar por el invento, la Real Hacienda le dio en 1783 permiso para promover su máquina.

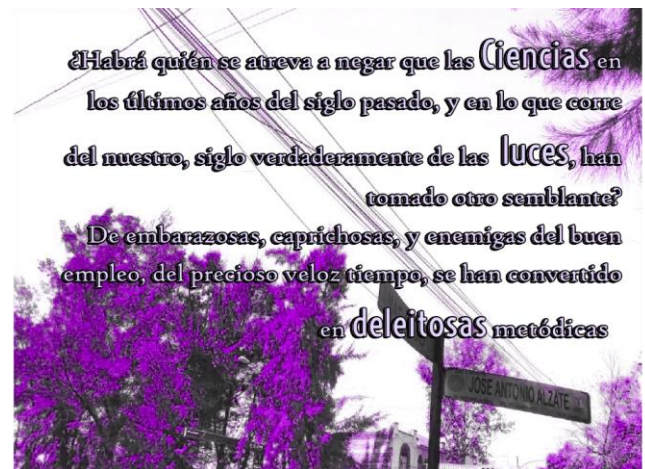
Juan Felipe muere el 17 de febrero de 1781; entendiendo que el genio de *Joseph* no podía ocuparse de cosas tan prosaicas como la administración del dinero, sus padres se ocuparon de nombrar albaceas que le ayudaran, como su primo Egidio Marulanda, también panadero y delegado testamentario de varios miembros de la familia Ramírez Santillana.

El bachiller seguía trabajando, jamás nadie pondría en duda este rasgo de su personalidad, y del trabajo surge el reconocimiento; fue en 1781 cuando se inaugura el Real Jardín Botánico de Madrid, nombrando socio a Alzate — la Expedición Botánica del Perú que estudió la historia natural peruana y chilena entre 1778 y 1789, nombraron al árbol *Alzatea verticillata* en honor al sabio en 1798—, reafirmando como uno de los científicos más relevantes del reino.

Entre los honores y la acritud discurría la vida del intelectual criollo. Un reproche de los científicos de las colonias hacia los europeos era que las técnicas y tecnología que nos traían no siempre eran la opción más viable para la realidad novohispana, pero los peninsulares además de desconocer, despreciaban lo americano, calificando de inferiores desde la flora, fauna y las personas, hasta sus conocimientos, siendo que la ciencia que se hacía de este lado era tan buena como cualquiera y sustentada por la experiencia y experimentación de primera mano. Si algo irritaba a nuestro personaje era la falta a la verdad, su carácter lo orillaba a

perseguir el ideal de la misma —germen de la ciencia moderna—, una afirmación no fundamentada en la razón, resultaba intolerable a nuestro amigo; con esto en mente, se le considera un protoindependentista. A pesar de sus notables aportaciones a la industria y sus vastos conocimientos, se le negó ser director del Seminario de Minería, cargo que en su momento se daría a un peninsular y que excluía a los eclesiásticos, por lo que escribió anónimamente unas cartas criticando la ordenanza.

Aunque no científica en su totalidad, en 1784 se fundó la *Gaceta de México*, editada por Manuel Antonio Valdés y Munguía; ésta era otra publicación periódica que compartía el valor de dar voz a los intelectuales novohispanos y en la cual colaboró durante trece años paralelamente a sus propias publicaciones.



Amargo sería también el año subsecuente a un periodo de hambruna que azotó al virreinato entre 1785 y 1786. Se le comisionó para buscar manuscritos de Francisco Hernández, pero no encontró nada nuevo —encontró sin embargo otros documentos antiguos—, pidió arrendar ciertos terrenos en el cerro del Peñol para su explotación, pues había descubierto yacimientos de cal y se le

negó el permiso —alguien más se apropió del hallazgo y lucró con él—. Se les encargó a él y a su viejo colega —con quien recientemente había polemizado sobre el asunto del malacate— Joaquín Velázquez León hiciesen investigaciones sobre una máquina para cernir tabaco inventada por Alonso Francisco González. El trabajo fue largo, cansado y no se le compensó económicamente por el mismo. Aún no habían terminado con la comisión cuando fallece Velázquez León y durante un tiempo Alzate siguió trabajando en ella en solitario. La Academia de Ciencias de París lo eliminaría ese mismo año de su lista de corresponsales y a pesar de que fueron bien recibidas sus propuestas para sobrellevar el periodo de hambruna, publicó «*Consejos útiles para socorrer la necesidad*» y su «*Continuación*» por su cuenta pues su nombre fue omitido en los documentos oficiales.



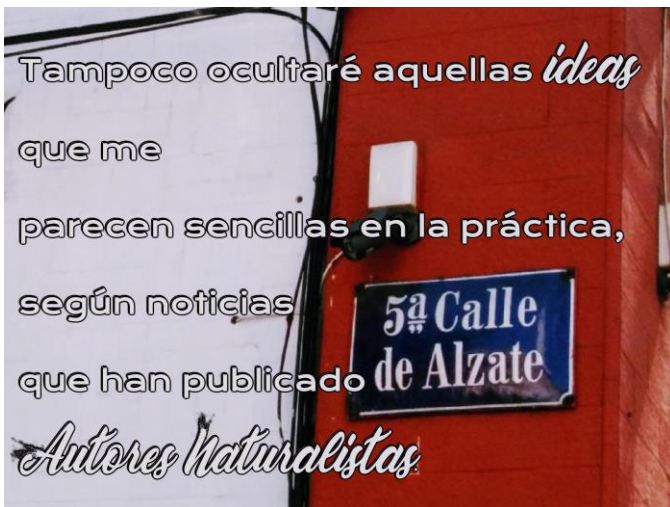
En Portal de Mercaderes, en los cajones del Parián, se vendían todo tipo de publicaciones, en ocasiones se leían en voz alta los transeúntes.

Así en 1787 vuelve a las andadas: «*Observaciones sobre la física, historia natural y artes útiles*» llega al mundo, impreso esta vez en el taller del también relojero y fundidor José Francisco Rangel y como de

costumbre, siendo nuestro *Joseph* quien asumía todos los costos. Abre con un hermoso ensayo de Bernard le Bovier de Fontenelle como prólogo y subrayando —una vez más— su empeño por servir al público comunicando las ciencias naturales. Este proyecto tendría una duración de 14 números que trataban múltiples temáticas científicas y técnicas. No sorprenda a nadie que la amplitud de temas tratados por el sabio eran motivo de crítica; hasta el alemán nacionalizado mexicano Alexander von Humboldt, tachó a nuestro presbítero favorito de ser el “menos sabio” (comparado con Velázquez y Gama) y de dedicarse a demasiadas cuestiones a la vez, sin embargo, debido a su rigor gramático —y también a la versatilidad temática—, Humboldt lo cita más de una vez y lo reconoce como “impulsor” de la ciencia entre la “juventud mexicana”.

A pesar de que *Observaciones...* seguía en circulación, a principios del año siguiente —para ser exactos el 15 de enero— sale el primer número de la «*Gaceta de Literatura*», que se convertiría al fin en su publicación periódica de mayor duración, compartiendo los valores y objetivos de las publicaciones anteriores, pero ya con la experiencia del editor veterano en su arte: sabía ya elegir el formato y tamaño convenientes, la periodicidad idónea de los diferentes números, tenía mejores contactos para el trámite de los permisos necesarios y le fue posible ilustrar con más frecuencia. Josefa falleció pocos meses después, el 5 de mayo, y *Joseph* emplearía el dinero de su herencia en cambiar su *Gaceta...* a una mejor imprenta para entregar un periódico de mayor calidad, eligió el taller de Felipe Zúñiga y Ontiveros, quien era el proveedor ideal: era agrimensor y filomatemático de la Corte y tenía un genuino interés por las ciencias, en especial la astronomía.

Una casa nueva imprimió la *Gaceta*... a partir del Número 12, sin que fuese necesario cambiar su precio de suscripción: 28 reales para los foráneos y 3 pesos para los mexicanos. Había que sostener el proyecto de alguna manera, de una herencia de 31, 229 pesos, el polígrafo había ya gastado 27, 895 pesos en la impresión de sus obras; sin embargo sus esfuerzos no serían en vano, gracias a ellos el número de novohispanos que podían decirse miembros de la llamada *República de las letras* se incrementó. En 1788 redacta su testamento: sus bienes, libros instrumentos y colecciones quedarían bajo el cuidado de su primo Egidio y del yerno de éste, administradores de los bienes de la familia Ramírez Santillana.



Dentro de la caja de sorpresas que resguarda la amplitud de tópicos, talentos y ocupaciones de nuestro sabio, habita también su faceta como precursor de la histografía del México prehispánico. Gracias al par de expediciones que emprendió a Xochicalco, redactó algunas notas a la «*Historia antigua de México*» de la autoría del abate Francisco Javier Clavijero, también viajó a Tenochtitlán y preparó un plano de las ruinas.

Recordando su infancia y a sus primeros compañeros de juegos, Alzate tenía una auténtica preocupación por la preservación de las culturas indígenas y sus lenguas. Admiraba su técnica y ciencia: los consideraba buenos botánicos, elogiaba la habilidad de algunos para curar huesos y acostumbrado a observar y experimentar, apreciaba la utilidad de la información vernácula; para Alzate, preservar su lengua era de vital importancia pues era una lamentable pérdida la cantidad de conocimientos destruidos que pudieron ser valiosos para la medicina y otras ciencias. No sólo eso, enemigo declarado de la falta a la verdad, tachaba de *patrañas* las descripciones que los degradaban, le enfurecía la humillación de los europeos hacia ellos, el que no pudieran administrar sus propias tierras, explotados y abatidos sin tiempo ya de disfrutar de sus danzas y costumbres. Su excesiva pasión por el tema sería una de las causas por las cuales atacaba el sistema de nomenclatura binomial propuesto por Carlos Linneo; para Alzate, las técnicas eurocentristas no satisfacían del todo a la realidad de las tierras americanas, siempre que el periodista participaba en alguna discusión, exigía se le refutara con argumentos bien fundamentados y comprobados, y en el caso del método de Linneo, no le gustaba valerse del latín y el griego, extranjerismos, para describir la flora mexicana si ya existían nombres para ella.

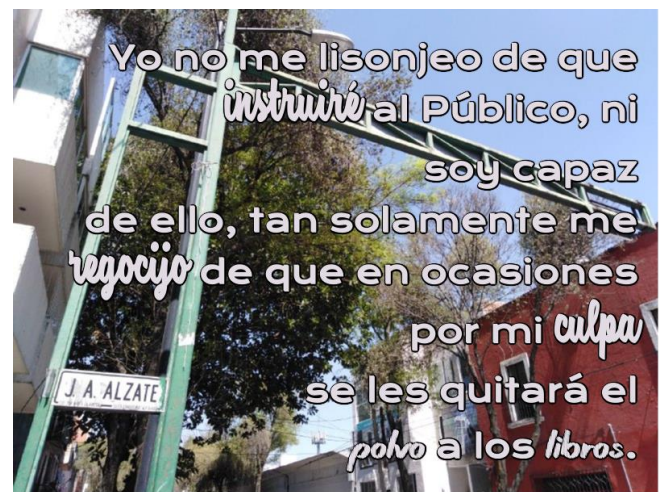
Casi hasta el final de sus días, *Joseph* reconocería a la taxonomía linneana —también tuvo muchos problemas similares con el sistema de nombres químicos de Antoine-Laurent de Lavoisier—, y es que su carácter difícil lo llevaba de ser desde impetuoso hasta imprudente, pasando por combativo cuando de pugnar con alguien se trataba, su estilo de pelea consistía en anteponer la razón y

el contendiente —todo en el terreno de las ideas y el campo de batalla de las letras— había de demostrarle que la verdad estaba de su lado, y he ahí que el orgullo de nuestro amigo y tal vez algo de narcisismo prolongaran el debate más allá de lo necesario, metiéndolo en problemas.

El virrey Juan Vicente de Güemes Pacheco de Padilla y Horcasitas, II conde de Revillagigedo no era ciego a las virtudes alzatianas y apreciaba su erudición, no obstante tuvieron sus roces. En 1790, *Joseph* pide al virrey lo proponga para el cargo de cronista de la Nueva España, Revillagigedo escribe al rey pero la solicitud fue negada por el geógrafo Antonio Alcedo y Bejarano, y el duque de Almodóvar del Río —quien escribía bajo un seudónimo—. Ahora enfoca Alzate sus esfuerzos en propuestas para la limpia de la ciudad y entrega al virrey documentos sobre la expedición científica Malaspina que por aquellos tiempos alcanzaba Acapulco. Sin embargo, aquel mismo año el virrey pide se publique un padrón de la población novohispana que decía que México tenía 112 926 habitantes, pero dos años antes *Joseph* había ya publicado su propio estimado, 213 000 almas; muy ofendido escribe una crítica que a su vez provoca a Revillagigedo, la discusión duró cerca de dos años. Un modelo de carro para la limpia de basura propuesto por el presbítero fue entregado por el virrey a José Damián Ortíz, quien lo plagió, Alzate revela que el duque de Almodóvar escribe bajo el seudónimo de “Eduardo Malo de Luque”, por lo que el virrey reprende al periodista por no tratar al duque con la cortesía que debía, tornándose acre y hasta ingrata la actitud del polígrafo hacía Revillagigedo.

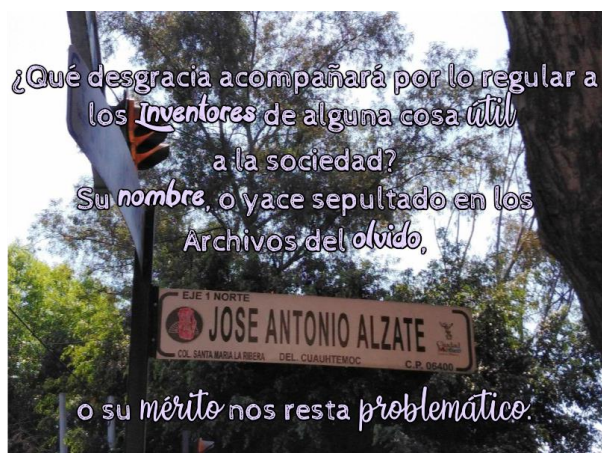
La publicación de la *Gaceta...* con todo su contenido científico, empero seguía. Era frecuente entre los grupos de ilustrados la lectura colectiva de

periódicos y publicaciones; mujeres y hombre discutían al estilo europeo en tertulias intelectuales que en la Nueva España no llegaron a prosperar —aún— para conformar sociedades científicas. En el Portal de Mercaderes, en los cajones de Parián — hoy frente a nuestra Plaza de la Constitución— al ser lugares de venta por excelencia, donde podían también adquirirse libros y publicaciones, éstas se leían en voz alta compartiendo el saber con todo aquel dispuesto a escucharlo.



Se incendió su casa y el fuego arrasó su biblioteca, anunciando, tal vez, el principio del fin. Hasta 1795, *Joseph* había publicado más de 500 artículos: 10 de autoría desconocida, 102 de otros autores y 395 de su propia mano, mente y pluma. El último número de la *Gaceta...* saldría ese año, el 22 de octubre cuando se le ordena suspenderla. Durante sus años como periodista científico llegó a gastar más de 70 mil pesos de su propio dinero en sacar a la luz sus publicaciones. Conforme el entusiasmo lo abandonaba, el abatimiento llenaba los espacios, lo cautivó el aislamiento. Finalmente la falta de actividad física menguaría su salud, y una *hidropesía sufocativa* de la cual no pudo recuperarse, acabaría con su vida un 2 de febrero.

Además de todo lo mencionado, el listado incansable de la actividad alzatiana incluye el descubrimiento del origen de la laca, la invención del flotador —obturador automático flotante—, del jabón de aceite de coco y mucho más. Aquel año del 99, además de llevarse al último siglo novohispano, se llevó al hombre cuya obra fue tótem del quehacer intelectual. Quien se volvió el padre de la comunicación pública de la ciencia, muchos años antes de que el término fuera inventado, fue sepultado en la Iglesia de los Padres Mercedarios —convento de la Merced—, siendo *su historia* testamento de un fragmento de *Nuestra Historia*, la de la Ciencia mexicana.



*Breve semblanza de Raquel Huerta-Nava

Nacida el 29 de junio de 1963, fue ensayista, editora, historiadora, divulgadora de la misma y sobre todas las cosas, poeta; lo último no pudo ser de otra forma, pues siendo hija de la virtuosa Thelma Nava y de Efraín Huerta, imprescindible de la literatura mexicana, la también investigadora creció entre letras.

Se desempeñó en instituciones como el Archivo General de la Nación, la Dirección del Centro de Estudios Históricos del Instituto Nacional de Antropología e Historia, la Dirección del Centro de Estudios Históricos de El Colegio de México y el Colegio de Michoacán.

Rescató del olvido la obra de su padre como ensayista y periodista y no pudiendo evitar el guiño, editó la revista *El Cocodrilo Poeta*. Asimismo contribuyó a la memoria histórica narrando vidas de personajes como Nezahualcóyotl, Leona Vicario, Bernal Díaz del Castillo, Vicente Guerrero o Alexander von Humboldt entre varios otros.

La escritora dejó este mundo el 22 de diciembre de 2018. A la pregunta del *porqué* escribir [poesía], la maestra Raquel me respondió “*porque tengo algo que decir*” y no me parece necesario buscar ninguna otra razón para seguir entretejiendo palabras en las líneas de otrora una hoja en blanco, ya sea para hablar de historia, de ciencia o que arda en el fuego de la poesía.

Referencias Bibliográficas

Alzate y Ramírez, José Antonio de. (1768). Diario literario de Mexico. México: Imprenta de la Bibliotheca mexicana.

Alzate y Ramírez, José Antonio de. (1770). Descripción del barreno inglés, instrumento muy útil, y necesario para los mineros, y labradores. Impresa con las licencias necesarias en Mexico: En la Imprenta del Lic. D. Joseph de Jauregui, en la Calle de S. Bernardo.

Alzate y Ramírez, José Antonio de. (1770). Eclipse de luna del doce de diciembre de mil setecientos sesenta y nueve años. Observado en la imperial Ciudad de Mexico. Impresso en Mexico: Por el Lic. D. Joseph Jauregui. Calle de San Bernardo.

Alzate y Ramírez, José Antonio de. (1772). Asuntos varios sobre ciencias y artes. Impresa en México: En la Imprenta de la Biblioteca Mexicana del Lic. D. Josef de Jauregui, en la Calle de San Bernardo.

Alzate y Ramírez, José Antonio de. (1831). Gacetas de literatura de México. México: Puebla, Pue.: Hospital de S. Pedro.

Alzate y Ramírez, José Antonio de; Moreno, Roberto. (1985). Memorias y Ensayos. México: Universidad Nacional Autónoma de México.

Chappe d'Auteroche, Jean; Álvarez Pérez-Duarte, Manuel; Albert Palacios, Hilda Graciela; Marco Arturo Moreno Corral. (2010). Viaje a Baja California para observar el Tránsito de Venus sobre el disco del Sol el 3 de junio de 1769. México: Ensenada, Baja California.

Curiel Zárate, Nidia Angélica. (Septiembre 2010). La real fábrica de pólvora de Santa Fe: 1779-1810. Casa del tiempo, 35, 54-56.

Dávalos, Marcela. (2018). Los letrados interpretan la ciudad: Los barrios de indios en el umbral de la

Independencia. México: Instituto Nacional de Antropología e Historia.

Galindo y Villa, Jesús. (1890). El presbítero D. José Antonio Alzate y Ramírez: apuntes biográficos y bibliográficos. México: Oficina tip. de la Secretaría de fomento.

Gavira Marquez, María Concepción. (2015). Expediciones mineralógicas de fines del siglo XVIII: la búsqueda de azogue en Nueva España, Rafael Andrés Helling y José Antonio Alzate, 1778. Estudios de Historia Novohispana, Número 52, 1-17; doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.ehn.2013.11.001>

Moreno Roberto. José Antonio de Alzate y los virreyes. In: Cahiers du monde hispanique et luso-brésilien, n°12, 1969. pp. 97-114; doi: <https://doi.org/10.3406/carav.1969.1711>

https://www.persee.fr/doc/carav_0008-0152_1969_num_12_1_1711

Saladino García, Alberto. (2001). El Sabio José Antonio Alzate y Ramírez de Santillana. México: Universidad Autónoma del Estado de México.

Valdés, Manuel. (1799). Gazetas de Mexico: compendio de noticias de Nueva España. México: D. Felipe de Zuñiga y Ontiveros, Calle del Espíritu Santo, 1784. pp. 219-223

Valdez Garza, Dalia. (2014). Libros y lectores en la Gazeta de literatura de México (1788-1795) de José Antonio Alzate. México: Bonilla Artigas Editores. ITESM.

Para saber más:

Pérez Tamayo, Ruy. (2010). Historia de La Ciencia En México. México: Fondo de Cultura Económica.

Trabulse, Elías. (1984). El círculo roto. México: Fondo de Cultura Económica. Colección Lecturas Mexicanas.



@carlosi.mendoza

Óxidos y telururos de molibdeno por transporte de vapor a corta distancia

Oswaldo de Melo^{a, b} y Guillermo Santana^b

^aFacultad de Física, Universidad de La Habana, 10400 La Habana (omelo@fisica.uh.cu)

^bInstituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria, CP 70360, Coyoacán 04510, México, CDMX

omelo@fisica.uh.cu; gsantana@iim.uam.mx

Introducción

Planilandia es el título de una sorprendente novela, tal vez menos conocida de lo que se merece, escrita en el siglo XIX por el teólogo y matemático Edwin Abott ([Londres, 1838 - 1926](#)). En ella se narran las aventuras y desventuras de personajes que viven en un mundo de dos dimensiones, mismo al que aquellos de nosotros acostumbrados a la tercera dimensión (3D) encontraríamos muy extraño. En él solo existen el largo y el ancho, pero no la altura ni el arriba o el abajo. Nos ha parecido que la palabra viene como anillo al dedo para nombrar a la familia de materiales bidimensionales que, desde hace algunos años, está resultando ser algo similar al mundo narrado por Abott. A partir de la fabricación en 2004 del Grafeno (una lámina de átomos de carbono con interesantes propiedades que derivan precisamente de su geometría) la familia de los materiales bidimensionales ha ido creciendo incesantemente y hoy cuenta con cientos de miembros que incluyen materiales elementales, así como compuestos

orgánicos e inorgánicos.⁵ Entre ellos se pueden encontrar aislantes, semiconductores y metales.

El estudio de los materiales bidimensionales tiene sus antecedentes en los semiconductores con los que, ya desde los años 70, se crecían los llamados *pozos cuánticos* (películas muy delgadas de pocas monocapas atómicas, generalmente flanqueados por barreras de un semiconductor diferente). Actualmente estas estructuras tienen aplicaciones en los diodos láseres o en los transistores de alta movilidad de electrones, por mencionar algunos ejemplos. La preparación de un pozo cuántico es un reto formidable, puesto que se necesitan escoger adecuadamente los materiales que se utilizarán como sustrato, pozo y barrera; bajo la exigencia de que el desacople entre las redes cristalinas sea lo más pequeño posible para evitar defectos indeseables en las interfaces (generalmente producidos por la presencia de enlaces sueltos). Esto limita bastante el número de estructuras posibles a algunas combinaciones como las de AlGaAs/GaAs/AlGaAs o las de HgCdTe/HgTe/HgCdTe, por citar dos ejemplos.

La novedad de los materiales bidimensionales que han aparecido recientemente radica en que estos son (valga la redundancia) bidimensionales de manera natural. Al tiempo presente podemos decir que aquellos pozos cuánticos a los que nos referimos arriba son bidimensionales “por la fuerza” pues se encuentran constreñidos a tener una de sus dimensiones muy pequeña, al costo de complicados y delicados procesos de preparación. Los *nuevos materiales bidimensionales* pueden, al contrario, entenderse como moléculas anchas y largas que no tienen enlaces perdidos en sus caras más extendidas. Se pueden laminar o exfoliar porque tienen una estructura cristalina en forma de capas conectadas entre sí por enlaces débiles de Van der Waals. Este hecho conduce a una importante reducción en los problemas que existen en los materiales 3D, como la necesidad de pasivar las superficies, la oxidación o los defectos de acople de las redes cristalinas en el caso de heteroestructuras. Es por esto que dichos materiales abren grandes perspectivas a lo que se ha llamado *heteroestructuras de Van der Waals*. En estas es posible apilar monocapas de los materiales más variados y de este modo hacer ingeniería de, por ejemplo, la brecha prohibida. Evidentemente esto tendrá grandes implicaciones en la

5 A. K. Geim, I. V. Grigorieva, *Nature*, 2013, **999**, 419

electrónica y la optoelectrónica. El transporte de vapor a corta distancia es una técnica (relativamente poco costosa) que ha sido ampliamente utilizada para el crecimiento de materiales semiconductores.

El ejemplo más conocido es el crecimiento de CdTe en celdas solares basadas en estructuras de CdTe/CdS.⁶ En este trabajo presentaremos el uso de esta técnica, en su variante isotérmica, para la preparación de dos importantes miembros de la familia 2D: los óxidos y los telururos de molibdeno. Ambos tienen en común la presencia de molibdeno y de un elemento del grupo VI de la Tabla periódica (oxígeno o telurio); también tienen en común el hecho de que el óxido de molibdeno es comúnmente usado como precursor para la preparación del telururo de molibdeno.

El telururo de molibdeno es un interesante miembro del grupo de los Dicalcogenuros de Metales de Transición (DMT). Estos materiales han recibido un gran interés de parte de la comunidad científica debido a que, por ejemplo, contrario a lo que ocurre con el grafeno, algunos DMTs presentan una brecha prohibida finita en un rango que va desde 0.7 (WTe₂) a 2 eV (WS₂); esto los hace compatibles con la industria de los semiconductores.⁷ Propiedades como su estabilidad química o flexibilidad mecánica son valoradas para un gran número de aplicaciones. El fuerte acoplamiento spin-órbita del MoTe₂ (debido a la elevada masa atómica del Te) tiene potenciales aplicaciones, como las muy interesantes y novedosas *valletrónica*, *espintrónica* y los dispositivos de efecto Hall cuántico de spin.^{8,9} Recientemente los óxidos de molibdeno han recibido un gran interés por sus potenciales aplicaciones en diferentes áreas¹⁰ tales como: materiales catalíticos, electro-crómicos, transportadores de huecos en celdas solares, como canales en los transistores de efecto de campo o electrodos en baterías de litio; también en aplicaciones médicas como agentes tóxicos para ciertas células y en terapias fototérmicas.

Estructuras cristalinas del MoTe₂ y el MoO₂

La figura 1 representa una estructura cristalina característica de los Dicalcogenuros de Metales de Transición (DMT), familia a la cual pertenece el MoTe₂. Una monocapa del metal de transición es flanqueada por sendas monocapas del elemento calcógeno, de modo que se forma una tricapa con el apilamiento X-M-X donde, M representa el metal de transición y X el elemento calcógeno (en lo que sigue, a esta tricapa la llamaremos *monocapa del compuesto* o simplemente *monocapa*).

El carácter 2D de estos materiales está dado por el hecho de que estas monocapas están unidas por enlaces débiles de Van der Waals y pueden ser exfoliadas fácilmente.

Por su parte, los óxidos de molibdeno forman una familia con fórmula MoO_{3-x} en la que $0 \leq x \leq 1$. Con $x = 0$ tendremos al MoO₃, que presenta la fase ortorrómbica y es un semiconductor de gap ancho con muy baja conductividad eléctrica. En el otro extremo, tenemos el MoO₂ que presenta estructura monoclinica y tiene un comportamiento de tipo conductor metálico. Existen también varios compuestos con composiciones intermedias, así como con fases no estequiométricas.

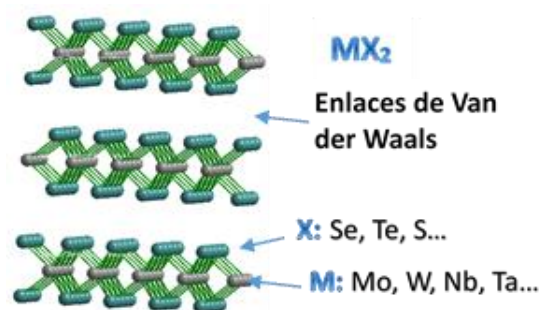


Fig. 1: Estructura cristalina del MoTe₂ y otros miembros de la familia de los Dicalcogenuros de Metales de Transición. Una monocapa del metal de transición es flanqueada por monocapas del elemento calcógeno. Esta *tricapa* se enlaza con las más próximas por enlaces de Van der Waals, de ahí el carácter laminar del compuesto.

⁶ N. Romeo, A. Bosio, V. Canevari and A. Podestà, Sol. Energy, 2004, **77**, 795–801

⁷ L. Ruitao, J. A. Robinson, R. E. Schaak, D. Sun, Y. Sun, T. E. Mallouk,; M. Terrones, Acc. Chem. Res., 2015, **48**, 56

⁸ D. Xiao, G. B. Liu, W. Feng, X. Xu, W. Yao, Phys. Rev. Lett., 2012, **108**, 196802

⁹ X. Qian, J. Liu, L. Fu, J. Li, Science, 2014, **346**, 1344

¹⁰ I. A. de Castro, R. S. Datta, J. Z. Ou, A. Castellanos-Gomez, S. Sriram, T. Daeneke and K. Kalantar-zadeh, Adv. Mater. 2017, **29**, 1701619

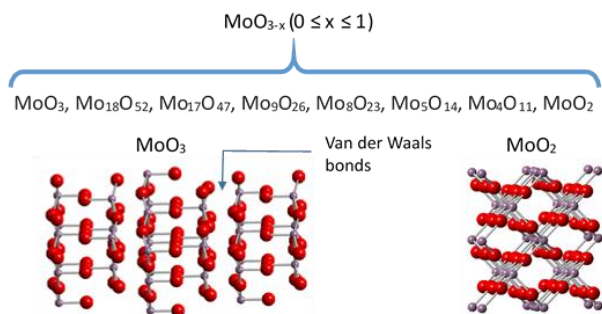


Fig. 2: Se muestran algunos miembros de la familia de los óxidos de molibdeno con fórmula MoO_{3-x} con $0 \leq x \leq 1$. Los extremos son MoO₂ ($x = 1$) con características metálicas y el MoO₃ ($x = 0$) con características semiconductoras.

Transporte de vapor a corta distancia

La preparación de MoTe₂ se realiza en dos pasos consecutivos: primero se deposita una película de molibdeno mediante pulverización catódica¹¹ y luego esta película se somete a un proceso de telurización. Esto se logra exponiéndola a una fuente de telurio sólido, tal como se indica en la siguiente figura.¹²

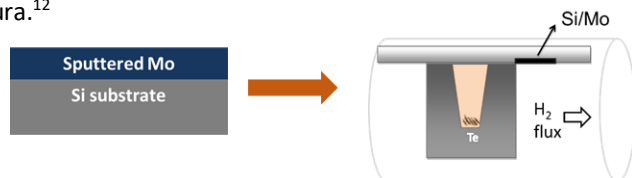


Fig. 3: Proceso de obtención de MoTe₂ por telurización de una película de molibdeno previamente crecida por pulverización catódica. La película de molibdeno es expuesta al Te en una atmósfera reductora.

Se obtiene entonces una película de MoTe₂ cuya morfología se puede observar en la figura 4a. Las películas presentan una morfología de hojuelas que las hace muy rugosas y porosas. De hecho, mediciones de elipsometría arrojaron valores de rugosidad de entre 10 y 20 % del espesor total. El espesor de las películas de MoTe₂ obtenidas fue proporcional al de la película precursora de molibdeno (el cual fue variado 5 y 50 nm) y condujo a películas de MoTe₂ con espesores entre 10 y 100 nm posterior a la incorporación del Te.

Las películas suelen contener una mezcla de las fases comúnmente llamadas 2H y 1T', que son muy similares estructuralmente, pero que pueden muy bien identificarse por sus espectros Raman. En la figura 4b se muestran dichos espectros en dos regiones de una muestra, cada una con una fase diferente. A pesar de la similitud estructural de las dos fases, estas tienen muy diferentes propiedades: la fase 2H es semiconductor mientras la 1T' es metálica. Nosotros hemos encontrado que la fase 2H es favorecida al aumentar el tiempo de telurización.

Esto se puede observar en la figura 4c, en la que se muestran los difractogramas (tomados en configuración $\theta - 2\theta$) de dos muestras telurizadas a 500 °C, una por 15 min (curva violeta) y otra por 1 h (curva azul). Los difractogramas muestran, para ambas muestras, una pronunciada orientación preferencial cristalográfica con la dirección [100] perpendicular a la superficie. Puede también apreciarse en el inserto una magnificación de la región correspondiente a la reflexión del plano (400). El corrimiento corresponde con la transformación de una fase a la otra como consecuencia del tratamiento

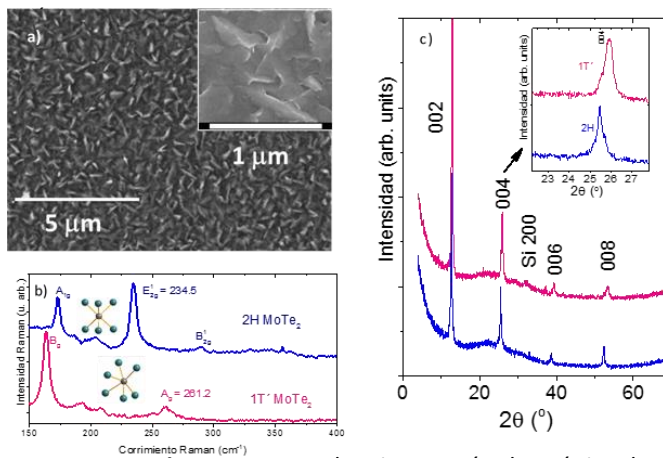


Fig. 4a: Imagen de microscopía electrónica de una muestra gruesa de MoTe₂ en la que se puede apreciar la morfología de hojuelas.

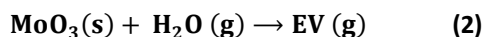
Fig. 4b: Espectros Raman de dos regiones de una muestra que presenta una mezcla de las fases 1T' y 2H.

Fig. 4c: Difractogramas de dos muestras sometidas a diferentes tiempos de telurización.

¹¹P. Sigmund, Theory of Sputtering. I. Sputtering Yield of Amorphous and Polycrystalline Targets, Phys. Rev. 1969, 184, 383-416

¹²E. Sánchez-Montejo, G. Santana, A. Domínguez, L. Huerta-Arcos, L. Hamui, M. López-López, H. Limborco, F. M. Matinaga, M. I. N. da Silva, A. G. de Oliveira, J. C. González, O. de Melo, PHASE STABILITY IN MoTe₂ PREPARED BY LOW TEMPERATURE Mo TELLURIZATION USING CLOSE SPACE ISOTHERMAL TE ANNEALING, Mat. Chem. Phys 2017, 198, 317-323

Para la preparación del óxido de molibdeno se utilizó la técnica de Transporte de Vapor a Corta Distancia Favorecido Químicamente (CD-CSVT, del inglés Chemically Driven Close Space Vapor Transport).¹³ En esta variante se coloca un sustrato encima, y a corta distancia, de la fuente de MoO_3 bajo una atmósfera reductora. Una especie volátil se forma en la fuente y es transportada hacia el sustrato, donde se produce el MoO_2 . En la fuente, y en presencia de H_2 , ocurren las siguientes reacciones:



En esta etapa se forma la especie volátil EV (no identificada, pero de la que sugerimos es algún hidroxilato de molibdeno) este juega el rol de precursor para la formación del MoO_2 y se transporta de la fuente al sustrato. La ecuación (1) es la responsable de que se forme la especie volátil (por la producción de H_2O necesario para completar la segunda reacción).

En el sustrato (y también en presencia de H_2) ocurre la tercera reacción responsable del crecimiento del MoO_2 :

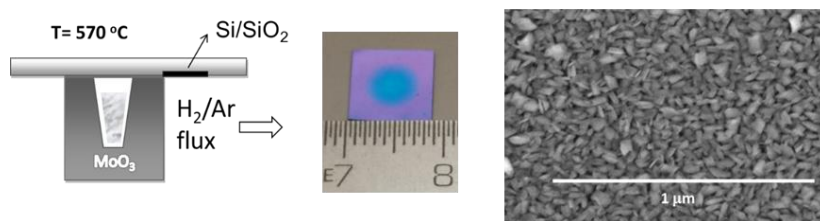


Fig. 5: A la izquierda se muestra el proceso de crecimiento de MoO_2 por la técnica de Transporte de Vapor a Corta Distancia Favorecido Químicamente (CD-CSVT). Se coloca un sustrato encima, a corta distancia de la fuente de MoO_3 , bajo una atmósfera reductora. Una especie volátil se forma en la fuente y es transportada hacia el sustrato, donde se produce el MoO_2 . En el centro y a la derecha: vistas de la superficie de una película a ojo desnudo y con la ayuda del microscopio electrónico.

En la figura 5 se puede observar la morfología de las películas de MoO_2 . El espesor de estas películas depende de varios factores, tales como el tiempo de crecimiento y la distancia de la fuente al sustrato. Variando de modo adecuado estas condiciones de crecimiento se obtuvieron películas con espesores en un amplio rango comprendido entre unos pocos nanómetros y una micra. Se encontró que las películas muy finas no eran enterizas, sino que presentaban cristales aislados en la superficie del sustrato. Esto se puede observar en la figura 6, para una muestra crecida sobre un sustrato de silicio monocristalino con una baja velocidad de crecimiento.

13O. de Melo, L. García-Pelayo, Y. González, O. Concepción, M. Manso-Silván, R. López-Nebreda, J. L. Pau, J. C. González, A. Climent-Font, V. Torres-Costa, CHEMICALLY DRIVEN ISOTHERMAL CLOSED SPACE VAPOR TRANSPORT OF MoO_2 : THIN FILMS, FLAKES AND IN-SITU TELLURIZATION; J. Mater. Chem. C, 2018 **6** 6799—6807

Conclusiones

El transporte de vapor a corta distancia permite el crecimiento, tanto del óxido como del telururo de molibdeno. Una primera variante para la preparación de MoTe_2 combina la pulverización catódica de Mo con un tratamiento isotérmico ulterior en vapores de Te en una configuración de corta distancia. Para depositar el MoO_2 hemos desarrollado un procedimiento novedoso en el cual, partiendo de la fuente de MoO_3 y en una atmósfera reductora se obtiene una película de MoO_2 en la superficie de un sustrato situado a unos pocos milímetros de la fuente y a la misma temperatura. En este procedimiento se aprovecha que la reacción de reducción del MoO_3 es una reacción compleja que transita por un paso intermedio en el que se produce una especie volátil, misma que puede abandonar la fuente y ser reducida en el sustrato para formar la película de MoO_2 . Este método permite la realización de otros procesos secuenciales como, por ejemplo, la telurización *in situ* del óxido para formar el MoTe_2 , sin necesidad del paso previo de la pulverización catódica. Ulteriormente tiene la ventaja de producir MoO_2 , puro a diferencia de otras técnicas en las que se obtiene una mezcla de fases. Es probable que esta técnica pueda aplicarse a otros óxidos de metales de transición, como por ejemplo el WO_2 , o a otros compuestos que presenten reacciones de reducción complejas con pasos intermedios. Asimismo, además de la telurización pudieran llevarse a cabo otros procesos secuenciales, por ejemplo, para fabricar heteroestructuras de diferentes óxidos.

Agradecimientos: O. de M. agradece la ayuda del programa de estancias de investigación (UNAM/DGAPA/PREI) 2018.

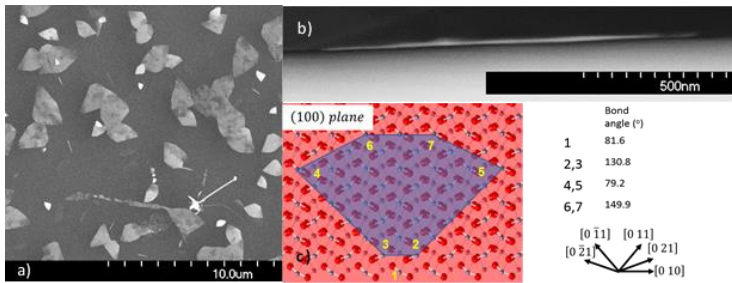


Fig. 6: Hojuelas de MoO_2 . Imagen de microscopía electrónica de la superficie (a) y de la sección transversal (b) de una muestra de MoO_2 . La morfología de las hojuelas indica su carácter monocristalino (c) como sugiere el hecho de que los ángulos de los vértices del perímetro coinciden con los que forman las direcciones cristalinicas.

La técnica para el crecimiento de MoO_2 permite realizar otros procesos secuenciales. Por ejemplo, se puede realizar el proceso de telurización del MoO_2 *in situ*. Con un bote similar al presentado en la figura 5, pero con dos contenedores para las fuentes como se muestra en la figura 7a, se realizaron procesos secuenciales *in situ*: primero el crecimiento de MoO_2 exponiendo el sustrato a la fuente de MoO_3 y luego la telurización. Este proceso permite eliminar el paso correspondiente al depósito de Mo por pulverización catódica. En la parte derecha de la figura se observa la morfología en forma de cristales aplanados y alargados del MoTe_2 obtenido con este procedimiento.

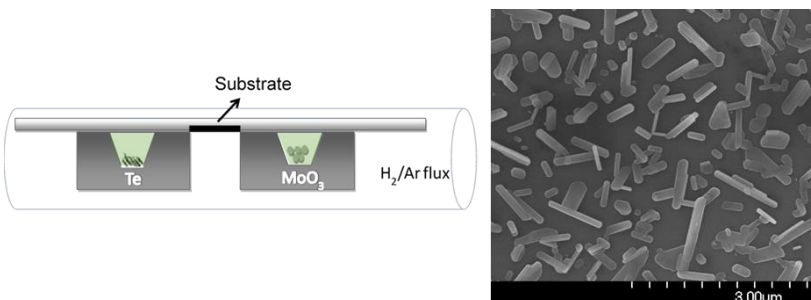


Fig. 7: Sistema para el crecimiento y telurización *in situ* del MoO_2 (izquierda) e imagen de microscopía electrónica (derecha) de la superficie de una muestra de hojuelas de MoO_2 telurizadas con este procedimiento.



Desarrollo de piezas porosas de titanio grado 2, con superficies de poros recubiertas con vidrio base sílice

Ángel José Meléndez

Departamento de Metalurgia, Universidad Territorial
Politécnica de Puerto Cabello (UTPPC)

Zona Industrial Santa Rosa, Puerto Cabello, Venezuela

esoj1960@hotmail.com

Resumen

El titanio y sus aleaciones presentan limitaciones de uso como biomateriales. Su módulo elástico es bastante alta (105 GPa) respecto a la rigidez del hueso humano (30 GPa), causando reabsorción ósea y posterior rechazo. Son bioinertes, lo que contribuye a la formación de una fina capa fibrosa que la aísla del hueso huésped; además, el dióxido de titanio que se produce en su superficie tiene baja bioactividad. La rigidez se disminuye creando poros interconectados por procesos pulvimetalúrgicos y la bioactividad se controla recubriendo la superficie de las piezas con cerámicos bioactivos como vidrios base sílice. Las piezas porosas con superficies de poros recubiertas con biovidrios están encaminadas a ser una propuesta alternativa para prótesis de sustitución ósea. Esta investigación está centrada en crear un método para desarrollar piezas porosas de titanio grado 2, con superficies de poros recubiertas con vidrio base sílice y con alta porosidad interconectada. Se utilizó una mezcla de: polvo de Titanio

grado 2 (Tig2) tamizado entre 200 y 440 μm , y carbón superactivado (CSA) tamizado entre 600 y 840 μm ; este último sirve como generador de poros y proporcionador del cerámico. Se realizaron ensayos experimentales para hallar el ajuste óptimo del porcentaje de carbón superactivado en la mezcla Ti-CSA, la presión de compactación de la mezcla, la temperatura y el tiempo de sinterización. La caracterización de las probetas sinterizadas se realizó mediante microscopio óptico, microscopio electrónico de barrido (MEB), espectroscopía de rayos X por dispersión de energía (EDAX), difracción de rayos X (DRX) y fluorescencia por rayos X. La investigación arrojó que utilizar técnicas pulvimetalúrgicas convencionales (con espaciador de CSA a porcentaje de 50%, presión de compactación de 600 MPa y temperatura de 1200 °C durante 1 hora de sinterización) permite desarrollar piezas porosas de titanio con superficie de poros recubiertas con vidrio base sílice; su porosidad interconectada es de 55% y el tamaño de poros obtenidos va de 100 a 800 μm .

Palabras clave: Titanio, carbón superactivado, vítrea.

DEVELOPMENT OF POROUS BIOMATERIAL OF TITANIUM GRADE 2, WITH SURFACES OF PORES COVERED WITH BASE GLASS SILICA

ABSTRACT: Titanium and its alloys present limitations of use as biomaterials. Its rigidity is very high (105 GPa) with respect to human bone (30 GPa), which causes bone resorption and subsequent rejection. They are bioinert, which contributes to the formation of a thin fibrous layer that isolates it from the host bone, besides the titanium dioxide that is produced on its surface has low bioactivity. The rigidity is reduced by creating pores interconnected by powder metallurgical processes and the bioactivity is controlled by coating the surface of the pieces with bioactive ceramics such as silica glass. The porous pieces with pore surfaces coated with bioglasses, are intended to be an alternative proposal as bone substitution prosthesis. This research is focused on creating a method to develop porous pieces of titanium grade 2, with surfaces of pores covered with glass silica base, with high interconnected porosity, for this, a mixture of titanium powder grade 2, (Tig2) sieved between 200 - 440 μm , and superactivated carbon (CSA) sieved between 600 - 840 μm , as generator of pores, and ceramic proportioner was used. Experimental tests were carried out for the optimum adjustment of the percentage of superactivated carbon in the Ti-CSA mixture, compaction pressure of the mixture, temperature and time of sintering. The characterization of the sintered specimens was carried out by optical microscope, scanning electron microscope (SEM), energy dispersive x-ray spectroscopy (EDAX), x-ray diffraction (XRD), and RX fluorescence. The research showed that using conventional powder metallurgical techniques with CSA spacer at 50% percentage, compaction pressure 600 Mpa, and temperature 1200 ° C at 3 hours sintering, it was possible to develop porous pieces of titanium with a surface of pores covered with silica glass, with an interconnected porosity of 55% and a pore size of 100 to 800 μm .

Key words: Biomaterial, Titanium, Superactivated Carbon, Bioglasses.

Introducción

El titanio y sus aleaciones han sido los biomateriales más utilizados para corregir traumas óseos femorales. No obstante, estos materiales presentan limitaciones de uso al ser utilizados como biomaterial, tales como su alto módulo elástico (105 GPa) respecto a la rigidez hueso humano (30 GPa) [1]. Lo anterior provoca que el biomaterial absorba toda la carga mecánica y el hueso resulte descargado, causando la resorción del hueso y el posterior aflojamiento de la prótesis de acuerdo al fenómeno denominado “stress shielding” o también llamado apantallamiento de tensiones [2,3]. La diferencia entre la rigidez hueso/implante se puede reducir creando micro y macroporos mediante técnicas pulvimetalúrgicas y espaciadores. Los biomateriales deben poseer porosidad interconectada de alrededor del 60%, con tamaño de poros comprendido entre 100 y 400 micrómetros; esto garantiza un adecuado crecimiento de yemas vasculares y frentes osteoblásticos en el interior de los poros [4]. Los poros deben tener, además, cierta rugosidad para lograr la adhesión de las células óseas [5]. La creación de poros proporciona una fijación mecanobiológica como consecuencia del crecimiento óseo en su interior, lo cual ancla el implante y aumenta la superficie de transmisión de cargas entre el implante y el hueso.

Por otro lado, el titanio es bioinerte, lo que genera (al inicio del mecanismo de integración ósea) una microcapa fibrosa que lo aísla del hueso huésped, ocasionando así una falla en la biointerfaz y eventualmente su rechazo [6,7]. Se han utilizado metodologías para la modificación de la superficie de piezas de titanio, tales como: el blastinizado, el anodizado por plasma químico y tratamiento alcalino en NaOH [8], el recubrimiento con cerámicos bioactivos (como hidroxiapatita), el biovidrios base sílice, entre otros. Transformar superficies bioinertes en bioactivas e hidrofílicas permite acelerar y mejorar los fenómenos biológicos que aseguran una rápida y duradera osteointegración [8], fomentando un enlace directo con el hueso (fijación bioactiva) y evitando también la presencia de la fibrosis [7,9].

Desarrollar piezas porosas de titanio, con poros interconectados cuyas superficies estén recubiertas íntegramente con una fase vítrea base sílice, aumentaría el anclaje mecanobiológico implante/hueso.

Las piezas porosas con superficies de poros recubiertas con biovidrios están encaminadas a ser una propuesta alternativa para las prótesis de sustitución ósea femoral. La fase vítrea, una vez que entre en contacto con la solución biológica simulada o con fluidos corporales, induciría la nucleación y el crecimiento de hidroxiapatita en su superficie [5, 10].

La obtención de piezas porosas de titanio se puede realizar mediante técnicas pulvimetalúrgicas con adición, en su proceso, de espaciadores de carbón superactivado (CSA) como generadores de poros. El CSA es un carbón activado aglomerado con compuestos arcillosos bentoníticos que, posterior a su combustión (en el proceso de sinterización y por síntesis térmica localizada), se obtiene un residuo silicoaluminoso. Este funde a temperaturas elevadas y proporciona el vidrio base sílice que recubre la superficie de los poros que (una vez en contacto con el líquido fisiológico) reacciona con los iones de calcio y fosfato; precipitando la hidroxiapatita que recubrirá el vidrio [4] y favoreciendo así la osteointegración, la osteogénesis y osteoconducción de las células óseas.

Factores tales como el mezclado de los polvos, presión de compactación, temperatura de sinterización, tamaño, forma y porcentaje del polvo de titanio reciclado y del CSA influirán en la microestructura, el tamaño, forma y cantidad de poros interconectados obtenidos en las piezas. Por lo tanto, es importante determinar el impacto de todas estas variables de trabajo.

Las excelentes propiedades mecánicas del titanio contrastan con su insatisfactorio comportamiento bioinerte; por otra parte, los cerámicos son bioactivos, pero tienen propiedades mecánicas no satisfactorias. De aquí que la combinación apropiada de estos materiales daría como resultado biomateriales con un comportamiento biológico deseado [5]. La técnica de síntesis térmica localizada para obtener la fase vítrea adecuada permitiría la obtención de recubrimientos cerámicos bioactivos en piezas porosas de titanio.

Metodología experimental

Análisis de los precursores

El polvo de Titanio grado 2 (Tig2) se obtuvo mediante el limado manual de piezas de desecho provenientes de la empresa TEXTIL COLI (ubicada en la ciudad de Puerto Cabello, Estado Carabobo), misma que se dedica a la producción de tornillos y platinas de titanio para la fijación ósea. Este polvo fue pasado por un campo magnético (para eliminar las posibles virutas de acero) y tamizado a una granulometría entre 200 y 440 μm . Se tomó una muestra para observar la forma que tienen los granos bajo el microscopio óptico.

Se confeccionaron tres piezas cilíndricas de 10 x 10 mm mediante la compactación de polvo de titanio reciclado y se realizó un análisis con el espectrómetro identificador de metales OYORD, modelo ALL-MET 8000.

El espaciador se obtuvo del carbón superactivado (CSA) peletizado (de la empresa RESUN y de fabricación china) utilizado para control de micóticos y bacterias en aguas peceras y en acuicultura. Se fragmentó y trituró en un mortero de ágata, tamizado a una granulometría entre 600 - 840 μm .

El porcentaje de carbono y cenizas presentes en el CSA calcinado fue determinado según la norma ASTM D2866; para esto se calcinó una muestra de 1 gramo de polvo, ya tamizado, de CSA, a una temperatura de 100 °C, durante una hora; posteriormente se aumentó la temperatura a 500 °C durante una hora y finalmente se llevó a 850 °C durante 2 horas, en una atmósfera oxidante. Se dejó enfriar y se pesó el residuo. El porcentaje de carbono se determinó por diferencia de peso. Las cenizas se caracterizaron por difracción de rayos X utilizando el equipo PW1250, marca Philips, con radiación de Cu-K α ($\lambda=1.5406 \text{ \AA}$) y una resolución de 0,002° en 2 θ , para determinar estructuras cristalinas presentes.

Se realizó el análisis de fluorescencia por rayos X, utilizando el equipo Shimadzu modelo LC-10A, a las muestras de polvo de CSA y se determinó la densidad relativa mediante el equipo flujómetro de Hall; para esto se tomaron 15 g de polvo de titanio y 15 g de carbón superactivado. Se tomó un gramo de polvo de CSA para realizar el estudio morfológico de los granos utilizando microscopio óptico.

Proceso pulvimetalúrgico

Con el fin de desarrollar la metodología adecuada para producir piezas porosas de titanio grado 2, con superficies de poros recubiertas con vidrio base sílice, se procedió a realizar ensayos experimentales tomando en cuenta las siguientes variables de trabajo: porcentajes (en peso) de carbón superactivado, presión de compactación, temperaturas y tiempo de sinterizado.

Los polvos de titanio y de carbón superactivado fueron mezclados manualmente (en proporción de 5, 10, 30, 50 y 70% de CSA) mediante varilla de vidrio, en un recipiente de acero inoxidable. Este método de baja energía evitó que los granos del espaciador se fragmentaran y se perdiera la granulometría obtenida por el tamizado. A la mezcla se le agregó alcohol isopropílico como aglutinante.

Se confeccionaron 20 probetas cilíndricas de 10 mm de diámetro y 10 mm de altura, según la norma ASTM E9-89a, con matriz flotante y compactada de modo uniaxial, usando el equipo de ensayos universal TECHNOVATE. Se utilizaron cuatro diferentes presiones de compactación para determinar la más adecuada (200, 400, 600 y 700 MPa). Cabe destacar que se pesaron 3 gramos de mezcla por probeta.

Una vez obtenidas las probetas (en verde) se llevaron a la mufla (marca HERON) para la eliminación del espaciador y para asegurar una atmósfera reductora, garantizando así una baja reactividad del titanio con los elementos presente en el aire como oxígeno, hidrógeno o nitrógeno. El traslado al horno de las piezas en verde se hizo con sumo cuidado, para no provocar daños en la estructura formada y mantener así su integridad física.

El sinterizado se llevó a cabo a temperaturas de 800, 1000 y 1200 °C; con un tiempo de permanencia de 1, 2, 3, 4 y 5 horas a estas temperaturas. Se consideró un calentamiento y enfriamiento suave de 5 °C/min, para así evitar la combustión brusca del carbón superactivado y lograr que la dilatación de la pieza fuera uniforme.

Se estableció una codificación para las probetas confeccionadas; así, por ejemplo, para la muestra 1CA1 el primer número señala el correlativo, en este caso primera probeta, la C representa probeta cilíndrica, la segunda letra significa el porcentaje de CSA y el último número representa la temperatura de sinterizado (1 es 800 °C, 2 es 1000 °C y 3 es 1200 °C).

Se calculó la densidad de la pieza porosa mediante el *procedimiento de Arquímedes*, esto de acuerdo a la norma ASTM C 373–88. La porosidad total y la porosidad interconectada se determinaron con base en la norma UNE-EN ISO 2738. Para aquellas probetas con porosidad promedio mayor a 300 µm de diámetro fue necesario utilizar el *método de Arquímedes en parafina*, con esto se evaluaron la densidad aparente, porosidad total y porosidad interna, y fue necesario tener un patrón de referencia sin porosidad para poder comparar la densidad y obtener así la porosidad total. Para el caso anterior se utilizó el valor de densidad del titanio, que es 4,50 g/cm³[1], de acuerdo a la norma UNE-EN ISO 2738.

Una primera aproximación del cálculo de la densidad fue realizada por el método geométrico, mismo que relaciona el peso con el volumen dimensional de la probeta *en verde*. Para las probetas sinterizadas se utilizó el método de Arquímedes para obtener el volumen por desplazamiento de agua, en concordancia con la norma ASTM C 373–88.

Para la porosidad interconectada se recurrió al método de Arquímedes (que está basado en la medida indirecta de la densidad a partir de inmersión de la probeta saturada), con los poros sellados con parafina, este método es el más conveniente cuando las muestras presentan macroporosidad. Con poros muy grandes ocurre un bajo efecto de capilaridad, si se utiliza agua como medio de saturación.

Antes de realizar el procedimiento de saturación, se removió la capa superficial de las probetas y se eliminó por completo la humedad de las mismas mediante el uso del horno Thermolyne Furnatol II. Las muestras fueron pesadas en una balanza analítica marca Adventures Ahaus e inspeccionadas superficialmente a 100 X con el microscopio óptico Micromaster Fisher Scientific. Las piezas con diámetros de poros promedio menores a 300 µm se colocaron sobre una malla de acero galvanizado y este arreglo se ubicó en un envase de acero inoxidable con agua a 80 °C, inicialmente tocando la superficie inferior de las probetas, agregando agua

a 80 °C cada media hora hasta cubrir el 25 % de la altura de la probeta. A las dos horas se le agregó más agua hasta cubrir la probeta completamente. Se dejó media hora más y se dejó enfriar en el agua por 24 horas. Posteriormente, se sacaron y se limpiaron con papel absorbente, sumergiendo las probetas en agua destilada a temperatura ambiente para determinar su peso por flotación.

Para las probetas con poros mayores a 300 µm se colocaron durante 1 hora en parafina fundida a 105 °C, en un envase de acero inoxidable, soportadas en una malla de acero galvanizado. En el calentamiento, la parafina se mantuvo levemente agitada. Pasado este tiempo se sacaron las piezas, limpiando el exceso de parafina, y se dejaron en reposo suspendidas en el aire a temperatura ambiente durante un lapso de 25 minutos. Posteriormente se pesaron sumergidas en agua destilada. Se midió la temperatura del agua destilada para tener este valor de referencia dentro del cálculo del empuje realizado por el agua en función de su densidad.

Se calculó la densidad relativa (*pr*). Esta representa la proporción del volumen de la estructura sólida respecto al volumen de la probeta, p^*/p_s , donde p^* es la densidad de la pieza porosa y p_s la del material que forma el sólido. Si la $pr < 0.3$ (30 %) la pieza se considera como sólido celular (espuma), en caso contrario se considerará como un sólido poroso [11].

Las probetas fueron secadas en el horno Thermolyne Furnatol II y posterior a esto se efectuó metalografía convencional, observando a través de un microscopio óptico Micromaster Fisher Scientific y por microscopio electrónico de barrido (MEB) marca FEI, modelo INSPECT F50.

Resultados y análisis de resultados

Análisis de los precursores

Se observa que los granos del polvo de titanio obtenidos tienen forma plana alargada y de superficies irregulares. El análisis químico del titanio en polvo compactado se muestra en la **tabla 1**.

Elementos	Porcentaje de elementos en el Titanio reciclado	Porcentaje de elementos en el Titanio, según ASTM B988-13
Nitrógeno	0,033	0,03
Carbono	0,098	0,10
Hidrogeno	0,017	0,015
Hierro	0,59	0,30
Oxigeno	0,40	0,25
Aluminio	0	0
Vanadio	0	0

Tabla 1. Composición química del titanio grado 2

Durante el proceso de limado manual, los tornillos y platinas de titanio reciclados tendían a calentarse aproximadamente a 40°C y el polvo resultante a contaminarse con acero proveniente de la lima. La **tabla 1** muestra la diferencia de 0,29 % de hierro, este residuo de hierro permanece aún después de aplicar el campo magnético al polvo obtenido por el limado. Probablemente ciertas partículas muy pequeñas y alargadas de titanio se deforman y atrapan algo de polvo de hierro, disminuyendo la eficiencia de extracción por parte del campo magnético.

Por otro lado, se observa en la **tabla 1** cómo el oxígeno aumenta 0,15 %, esto se debió al calentamiento por roce de las piezas de titanio en el proceso de limado manual al aire, causando la oxidación de las partículas de titanio.

En cuanto al grano de carbón superactivado, este tenía forma redondeada, con fracturas frágiles. Del ensayo de calcinación se obtuvo un porcentaje de carbono por el orden del 30 %, el otro 70 % corresponde a un residuo de color rojizo. Este residuo fue sometido a un análisis por DRX, mostrando su difractograma en la **figura 1**. En él se observa un bajo grado de cristalinidad.

Se identificaron las fases cristalinas presentes en el residuo mediante comparación con diferentes fichas de patrones de difracción. Las reflexiones de mayor intensidad a ángulo 2θ fueron 26.710 y 20.947, mismas que pertenecen a la fase cristalina cuarzo (SiO₂), al igual que las reflexiones menores a ángulos 2θ: 27.565; 50.202; 68.327; 54.361 y 60.079 (ficha 89 - 1961). Los picos a ángulos 2θ: 13.129, 25.517 son de la alúmina de estructura cubica (ficha 82 - 1468).

Estos resultados corroboran que los componentes principales del residuo dejado por el carbón superactivado calcinado son: SiO₂, Al₂O₃ y posiblemente proporciones menores de: Fe₂O₃, CaO, MgO, TiO₂, carbono inquemado y álcalis (Na₂O y K₂O), mismos que son compuestos propios del carbón vegetal y las arcillas [12,13]. Los picos de los álcalis y los óxidos de hierro, magnesio y calcio, son de baja cristalinidad y en consecuencia no se aprecian en el difractograma.

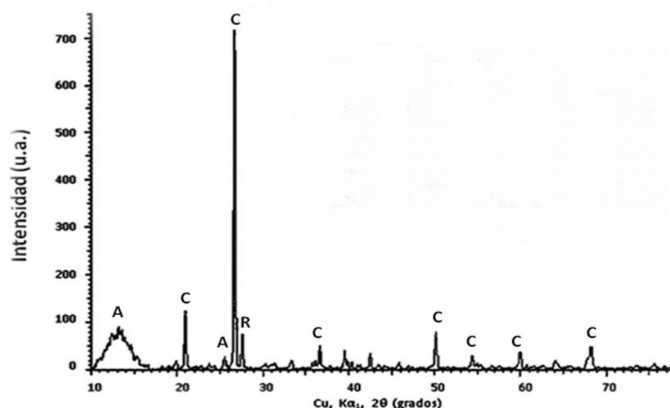


Figura 1. Difractograma del residuo rojizo dejado por el carbón superactivado calcinado a 1000 °C. En la zona superior derecha se aprecian las fases cristalinas presente en el residuo. C: cuarzo, A: alúmina cubica, R: rutilo.

El proceso de combustión de los granos de carbón superactivado, debido a la alta energía térmica generada, produce reacciones muy complejas de descomposición y transformaciones fisicoquímicas interesantes. El CSA posee una estructura porosa que facilita la movilización del oxígeno el cual reacciona con el carbono, generando altas temperaturas de combustión que descomponen los silicatos, carbonatos y otros minerales. Esta combustión produce residuos rojizos debido a la presencia de Fe₂O₃ (hematita) como lo muestra el ensayo por Fluorescencia de Rx, el cual arrojó Fe₂O₃: 2,032 %, además de SiO₂: 63,43 %, Al₂O₃: 31,07 %, CaO: 1,95 %, TiO₂: 0,36 %, K₂O: 1,14 %, ratificando lo mostrado por el difractograma de la **figura 1**.

La presencia de trazas e impurezas de elementos en el residuo del CSA, sometida a altas temperaturas, influirán decisivamente en la transformación de los compuestos silicoaluminosos, actuando como fundentes (Fe₂O₃, K₂O, CaO) o modificadores de red cristalina (Al₂O₃, TiO₂), además estos compuestos como el Fe₂O₃, contribuye a la formación de mullita, mientras que el CaO la afecta ligeramente, K₂O y TiO₂ la retardan. La presencia de calcio, y magnesio favorecen la aparición de la cristobalita [14]. La introducción de cationes modificados de red, en la fase vítrea, como el Ti⁴⁺ crea uniones

cruzadas entre los oxígenos no puenteados, esto aumenta la fuerza de unión de los enlaces iónicos pudiendo mejorar las propiedades mecánicas de la pieza desarrollada [12]. El contenido de mullita en la fase vítrea incrementa resistencia mecánica [14].

Análisis del proceso pulvimetalúrgico

El procedimiento experimental de ajuste arrojó que cuando los polvos se mezclaban en seco quedaban segregados, con granos de carbón superactivado en la superficie de la mezcla. Se probó utilizar alcohol isopropílico como aglutinante, mezclando los polvos secos en primera instancia y luego agregando $0,33 \text{ cm}^3$ de alcohol/g mezcla. La mezcla presentó buena homogeneidad.

En la compactación de la mezcla se extraía gran parte del alcohol, por lo que se bajó la cantidad de alcohol hasta que finalmente se probó con $0,16 \text{ cm}^3$ de alcohol/g mezcla, resultando muy poca pérdida de alcohol y una mezcla homogénea.

A porcentaje de 70 % de CSA, la tendencia de las piezas era no conformarse bien, aun con presiones tan altas como 700 MPa. A 200 y 400 MPa las mezclas no se compactaban en la matriz, y si lo hacían, cuando se extraía con el punzón, éstas se destruían o se destruían en la manipulación debido a su baja cohesión.

A 600 MPa las probetas con bajo porcentaje de CSA (como la de 5 %) tuvieron excelente cohesión, pero su elevada densidad implicó baja permeabilidad y, por lo tanto, bajo porcentaje de porosidad. A muy alto porcentaje de CSA las probetas presentaron dificultad para su manipulación y se destruían al tacto, mientras que para proporción de CSA de 10, 30 y 50 % la presión de compactación de 600 MPa resultó excelente, con buena cohesión e integridad física.

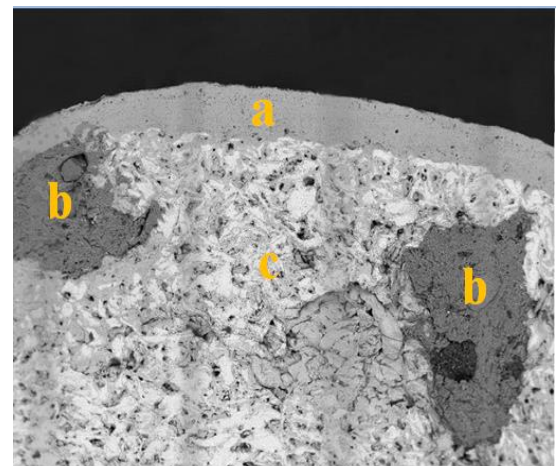
En la sinterización se eliminó el espaciador por combustión. Se observó una capa de oxidación de color marrón en todas las probetas además de dificultad en su manipulación, pues se destruían con facilidad. En virtud de la persistencia a la oxidación se procedió a colocar las probetas en una cápsula cerámica de 30 x 20 x 20 mm, con sus respectivas tapas cerámicas selladas con arcilla para evitar la entrada de aire. Las probetas resultaron con excelente cohesión, mayor integridad física y facilidad para su manipulación.

Para determinar el tiempo de sinterización más adecuado se prepararon 15 probetas con 50% de CSA (por ser este el porcentaje más crítico) compactadas a 600 MPa y sinterizadas a 800, 1000 y 1200 °C; a un tiempo de 1, 2, 3, 4 y 5 horas.

Se observaron las diferentes variaciones microestructurales, de tamaño y forma de poros, ocasionado por el tiempo de permanencia en la mufla, mediante el microscopio electrónico de barrido y microscopio óptico.

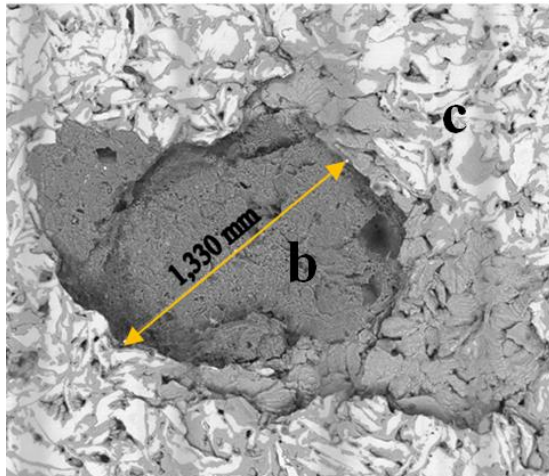
Mediante observación microestructural se constató que todas las probetas sinterizadas mostraron tres zonas de interés: zona de capa superficial externa a las probetas, zona de granos de titanio y zona de granos de CSA, tal como se muestra en la micrografía de la **figura 2**. La capa externa (a) evitó la acentuada penetración del aire al interior de las probetas, protegiendo de la oxidación excesiva a los granos de titanio (c).

Las probetas sinterizadas a 800 °C (**Figura 2, 3**), presentaron granos oscuros de carbón superactivado (b), en una matriz de granos brillantes de titanio (c) rodeados de óxido de titanio de color gris y pequeños poros ubicados entre los granos de titanio. En la micrografía de la **figura 3** se puede observar un grano de CSA parcialmente quemado de 1,330 mm de diámetro promedio.



Muestra 4CA1 80X 1 mm

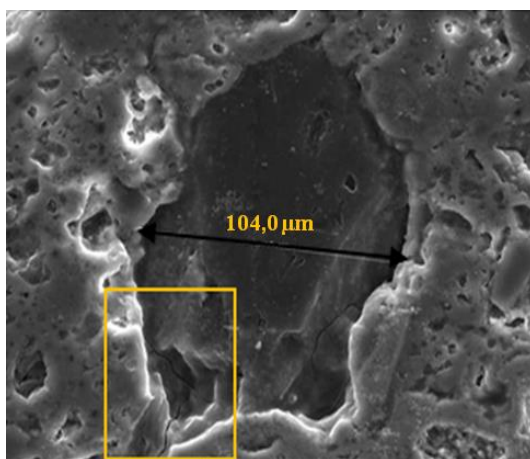
Figura 2. Micrografía de probeta sinterizadas durante 1 hora a 800 °C. Se observan: la capa superficial (a), los granos de CSA (b) y los granos de titanio (c)



Muestra 4CA1 137X 500 μ m

Figura 3. Micrografía de la probeta sinterizada a 800 °C, durante 2 horas

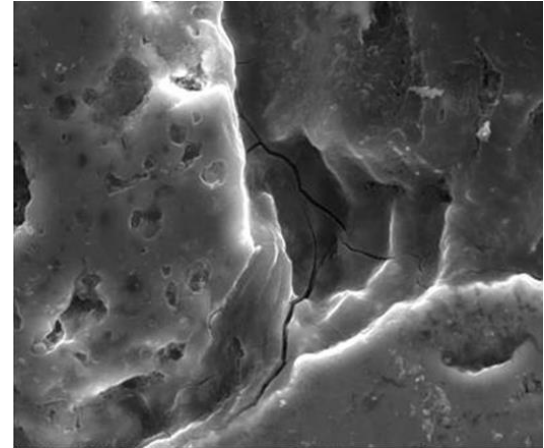
En las micrografías de las **figuras 4 y 5** se aprecian microagrietamientos. A 1000 °C, por efecto de la síntesis térmica localizada, se libera el calor necesario para la fusión incipiente del compuesto silicoaluminoso que recubre la superficie de los poros. Una vez agotada la fuente térmica extra (carbón superactivado), se detiene la fusión del compuesto, generando una capa muy delgada de fase vítrea. Dadas las diferencias entre los coeficientes de expansión térmica entre el vidrio sílice, el titanio y su óxido, se generan estas microfisuras.



Muestra 6CC2 1400X 50 μ m

Figura 4. Micrografía de probeta sinterizada a 1000 °C durante 4 horas

En estos procesos el cuarzo se transforma en *cristobalita*, creando gran variación de volumen, de hasta 17 %, lo que confiere una gran dilatación, y generando tensiones térmicas durante el enfriamiento, da lugar a microgrietitas [14, 15].



Muestra 6CC2 3000X 30 μ m

Figura 5. Ampliación de la micrografía del rectángulo de la figura 4

La **figura 6** muestra la micrografía de la probeta sinterizada a 1200 °C. En la micrografía de la izquierda se aprecia la superficie del poro (a) donde estaba el CSA (P); recubrimiento vítreo capa de color grisáceo (c) que rodea al poro de mayor dimensión (P). Se observa que los poros en la fase vítrea tienen formas redondeadas (b). La fase vítrea presenta un precipitado de color blanco en forma de barras (**Figura 7**). Cabe destacar que esta fase se segregó y globulizó en las probetas sinterizadas a 2 horas, como se muestra en la micrografía de la derecha (d).

Para una excelente osteointegración se prefieren las superficies rugosas, más que las lisas, como la observada en la micrografía de la izquierda. Se establece que el tiempo adecuado para estas probetas es de 1 hora para la sinterización (0,33 h/g). A tiempos prolongados de 2, 3, 4 y 5 horas la fase que precipitó como barras en la capa superficial interna del poro se transformó, dando una microestructura globular; lo que implicaría una destrucción de dicha estructura que afloraba en la superficie de los poros y genera la rugosidad superficial.

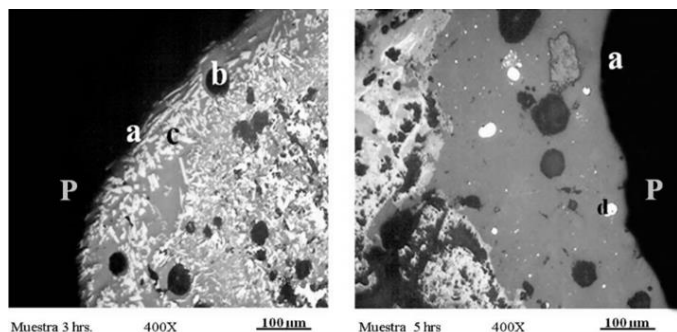


Figura 6. Micrografía de probetas con 50% CSA, sinterizadas a 1200 °C durante 1 hora (a) y 5 horas (b)

El incremento de la temperatura de la mufla, para la sinterización de las piezas a 1200 °C, aunado a la combustión completa del carbón superactivado, desarrollaron un aumento de energía térmica localizado, favoreciendo la fusión del residuo de los granos de CSA, logrando la fase vítrea deseada y la síntesis térmica de compuestos complejos. Esto contribuye a la movilidad atómica modificación la estructura química y cristalina de los compuestos silicoaluminosos de forma irreversible. Esta energía activa la descomposición del compuesto silicoaluminoso ($\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{Si}_2\text{O}$) en alúmina y sílice y la fusión de este último, interactuando con el óxido de titanio que se formó por la infiltración del titanio fundido y posterior oxidación en la zona de calcinación del CSA y con los compuestos alcalinos, alcalinotérreos propios del grano de CSA. El proceso de sinterización y vitrificación en presencia de una fase líquida viscosa, es el proceso más generalizado que contribuye al recubrimiento de las superficies, debido a que la fase líquida fluye y se ubica en la superficie de los poros creados en la calcinación del CSA.

La figura 7, representa el difractograma de la pieza sinterizada a 1200 °C y 50 % CSA, se observa que el pico de máxima intensidad a ángulo (2θ): 27.373 perteneciente a la fase rutilo (R) (ficha patrón 21-1276), al igual que los ángulos (2θ): 41,184; 68,957, también se observa pico de alta intensidad correspondientes al titanato de aluminio (TA) [15], a ángulos (2θ): 26.585, cuarzo (C) (ficha patrón 89-1961), a ángulos (2θ): 20,747; 36,698; 39,752; 40,207; 50,088; 59,857; 67,787, cristobalita (Cr) (ficha patrón 391425), a ángulos (2θ): 42,635; 44.708; 54,272; 69.762, titanio α (Ti) (ficha patrón 44 - 1294), a ángulos (2θ): 62,687. Cabe destacar que estos compuestos poseen una buena cristalinidad, en virtud de la forma fina de la línea de los picos. Existen otros picos anchos y difusos de baja intensidad, lo que implica pobre cristalinidad: alúmina (A) (ficha patrón 43-1484), a ángulos (2θ): 12,169; 32,970; 34.789; titanato de hierro (TH) (ficha patrón 89 - 2811), a ángulos (2θ):

23,789; 53.67; anortita (Ant) (ficha patrón 090465), a ángulos (2θ): 27,909; olivino (O) [5], a ángulos (2θ): 56.587.

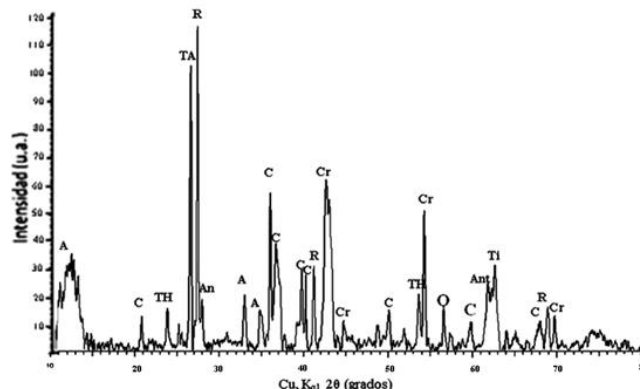


Figura 7. Difractograma de la sección transversal de la probeta de 30% de CSA y sinterizadas a 1000°C

La micrografía de la figura 8, muestra cinco puntos que representan las zonas de microanálisis por EDS, el punto 1, es un precipitado en forma de aguja distribuidas en la matriz vítrea, cuya composición química preponderante es la de óxido de titanio, (37,70 % en peso de Ti), con bajas proporciones de Fe_2O_3 (2,13 % en peso de Fe), MgO (0,44 % en peso de Mg) y Al_2O_3 (0,45 % en peso de Al). En la zona inferior derecha de la micrografía, en el borde del poro, en su superficie, se observan irregularidades dejadas por dióxido de titanio o titanatos de aluminio y hierro, al emerger estos como estructura en forma de agujas o barras.

El difractograma de la figura 7, demuestra la presencia de estos precipitados, además de cuarzo, alúmina, y cristobalita.

Los puntos 2, 3, muestran precipitados en forma de agujas y barras, en una matriz de sílice amorfa, y cuarzo. Presentaron la siguiente composición química, según el microanálisis por EDS, titanio (19,83 %; 14,50 %), aluminio (10,98 %; 7,11 %) y hierro (7,68 %, 11,32 %), los cuales corresponden a los precipitados de titanatos de aluminio y de hierro, este último de baja cristalinidad, corroborados por el difractograma de la figura 7.

El punto 4, tiene la forma característica de la cristobalita insipiente. El cuarzo se transforma en cristobalita a temperaturas más bajas gracias a la acción de catalizadores como iones de Ca^{2+} , Mg^{2+} , Fe^{2+} , mientras que el Al^{3+} retrasa la conversión del cuarzo cristobalita [14].

Los puntos 4, 5, presentaron composiciones químicas similares, según microanálisis por EDS, (Al: 7,74- 7,26, Si: 15,25-15,10, Ca: 2,31-3,54, Ti: 1,86-1,77, Fe: 1,93-2,47, Mg:

0,61 - 1,29), mostrando una fase vítrea de sílice y cuarzo, con compuestos de anortita y olivino, según difractograma de la figura 7.

El dióxido de titanio al igual que el titanatos de aluminio y hierro, presentes en algunos puntos de la matriz vítrea, tiene presencia debido a las altas temperaturas localizadas generadas por el calor de la reacción exotérmica del carbono con el oxígeno, logrando fundir el titanio ($Tf_{Ti} = 1670^{\circ}C$), que se encontraba alrededor de los granos de CSA, el cual fluyó a través de los macro y microporos del CSA, llegando al interior de la zona calcinada, distribuyéndose uniformemente. En este proceso el titanio fundido se oxidó, generando aún más calor, debido a que esta reacción también es exotérmica y mediante síntesis reactiva térmica se produjo los titanatos, la anortita y la olivina.

En las piezas sinterizadas a $1200^{\circ}C$, no se observó mullita. A pesar de que a temperaturas suficientemente altas y prolongadas, se produce mullita primaria y alúmina y, así como sílice amorfa [13]. La mullita se encuentra en todos los productos silicoaluminosos cocidos por encima de $1000^{\circ}C$ y en los cuales existen cantidades suficientes de sílice y de alúmina para su formación [13]. La inobservancia de mullita implica que los elementos alcalinos y alcalinotérreos influyeron en su no consolidación, además, la atmósfera reductora a alta temperatura como TiO_2 precipitado en la fase vítrea, tuvieron efecto inhibidora.

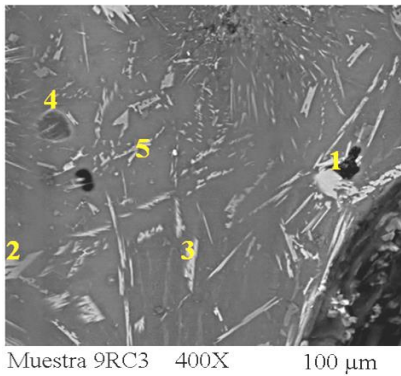


Figura 8. Micrografía de la muestra 9RC3, (1) dióxido de titanio aislado de forma irregular, (2,3) cristales de Titanatos de Fe, Al., de formas de barras y agujas, en una matriz vítrea

Para determinar la densidad y porosidades se prepararon nueve probetas cilíndricas con las variables y parámetros de trabajo adecuados para el procedimiento de mezclado, compactación y sinterizado (las cuales fueron 10, 30 y 50 % de CSA, para una mezcla de 3 gramos, presión de compactación 600 MPa, temperatura y tiempo de sinterizadas de 800, 1000 y $1200^{\circ}C$ y 1 hora). Se tomaron las temperaturas de 800 y de

$1000^{\circ}C$, para tener así un rango más amplio de referencia en cuanto a la influencia de estas temperaturas sobre la densidad y la porosidad.

Se pesaron y dimensionaron las probetas en verde, para calcular su volumen y la densidad global (tabla 2).

La compactación de la mezcla Ti-CSA se realizó en una matriz de acero con agujero cilíndrico y un punzón de igual configuración. Se aplicó una presión de 600 MPa para vencer la fuerza de roce de la masa de polvos con las paredes de la matriz, obligando al desplazamiento vertical de los granos de Ti-CSA, produciendo en la superficie de la probeta cierta fractura de los granos de CSA.

Tabla 2. Dimensiones, volumen y peso de las probetas cilíndricas en verde.

Muestra	Altura (mm)	Diámetro (mm)	Volumen (cm ³)	Peso (gr)	Densidad Global (gr/cm ³)
1CA	10,39	10,22	0,85	2,50	2,94
2CB	10,40	10,22	0,85	2,32	2,73
3CC	10,42	10,22	0,85	2,23	2,62
4CA	10,42	10,22	0,85	2,49	2,93
5CB	10,34	10,22	0,85	2,30	2,71
6CC	10,32	10,22	0,85	2,25	2,65
7CA	10,33	10,22	0,85	2,53	2,98
8CB	10,39	10,22	0,85	2,31	2,72
9CC	10,43	10,22	0,86	2,21	2,57

La irregularidad de las partículas provocó que la fluidez y densidad de empaquetamiento resultasen reducidas. Se observó que la densidad global de las probetas en verde disminuyó en función del porcentaje de CSA (10, 30 y 50 %) pues a mayor porcentaje de CSA, menor era la densidad (Tabla 2), esta densidad depende del peso de la probeta.

El peso de las probetas disminuye debió a la densidad aparente de los granos de CSA ($0,4\text{ g/cm}^3$ en promedio) esta es mucho menor que la densidad aparente del titanio ($3,78\text{ g/cm}^3$); ambas calculadas con el flujómetro Hall. A mayor porcentaje de CSA, menor era su peso, así las muestras 3CC, 6CC y 9CC pesaron menos que las 1CA, 4CA y 7CA (su densidad global fue menor).

En el proceso de compactación, los granos de CSA se deberían romper (por ser estos muy frágiles) generando polvos finos que llenarían los espacios vacíos entre los granos de la mezcla de los polvos, dando un mayor empaquetamiento y aumentando la densidad. Esto era lo esperado, pero esto no ocurrió, lo que significa que la presión aplicada no es suficiente para romper los granos de CSA, manteniendo su integridad física y mayor cohesión, obteniendo piezas de fácil manipulación. Lo anterior resulta benéfico y positivo debido a que los poros que generan el espaciador (su forma y tamaño) estarán íntimamente ligados a la morfología de los granos del polvo de CSA. Se puede observar como la densidad global en verde es relativamente baja (rondando los valores de 2,35 g/cm³) y equivalente al 52,3 % de la densidad teórica del titanio (4,50 g/cm³) [1], implicando así una alta densidad de poros entre los granos.

La integridad física de las probetas está relacionada por la unión mecánica de los granos de los polvos de titanio y CSA. El titanio grado 2 posee una deformación del 20%, lo que garantiza una buena ductilidad y, en consecuencia, los granos de titanio grado dos también lo serán; esto produce una mayor deformación dando uniones mecánicas mediante el mecanismo enlazante propuesto por los autores Blesa, M., M^a J., 2002 14[13].

Conformadas las nueve piezas, se colocaron en el interior de una cápsula cerámica (con un volumen de 120 cm³) selladas con tapas refractarias y arcilla, el conjunto se colocó en el interior de la mufla. Se sinterizaron teniendo en cuenta el procedimiento de ajuste para el calentamiento y enfriamiento. Las probetas sinterizadas mostraron buena cohesión. Se pesaron y dimensionaron, **tabla 3**.

En la **tabla 3** se aprecia como el peso y la altura se incrementan, mientras que el diámetro y el volumen disminuye; por lo que las contracciones volumétricas se acentúan a medida que aumenta el porcentaje de CSA. El aumento de peso de las muestras sinterizadas puede explicarse entendiendo la reacción del titanio con el oxígeno del aire contenido en la cápsula cerámica, además del atrapado dentro de los intersticios de los granos de la mezcla (Ti-CSA) en el proceso de compactación.

Muestra	Altura (mm)	Diámetro (mm)	Volumen (cm ³)	Peso (gr)	Densidad Global (gr/cm ³)
1CA1	10,50	10,08	0,84	3,09	3,68
2CB1	10,60	10,12	0,85	2,72	3,20
3CC1	10,90	9,50	0,77	2,60	3,38
4CA2	10,87	10,00	0,85	3,10	3,65
5CB2	10,58	10,10	0,85	3,14	3,69
6CC2	10,34	10,09	0,83	2,89	3,48
7CA3	10,45	10,15	0,85	3,72	4,38
8CB3	10,80	10,00	0,85	3,63	4,27
9CC3	11,00	9,54	0,79	2,70	3,42

Tabla 3. Dimensiones, volumen y peso de las probetas sinterizadas.

Se aprecia que, a mayor temperatura, menor es el peso de las muestras; esto es proporcional al porcentaje de titanio, e inversamente proporcional al aumento del contenido de CSA. Debido a la calcinación del CSA y a una menor reacción del titanio con el oxígeno del aire (por haber menos proporción de Ti) las probetas sinterizadas pesaron menos. Así las muestras 3CC1, 6CC2 y 9CC3 tuvieron una menor masa. La altura de las muestras aumentó, como consecuencia de la oxidación progresiva de las partículas de titanio. La capa de óxido de titanio se incrementa a medida que aumenta la temperatura, hasta 500 °C; el oxígeno proviene del aire atrapado en los intersticios creados entre las partículas en el proceso de compactación. A mayor longitud de la probeta, mayor área que recorrer, mayor transformación y por lo tanto mayor crecimiento.

La contracción volumétrica se da en las muestras con mayor porcentaje de CSA; esto da una idea más general de la contracción total sufrida en la etapa de sinterizado. Cabe destacar que la contracción es mucho mayor en las muestras 3CC1 y 9CC3, por lo que este valor se debe tomar como importante para las evaluaciones de la contracción del material propuesto como biomaterial de Ti-CSA.

Análisis de la determinación de la densidad global, porosidad total y porosidad interconectada

La **tabla 4** muestra que los parámetros que ejercen control sobre la porosidad (y consecuentemente sobre la densidad aparente) son el porcentaje de CSA y la temperatura. A mayor porcentaje de CSA y mayor temperatura de sinterización, mayor es el porcentaje de porosidad (y como consecuencia menor densidad); así se tiene que para la probeta 9CC3 el resultado fue una porosidad total de 77,61 y una interconectada de 55,16. Se observa que la densidad relativa está entre el 71 y el 56 %, correspondiendo la más baja a la probeta 9CC3 (por lo que se considera a este material como sólido poroso y no celular, ya que para que este sea celular o espuma, la densidad relativa debe ser menor a 30%) [11].

MUESTRA	Densidad aparente (gr/cm ³)	Porosidad total (%)	Porosidad Interconectada (%)	Densidad relativa (gr/cm ³)
1CA1	3,20	40,82	10,87	0,71
2CB1	2,92	54,19	15,84	0,65
3CC1	2,72	65,25	31,25	0,61
4CA2	3,52	27,87	25,75	0,78
5CB2	3,58	25,79	30,45	0,79
6CC2	2,98	51,07	43,83	0,66
7CA3	3,62	24,34	31,60	0,80
8CB3	3,12	44,05	35,84	0,69
9CC3	2,53	77,61	55,16	0,56

Tabla 4. Densidad aparente, porosidad total, porosidad interconectada y densidad relativa a temperaturas de sinterización de 800, 1000 y 1200 °C

Aun cuando existe el fenómeno de contracción o de densificación, el incremento de la porosidad se debe a la generación de gases (fundamentalmente CO y CO₂) producto de la combustión del carbono del CSA. Estos gases atraviesan las muestras a través de los poros dejados entre los granos de titanio, creando conductos y creando mayor interconectividad de poros y haciendo menos densas las muestras. Es lógico pensar que la porosidad final en el sinterizado proviene de la tendencia a minimizar la energía superficial durante el sinterizado, misma que provoca una densificación natural [15], pero en este caso la generación de gases en el proceso de sinterización produce todo lo contrario.

A partir de los 1050 °C las piezas mostraron un incremento de la contracción lineal. Este cambio de tendencia puede relacionarse con el comienzo de la vitrificación [12]. El proceso de sinterización y vitrificación en presencia de una fase líquida

viscosa es el proceso más generalizado que contribuye a reducir la porosidad, debido a que la fase líquida fluye a los poros y los sella. En la sinterización a 1200 °C tiene lugar la formación de un vidrio viscoso que rodea las partículas más refractarias y que, bajo las fuerzas de la tensión superficial creada por los finos poros, tiende a aproximar las partículas aumentando la contracción y reduciendo la porosidad del producto. Para una cocción satisfactoria, la cantidad y viscosidad de la fase amorfa debe ser tal que permita una densificación apropiada con un ciclo de cocción razonable sin que se produzcan deformaciones [14].

Debido a los procesos de difusión y a la tendencia a la mínima energía superficial, se produce una coalescencia de poros, desde su forma original irregular hasta la final esférica o equiaxiales. Esto también produce cambios de densidad y dimensionales.

La **grafica 1** muestra la variación de la porosidad interconectada con respecto a la temperatura y el porcentaje de CSA de las probetas sinterizadas a 800, 1000 y 1200 °C.

Se aprecia como el incremento de la temperatura y de CSA no es proporcional con respecto al porcentaje de porosidad interconectada.

La muestra 9CC3 (con un 50 % de CSA y temperatura de 1200 °C) exhibe una tendencia exponencial. Se aprecia una porosidad máxima de 55 %, la cual es relativamente alta. A la presión de compactación de 600 MPa, los valores de porosidad permanecen cercanos a los valores del porcentaje de espaciador que contenía las muestras en verde, con excepción de las muestras sinterizadas a 1200°C, que están por encima:

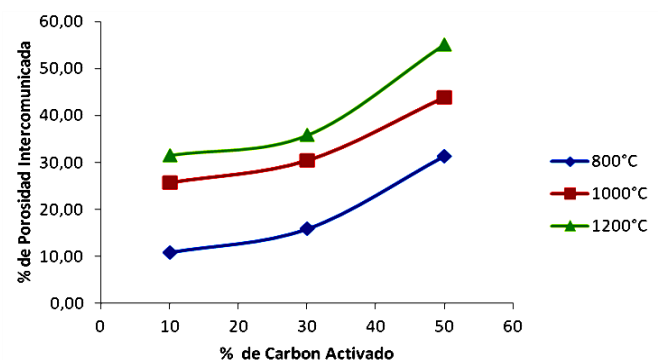


Gráfico 1. Se aprecia la variación de la porosidad interconectada con respecto a la temperatura y el porcentaje de CSA.

La porosidad abierta es el principal componente de la porosidad total, pero, incluso trabajando con elementos altamente porosos, aun existirá una pequeña fracción de poros no interconectados. La presión de compactación contribuye a la densificación y a la estabilidad dimensional. Existe una muy marcada influencia del CSA en cuanto a la contracción y a la densificación. Puede observarse cómo los valores son bastante bajos en todos los casos.

La influencia de factores como la temperatura de sinterizado o el tamizado del CSA pueden observarse claramente en la muestra 9CC3 (con un porcentaje de 50 % de carbón superactivado en la mezcla y una temperatura de sinterización de 1200 °C), en esta muestra se lograron porosidades de alrededor de 55 %. La energía libre del sistema se incrementa en función del aumento de la temperatura en la sinterización. Esta condición facilita los fenómenos de difusión en estado sólido y una mayor integridad de los elementos químicos presentes en la muestra, controlando de esta manera el tamaño, la distribución y morfología de los poros.

Conclusiones

Se desarrolló un método para obtener piezas con porosidad intercomunicada de 55 % y poros entre 100 y 500 μm , recubiertos superficialmente con una fase vítrea base sílice, mediante pulvimetalurgia convencional y 50 % de carbón superactivado como espaciador (mezclado con titanio reciclado) compactados a 600 MPa, sinterizadas a 1200 °C y encapsulados en atmósfera reductora.

Este atractivo método resulta interesante pues satisface un grupo de características deseables tales como: tecnología de aplicación relativamente sencilla, materias primas asequibles y de bajo costo, además de no necesitar de instalaciones especiales.

Agradecimientos

El autor desea agradecer al Instituto Universitario de Tecnología de Puerto Cabello, por el apoyo prestado para la realización de esta investigación y al Centro de Ingeniería de los Materiales y Nanotecnología del Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas (IVIC) y a Venezolana del Vidrio (VENVIDRIO).

Referencias bibliográficas

- [1] Oldani, C. (2012), **El Camino del Titanio como Material de Reemplazo Óseo**. Departamento de Materiales, Facultad de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba, Argentina.
- [2] Domínguez, S. R., (2011), **Desarrollo y Caracterización de Espumas de Titanio para uso Biomédico Obtenidas por el Método de Espaciadores**, trabajo de investigación para optar al título de máster en ingeniería mecánica y materiales, Universidad Politécnica de Valencia, España.
- [3] Lascano F., S. K., 2012, **Obtención y caracterización de Ti c.p. poroso para aplicaciones biomédicas**, Tesis Doctoral, Universidad del Norte, Barranquilla, Colombia.
- [4] González R., J.; Paz R., A.; Fernández C., D.; Parodi B.; Pazos L.; Ybarra G., (2009), **Deposición de Recubrimientos Bioactivos sobre Titanio Empleando Disoluciones con Alto Contenido de Calcio y Fósforo**, Congreso Sam/Conamet 2009 Buenos Aires, pp. 1987-1992.
- [5] Monsalve A., M. J. (2014), **Síntesis y Deposición de Biovidrios Pertenecientes al Sistema 31SiO₂ - 11P₂O₅ - (58-X) CaO -X MgO, Sobre Aleaciones de Titanio y Acero AISI 316L Mediante Proyección Térmica**. Trabajo Doctoral, Facultad de Ingeniería, Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia.
- [6] Peón, E.; Domínguez, C.; Pérez, H., Galván, J. C., Rodríguez O., J. A., Pavón, J. J., Torres, Y., (2017) **Deposición Sol-Gel de Hidroxiapatita Bioactiva Sobre Titanio Poroso**. Revista Cubana de Investigaciones Biomédicas. 36(1)
- [7] Perea G., M. Á. (2016), **Evaluación Estructural del Implante Dental Sometido a Diferentes Torques de Inserción. Estudio "In Vitro"**, Tesis Doctoral, Facultad de Odontología, Universidad Complutense de Madrid, España.
- [8] Lemos, A., Gatti, M. F., Ekkert, T., Kang, K. W., Llorente, C. y Bilmes, P. (2017), **Estudio de la Bioactividad de Implantes Dentales de Titanio C.P. G4 Tratados Superficialmente**. 4ª Jornadas ITE, Facultad de Ingeniería – UNLP.
- [9] Mendoza R., M. (2011), **Evaluación del Comportamiento Electroquímico de Biomateriales Metálicos Comerciales**, Tesis de Grado de Ingeniero Mecánico, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional Autónoma de México.
- [10] Sequeda, L. G.; Díaz, J. M.; Gutiérrez S. J.; Perdomo S. J.; Gómez O. L., (2012), **Obtención de Hidroxiapatita Sintética por Tres Métodos Diferentes y su Caracterización para ser Utilizada como Sustituto Óseo**, Revista Colombiana de Ciencias Químico-Farmacéuticas, Volumen 41, N.º 1, pp. 50-66.
- [11] Amigó, V., Romero, F., Salvador, M.D. y Busquets, D. (2007), **Reactividad matriz-refuerzo en compuestos de matriz de titanio Pulvimetalúrgico**, Revista de Metalurgia, Vol. 43 (6), PP. 434-447.
- [12] Cardona C., Y. V. (2013), **Evaluación de la Incidencia de TiO₂ Soportado en una Arcilla Natural de Tipo Anfíbol Sobre la Fotodegradación del 2- Clorofenol**, Trabajo de Grado, Facultad de Tecnología Escuela, Universidad Tecnológica de Pereira, Risaralda, Colombia.
- [13] Carrasco, B., H., (2010), **Valorización de Cenizas de Plantas de Biomasa en la Estabilización de Suelos de Carreteras**. España, Escuela Politécnica Superior de Jaén.
- [14] Vacca, M. C. (2010), **Recubrimiento de Superficies Arquitectónicas con Piezas Cerámicas**, Tesis doctoral, Escuela Técnica Superior de Arquitectura U.P.C. Departamento de Construcciones Arquitectónicas I, Barcelona, España.
- [15] Fonseca A. P., Baptista J. (2012), **Efecto de la Estequiometría y de la Temperatura de Cocción en el Desarrollo de la Fase Al₂TiO₅**, Boletín de la Sociedad Española de Cerámica y Vidrio, Vol. 52, (2), pp. 40-49.

La fibra de carbono irrumpe en el automovilismo

Alan Joel Miralrio Pineda

Tecnológico de Monterrey, Campus Toluca, Eduardo Monroy Cárdenas 2000, 50110 Toluca, Estado de México, México.

miralrio@tec.mx

El **automovilismo** es conocido por servir de laboratorio para la más alta tecnología. La Química y las Matemáticas se ponen al servicio de los equipos de competición (**escuderías**) con el último propósito de ser los más rápidos en la pista.

Lo más importante es darle a los pilotos autos confiables, ligeros y tan seguros como sea posible; por lo tanto, es natural que la **ciencia de materiales** juegue un papel fundamental en el diseño y construcción de autos de competencia.

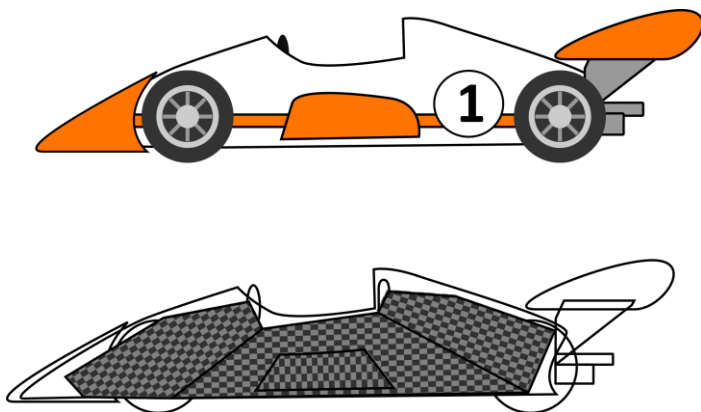


Figura 1. Arriba. Silueta típica de un auto de Fórmula 1™ de los años 80's. Abajo. Esquema de su monocasco de fibra de carbono dentro del chasis.

A pesar de que convivimos a diario con cientos de vehículos, los que son utilizados para competición son muy diferentes a los que empleamos como transporte. Anteriormente los

materiales más usados eran metales tales como el acero y el aluminio. Actualmente se emplean soluciones de lo más variadas y exóticas, de las cuales la **fibra de carbono** seguramente es la más conocida por la población en general.

Durante la década de los años 70 del siglo pasado, la fibra de carbono ya se empleaba con fines militares (Lewis, 1994), en aviones comerciales (Whitney, 1973) y naves espaciales (AZO Materials, 2014), pero no fue hasta 1981 cuando un par de automóviles introdujeron este novedoso material en el mundo de la Fórmula 1™ y del automovilismo en general (F1technical.net, s/f). Uno de ellos fue el McLaren MP4/1, diseñado por John Barnard (McLaren Automotive Limited, s/f).

Este auto sustituyó al aluminio (que se venía usando en ese entonces en la construcción del **monocasco**) por una estructura de fibra de carbono. El monocasco de un auto puede considerarse como una **cápsula de supervivencia**, y ésta debe mantener a salvo al piloto en caso de sufrir un impacto a alta velocidad (**Figura 1**). Así, aunque el **chasis** se destruya por completo, el monocasco debe permanecer lo más completo e inalterado posible con el propósito de evitar que el piloto sufra heridas de gravedad. Es muy claro que no cualquier material puede usarse con este fin, pues debe resistir las enormes fuerzas provocadas por la abrupta desaceleración. Además de ser resistente mecánicamente, también debe ser capaz de soportar altas temperaturas, puesto que siempre se corre el riesgo de que el vehículo quede envuelto en llamas. Todas esas condiciones tan extremas se hicieron presentes en el Gran Premio de Italia de 1981 cuando el piloto John Watson sufrió un aparatoso choque a casi 241 km/h. Watson salió ileso gracias al avanzado diseño del MP4/1. (McLaren Automotive Limited, s/f). Este acontecimiento dejó muy en claro que la fibra de carbono era el camino a seguir en un mundo donde el riesgo coexiste con el alto rendimiento.

La fibra de carbono resultó ser el material ideal para un mundo en el cual, el peligro y el alto rendimiento conviven, el automovilismo.

¿No le suena un poco *raro* que algo hecho de carbono (como el que se encuentra en los lápices) muestre esas poco convencionales características? Empecemos por lo que ya conocemos acerca del carbono. Imaginemos que tomamos una de esas puntillas de los lapiceros (todos sabemos que es un objeto que se rompe con facilidad); por el contrario, es muy difícil tratar de alargar o comprimir dicha puntilla a lo largo de su eje (Figura 2). De hecho, lo más seguro es que la puntilla de grafito se rompa antes de que notemos algún cambio en su tamaño. Algo similar pasa en el caso de la fibra de carbono en donde se requiere mucha energía para romper cada *fibra*. (Buckley & Edie, 1993)

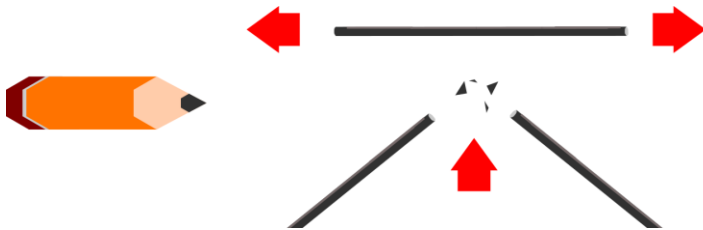


Figura 2. Izquierda. Lápiz con punta de grafito. Derecha. Fuerzas, de misma magnitud, aplicadas en dirección del eje de una barra de grafito y perpendicular al eje.

En primer lugar, esa cosa a la que llamamos fibra de carbono está formada por *filamentos*, que son parecidos a hilos y también a las puntillas de grafito, pero unas diez veces más delgados que un cabello humano (**Figura 3**) (Wolfram, 2003). Por ejemplo, los filamentos de la fibra Torayca® T700S producidos por la firma japonesa Toray tienen un diámetro de solo 7 μm (Toray Composite Materials America, Inc., s/f). En su interior, cada filamento está formado por pequeñas estructuras parecidas al grafito, pero alineadas de una forma un tanto diferente. Pero antes de hablar de su estructura hablemos de dónde surgen sus propiedades y por qué este material no es tan frágil como el grafito.

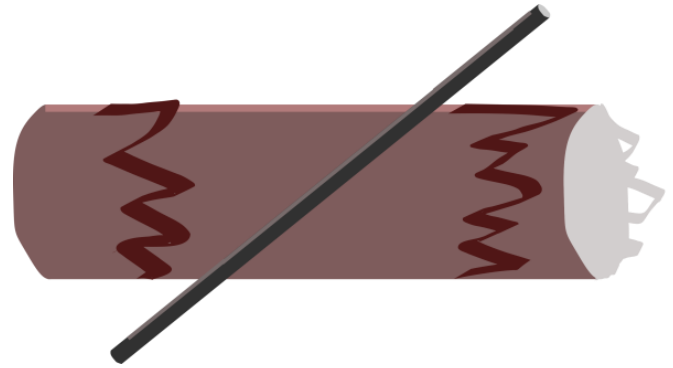


Figura 3. Representación de la proporción 1:10 del diámetro de un filamento de fibra de carbono en comparación de un cabello humano.

Para explicar lo anterior debemos recordar que toda la materia que nos rodea está compuesta por *átomos*. Es muy común imaginarse a cada átomo como un pequeño sistema solar, donde unas partículas llamadas *electrones* dan vueltas alrededor de un *núcleo* (de forma similar a los planetas al girar en torno al Sol). A su vez el núcleo está formado por otras partículas, llamadas *protones* y *neutrones*. El número de protones que se encuentran en un núcleo determinan al *elemento químico* del cual se trata. En nuestro caso, el átomo de carbono está formado por seis protones en el núcleo y seis electrones alrededor de él (Figura 4). Esto nos bastará para poder explicar las inusuales propiedades de la fibra de carbono y de otros *supermateriales* que veremos más adelante.

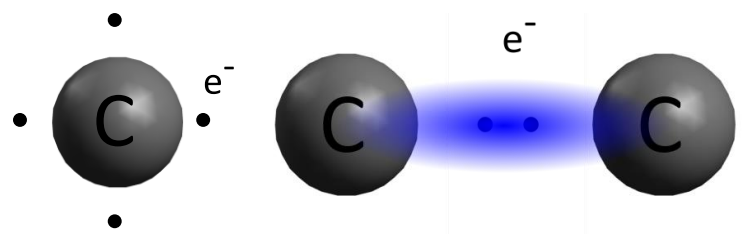


Figura 4. Izquierda. Átomo de carbono y sus 4 electrones de valencia. Derecha. Dos átomos de carbono formando un enlace covalente al compartir un electrón cada uno.

Un nuevo **compuesto químico** se forma cuando dos o más átomos se encuentran lo suficientemente cerca como para interactuar entre sí. En el caso del carbono, algo muy común es que use cuatro de sus electrones, llamados **electrones de valencia** (Figura 4), para compartirlos con otros átomos y así formar un **enlace** entre ellos. El tipo de enlace formado al compartir electrones se conoce como **covalente** (Figura 4). De este modo, los electrones sirven como un “pegamento” que mantiene unidos a los átomos. En el caso del grafito, los átomos de carbono se encuentran apilados en múltiples capas, como en una pila de hojas de papel. En cada capa los átomos de carbono se encuentran “acomodados” en una **red hexagonal** (como la de un panal de abejas) por lo que cada carbono tiene tres vecinos (Figura 5).



Figura 5. Izquierda. Estructura del carbono en forma de grafito. Derecha. Muestra de una pieza de grafito de origen natural (Wikimedia Commons, s/f).

Como se dijo antes, los átomos de carbono cuentan con cuatro electrones para dar o compartir con otros átomos. En el grafito, cada carbono usa tres de sus electrones para compartirlos con sus primeros vecinos, pero, ¿qué sucede con el cuarto electrón de cada uno de estos carbonos?, ¿dónde quedó? Resulta que esos electrones están perdidos, aunque para ser más precisos, se dice que están **deslocalizados**. En lugar de moverse entre dos átomos, como en el enlace covalente (Figura 6), los electrones deslocalizados pueden moverse por toda la red hexagonal. ¡Y voilà! Todos estos electrones deslocalizados servirán como pegamento para unir a todos los átomos de una misma capa (Figura 6). El único inconveniente es que, mientras los átomos en un plano están fuertemente unidos, la unión entre planos es muy débil y se pueden desplazar fácilmente.

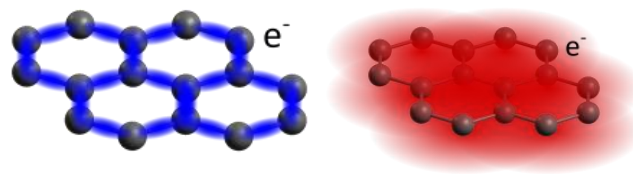


Figura 6. Izquierda. En azul se muestran las zonas donde se podrían encontrar los electrones en un enlace covalente. Derecha. En rojo se exponen las regiones donde se podrían encontrar los electrones deslocalizados.

Ahora que ya entendimos la estructura interna del grafito podemos explicar algunas cosas usuales. El uso más común que le damos al grafito se debe a que deja marcas cuando se pasa sobre un papel; esto se debe a que los planos de grafito se pueden desplazar fácilmente y el trazo que deja está conformado precisamente por esas capas que se quedan adheridas en la superficie. Tal como si fueran las mismas hojas de papel (de la analogía anteriormente planteada) que se esparcen sobre una mesa. Por otro lado, un paquete de muchas hojas de papel, imaginando que éstas fueran las capas del grafito, es muy difícil de romper si se tira de los extremos. Entre más hojas tengamos, más difícil será romper el paquete completo. El problema con el grafito de las puntillas radica en que sus capas de carbono no están alineadas y apiladas en la misma dirección, por lo que son fáciles de separar.

Es curioso conocer que, en algunas ocasiones sí se emplean los cuatro electrones del carbono para unirse entre sí mediante enlaces covalentes, y es así que se forma el diamante (Figura 7), que es la sustancia natural más dura de todas, aunque sus aplicaciones son muy diferentes a las que se logran usando fibra de carbono.

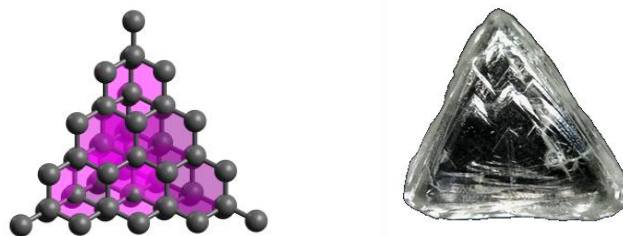


Figura 7. Izquierda. Estructura de carbono en forma de diamante. Derecha. Diamante en estado natural (Wikimedia Commons, s/f).

Aclarados esos puntos, ¿cuáles son entonces las diferencias entre las fibras de carbono y el grafito (que le dan su gran fortaleza)? Podemos resumirlo afirmando que la fibra de carbono tiene muchos paquetes de grafito alineados, en una misma dirección, alrededor de un mismo eje. De hecho, vistas desde cerca, las estructuras del grafito y de la fibra de carbono son prácticamente idénticas (**Figura 8**). Existen tantas variedades de fibras de carbono como formas de “enrollar” y alinear paquetes de grafito que podamos imaginar; con ello se obtienen fibras con propiedades ligeramente diferentes. No obstante, todas tienen en común que su fortaleza se encuentra exclusivamente en la dirección del eje. Para lograr que el material sea resistente en todas las direcciones se necesitará formar un “tejido” con dichas fibras. Tal vez eso es lo más característico de este material, la forma en que se necesitan formar entramados con las fibras. De hecho, el “tejido” de fibras de carbono es muy similar a la tela común (**Figura 9**), la que utilizamos para elaborar ropa, así de flexible y ligera.

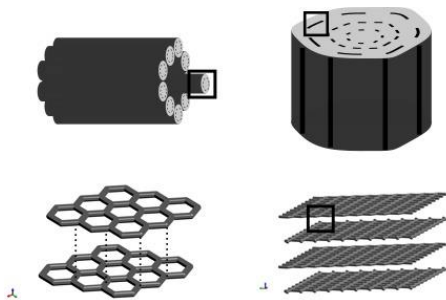


Figura 8. Esquema de todas las estructuras que se encuentran en una fibra de carbono. A) Filamentos. B) Arreglo axial de las estructuras de grafito C) Pila de capas de carbono. D) Detalle de la estructura del grafito.

Hay temas importantes que aún no hemos tratado. Si los metales son duros, resistentes y fácilmente laminables, ¿por qué las escuderías se empeñan tanto en utilizar materiales como la fibra de carbono? Pues bien, la respuesta radica en *el peso* que se puede ahorrar utilizando fibra de carbono en lugar de metales. Por poner un ejemplo, una hoja de fibra de carbono T700S (Toray Composite Materials America, Inc., s/f) será 4.3 veces más ligera (menos densa) que una de acero estructural ASTM A36 (Metalinfo, Eagle International Software, s/f) o 1.5 que otra de aluminio 2014-T6 (MatWeb, LLC., s/f). Resulta todavía más sorprendente que un filamento de esa misma fibra de carbono (Toray Composite Materials

America, Inc., s/f) pueda cargar casi 9 veces más peso, sin romperse, que un alambre de acero (Metalinfo, Eagle International Software, s/f) de las mismas dimensiones o 10 veces lo que uno de aluminio (MatWeb, LLC., s/f).

Estos materiales también pueden resistir temperaturas de hasta 300 °C, en presencia de aire, sin sufrir daños (Pouliot Laforte & Laberge Lebel, 2018). Todas estas razones lo hacen idóneo en un sinfín de aplicaciones, aunque el proceso de manufactura de una pieza de fibra de carbono sea, aún, un proceso costoso y casi artesanal.

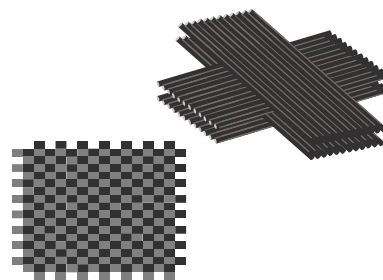


Figura 9. Arriba. Esquema de un cruce de filamentos de fibra de carbono. Abajo. Entramado típico de fibra de carbono.

Elaborar piezas de fibra de carbono es un proceso bastante parecido al de hacer una piñata, ¡qué revelador! Hacer piñatas es un proceso que casi todos los mexicanos conocemos a detalle. Primero se requiere de un objeto que nos sirva de molde. En el caso de la piñata, esto puede ser un globo inflado con aire; mientras que para un alerón (una parte con forma de ala que se puede encontrar al frente o detrás de un auto de competencia) se requiere de un molde de la pieza, lo más perfecto posible (**Figura 10**). Ya con los moldes listos, se necesita de papel periódico humedecido en pegamento conocido como “engrudo” (en el caso de la piñata); para el alerón, los “tejidos” de fibra de carbono se impregnan con una resina. Para ahorrarnos detalles, ambos son pegamentos que se endurecen al secar y capaces de aportar rigidez extra a la pieza. El molde se recubre con varias capas de papel (o de fibra de carbono, según sea el caso) (Figura 10). Se pueden añadir más capas donde se requiera que el objeto sea, todavía, más resistente, y menos donde se quiera ahorrar peso. También es muy importante que el tejido de la fibra vaya en la dirección en la que se necesita la máxima resistencia, esto se hace para evitar que se rompa con “facilidad”.

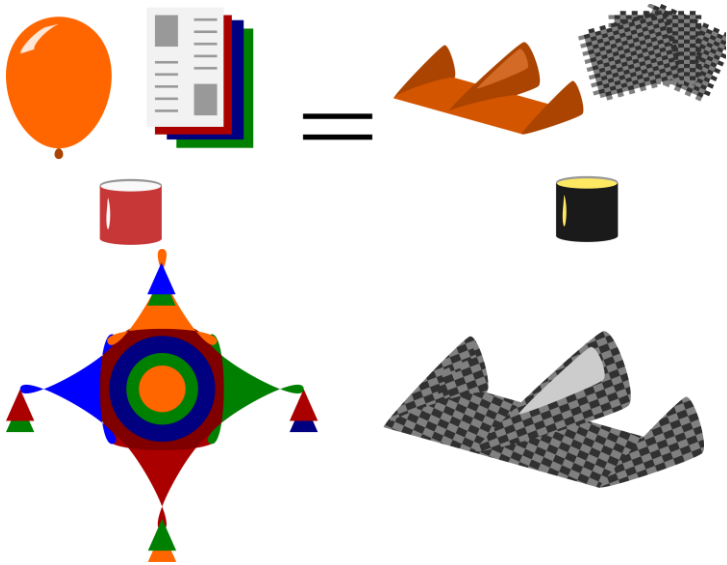


Figura 10. Arriba. Ingredientes fundamentales para elaborar una piñata y una pieza de fibra de carbono.
Abajo. Resultado final.

Es en el último paso del proceso en el que sí encontraremos diferencias: para la piñata solo se necesita pegarle las partes faltantes (para darle la forma deseada) y dejarla secar al Sol; en el caso de la pieza de carbono, ésta se mete en bolsas a las que previamente se les extrajo todo el aire. El vacío generado sirve para remover las burbujas que pudieran encontrarse atrapadas entre las láminas y la resina (las cuales la harían frágil). Después de eso, en lugar de un secado común bajo el Sol, se mete el objeto en un tipo especial de olla a presión llamado *autoclave*. Dentro de este tipo especial de “olla”, se somete la pieza a altas temperaturas y presiones. La pieza se deja “cocinar” el tiempo necesario para que ésta alcance las propiedades requeridas.

En algunos casos, como el del monocasco, se necesita que el objeto sea mucho más grueso que unas cuantas fibras de carbono pero que siga siendo muy ligero. Para lograr algo así de complejo se hace un “sándwich” con láminas de fibra de carbono y una rejilla de aluminio en forma de panal de abeja (**Figura 11**). Igual que antes, se usan resinas y adhesivos especiales para que el *material compuesto* permanezca fuertemente unido (Askeland & Wright, 2015).

Esto le confiere el grosor necesario con tan solo una fracción del peso de una pieza sólida de metal o de la misma fibra de carbono. En el mundo del automovilismo es común ver materiales compuestos, mismo que toman ventaja de las propiedades de cada una de las cosas que lo conforma.

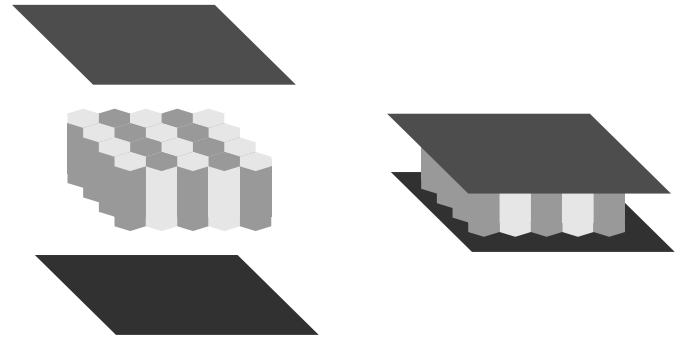


Figura 11. "Esquema de un material compuesto de fibra de carbono con interior de aluminio en forma de panal de abeja.

Aún hay algo que no hemos discutido: si la fibra de carbono es tan resistente, ¿por qué casi nunca la vemos presente en los autos de la calle, en nuestro día a día? La respuesta radica en su elevado costo: elaborar una sola de estas piezas es un proceso laborioso y la industria prefiere aquello que es más fácil y barato de producir. La fibra de carbono no se encuentra disponible en la naturaleza, como sí se encuentran los metales; de ahí que la fibra de carbono sea denominada *sintética* (debe crearse en el laboratorio a partir de síntesis). El cómo y el cuándo se obtuvo la fibra de carbono por primera vez aún no queda del todo claro, algunos dicen que se obtuvo por primera vez en los laboratorios de Thomas Alva Edison (American Chemical Society, s/f), en sus intentos por obtener filamentos para las lámparas incandescentes, aunque lo más probable es que ya se haya obtenido antes de eso. Lo que sí queda claro es la fecha y el lugar en los que surgió el método más común para su producción, un proceso desarrollado en los años 60 por el Dr Akio Shindo de la Agencia de Ciencia Industrial Avanzada y Tecnología de Japón (World Intellectual Property Organization, s/f).

La fibra sintética llamada *poliacrilonitrilo (PAN)* (ampliamente usada para elaborar ropa de estambre) es utilizada como base para la obtención de las fibras de carbono.

El PAN es un polímero (**Figura 12**), esto significa que es similar a una cadena en la que cada eslabón se encuentra formado por una molécula de un monómero (en este caso, acrilonitrilo) (**Figura 12**).

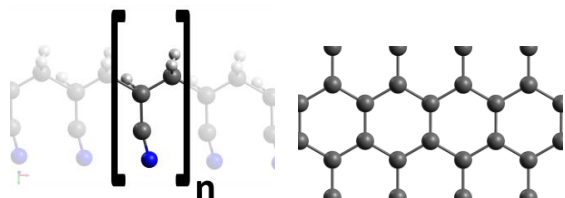


Figura 12. Izquierda. Cadena de poliacrilonitrilo (PAN) y entre corchetes su monómero, el acrilonitrilo (C_3H_3N).

Derecha. Estructura hexagonal de una capa de grafito como las obtenidas después de la carbonización y grafitización del poliacrilonitrilo.

Este polímero se **carboniza** por varios minutos, en un proceso en el cual las fibras de PAN se calientan a temperaturas de entre 1500 y 2000 °C (Askeland & Wright, 2015), en ausencia de oxígeno para evitar que éstas se quemen. Gracias a esto, las cadenas de PAN se unen, formando anillos de carbono similares a los del grafito. Además, el hidrógeno y el nitrógeno que se encuentran en el poliacrilonitrilo se “desprenden” de la fibra. Después de esto se hace la **grafitización**, en la cual se aumenta aún más la temperatura (2500 – 3000 °C) para eliminar por completo los átomos indeseados (Askeland & Wright, 2015). Al mismo tiempo, se debe aplicar tensión a la fibra para que las láminas de carbono tengan la misma alineación, obteniendo múltiples paquetes de grafito en la dirección del eje. Es posible añadir más pasos a la elaboración de la fibra de carbono con el fin de mejorar (todavía más) sus propiedades.

La fibra de carbono es sorprendente. Tanto como muchos otros novedosos materiales que pueden tener grandes aplicaciones en el automovilismo y en nuestra vida cotidiana.

Referencias

- American Chemical Society. (s/f). High Performance Carbon Fibers - National Historic Chemical Landmark. *American Chemical Society*. Recuperado octubre 8, 2018, a partir de <https://www.acs.org/content/acs/en/education/whatischemistry/landmarks/carbonfibers.html>
- Askeland, D. R., & Wright, W. J. (2015). *Science and engineering of materials*. Nelson Education.
- AZo Materials. (2014, octubre 9). Materials Used in Space Shuttle Thermal Protection Systems. *AZoM.com*. Recuperado octubre 8, 2018, a partir de <https://www.azom.com/article.aspx?ArticleID=11443>
- Buckley, J. D., & Edie, D. D. (1993). *Carbon-carbon materials and composites* (Vol. 1254). William Andrew.
- F1technical.net. (s/f). Carbon fibre. Recuperado octubre 8, 2018, a partir de <https://www.f1technical.net/articles/3>
- Wikimedia Commons. (s/f). File:Graphite-233436.jpg. Recuperado octubre 8, 2018, a partir de <https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Graphite-233436.jpg>
- Lewis, S. J. (1994). The use of carbon fibre composites on military aircraft. *Composites Manufacturing*, 5(2), 95–103.
- MatWeb, LLC. (s/f). Aluminum 2014-T6; 2014-T651. Recuperado octubre 8, 2018, a partir de <http://www.matweb.com/search/DataSheet.aspx?MatGUID=e5de9f1161d34f71a34ae016723d097f>
- McLaren Automotive Limited. (s/f). First Llight - John Barnard. Recuperado octubre 8, 2018, a partir de <http://cars.mclaren.com/featured-articles/barnard-first-carbon-chassis.html>
- Metalinfo, Eagle International Software. (s/f). ASTM A36 Grade Shape structural shape Steel - Matmatch. Recuperado octubre 8, 2018, a partir de <https://matmatch.com/materials/minfm50562-astm-a36-grade-shape-structural-shape>
- Pouliot Laforte, L., & Laberge Lebel, L. (2018). Thermal analysis and degradation of properties in carbon fiber/epoxy laminate riveting at high temperatures. *Polymer Testing*, 67, 205–212.
- Toray Composite Materials America, Inc. (s/f). Types of Carbon Fiber. Recuperado octubre 8, 2018, a partir de <https://www.toraycma.com/page.php?id=661>
- Whitney, I. (1973). Hyfil limited. *Composites*, 4(3), 101–104.
- Wikimedia Commons. (s/f). File:Diamond-diamond macle1.jpg. Recuperado octubre 8, 2018, a partir de https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Diamond-diamond_macle1.jpg
- Wolfram, L. J. (2003). Human hair: A unique physicochemical composite. *Journal of the American Academy of Dermatology*, 48(6), S106–S114.
- World Intellectual Property Organization. (s/f). A Patent that Changed an Industry. Recuperado octubre 8, 2018, a partir de <http://www.wipo.int/ipadvantage/en/details.jsp?id=2909>

La fracción material

Astron Rigel Martínez Rosas

Instituto de Investigaciones
en Materiales, Universidad Nacional
Autónoma de México
Ciudad Universitaria, CP 70360
Coyoacán 04510. México, CDMX
astron@iim.unam.mx

Prólogo

*¿Qué mágicas infusiones de los
indios herbolarios de mi patria,
entre mis letras el
hechizo derramaron?!
Sor Juana Inés de la Cruz*

Mi abuela Leonila recolectaba los valiosos pétalos de las flores del árbol de magnolia en frascos. Aún recuerdo aquellos contenedores



Objetividad viene de OBJETO

*“... pues ya en líquido humor viste y tocaste,
mi corazón deshecho entre tus manos”*

Sor Juana Inés de la Cruz

de vidrio y demás botes con yerbas medicinales, aceites, tierras y demás menjurjes en la bodega de la casa de mi infancia. Era emocionante descubrir ese mundo repleto de curiosidades: los colores, los olores, las texturas... aún ahora me emociona y me intriga ver anaqueles de reactivos químicos y gavetas con colecciones botánicas, así sea en un laboratorio de química, una botica, un museo, una yerbería.

*“Todo el mundo es opiniones,
de pareceres tan varios,
que lo que el uno que es negro
el otro prueba que es blanco”.*

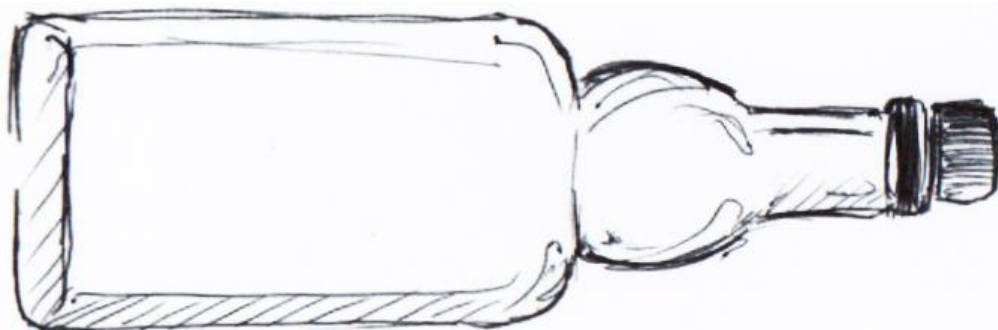
Sor Juana Inés de la Cruz

Pareciera que cada mente es un mundo. Las mentes científicas son capaces de vislumbrar las múltiples dimensiones de los fenómenos naturales. Observar lo mismo, bajo las mismas condiciones, puede arrojar resultados diferentes si se considera la perspectiva de la persona que observa. A veces cada quien ve lo que quiere ver. El que busca, encuentra (incluso cuando ahí no lo haya). Hay biólogos, por ejemplo, que “ven” vida en Marte, no porque la vean sino porque quieren imaginarla y de esta forma hacer este planeta inteligible a su campo de estudio.

Hablemos pues de los objetos (de las cosas que están a nuestro alrededor). Estas **cosas** son, en el lenguaje coloquial, *más reales* mientras más “tangibles” o palpables podamos concebirlas. Son más *verdaderas* mientras más “sólidas” (como los argumentos).

Vivimos en un universo material (porque está hecho de **materia**) y en este mundo la Química es, de todas, la *ciencia central*, pues se enfoca en la materialidad misma de los objetos. Otras ciencias, como la Física, se encargarán de las fuerzas, los campos de energía y las ondas invisibles; la Biología se empeñará en el estudio del fenómeno natural llamado Vida, mismo en el que se obstinará hasta verlo como *el fin último, o la más grande y compleja concepción* de todas.

Estos fenómenos (Vida, Energía, Espacio) y cualquier otro que podamos pensar, por abstracto que sea, puede ser entendido en términos de **objetos** y de materia cambiante. No podemos “ver” muchas de estas abstracciones, pero sí podemos ver como se manifiestan en los cuerpos.



¿Qué somos, sino materia?, ¿qué podemos percibir sino materia?

Mi propuesta es hacer de la **composición** el límite material de los objetos. Composición entendida como el arreglo (armónico, si se puede) entre las partes de un todo (la geometría del objeto: las coordenadas que nos digan *qué* es lo que va y *en dónde*), y también composición entendida como la totalidad de sustancias químicas diferentes que componen a este mismo objeto (cuáles y cuánto de cada cosa).



*Martín Fragoso, filósofo de la ciencia y activista LGBTI+, leyó este texto y se plantea las siguientes preguntas: ¿de qué depende que una pregunta sea pertinente o no?, ¿de qué depende que una respuesta sea suficiente o no, satisfactoria o no? “los aspirantes a científicos... aprenden a plantear problemas, aprenden qué preguntas son válidas”. ¿Para qué deseamos conocer algo? Cita a Kuhn, a Kneller, a Hacking y a Bachelard. “Las preguntas que los científicos se hagan sobre los objetos, las metodologías correctas, la forma de validar las respuestas, etc., dependerán de los paradigmas (Kuhn), los programas de investigación (Lakatos) o las tradiciones de investigación (Laudan)”.

Materiales abstraídos

Podríamos simplificarlo. La materia podría *idealizarse* bajo el concepto de **material**, y con esto podríamos ahorrar dar mayor explicación de la geometría (distribución de componentes) y de la composición exacta de los objetos. Pienso, por ejemplo, en la madera: muchas veces basta y sobra con decir que algo está hecho del material madera sin tener que ahondar en detalles de su composición química exacta. Debería ser, entonces, un logro intelectual de nuestra raza humana aquella capacidad de entender los materiales; porque “materializar” no es para nada un acto banal, sino una abstracción (fruto del pensamiento complejo) que nos permite *dialogar íntimamente* con la esencia de los objetos*.

Casi tan poético como preguntarles a los objetos:
¿de qué estás hecho?



La fracción material de mundo

Son objetos materiales los que podemos ver, oír, probar, sentir... “materializamos” para entender, y de esto puedo pensar un sinfín de ejemplos: premiamos el prestigio, la distinción y el honor con trofeos y medallas de metales preciosos; laureamos con laurel; el dinero se materializa en papel moneda, metales y demás activos financieros; las ideas se transmiten como cambios en la presión del aire cuando hablamos, cuando estas voces se escriben se convierten en tinta y papel, y cuando las pensamos, incluso, también tienen el equivalente material de neurotransmisores en nuestro cerebro.

Aún hay más: *congelar* el tiempo y *atrapar* la luz en fotografías; atrapar sonido como perturbaciones magnéticas de las cintas en cassettes (o en patrones intercalados de óxido y brillante metal en discos compactos y memorias digitales); a más de trescientos años de distancia, la lírica personal de Sor Juana Inés de la Cruz que aquí reproduzco suena y resuena; los sueños se materializan en neurotransmisores (y drogas que los mimetizan); ¿habrá algún equivalente material para los recuerdos, la personalidad y las emociones?, quizá algún tipo de gradiente de sustancias químicas dentro del cerebro: nuestra conciencia materializada.

Buscarle sentido al mundo en su fracción material me obsesiona. Estoy seguro de que no soy el único.



La nanotecnología al alcance de tus manos

Marlene Covarrubias Sánchez, Lorena Meza Puente y
Yareli Rojas Aguirre*

Instituto de Investigaciones en Materiales,
Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad
Universitaria, CP 70360, Coyoacán 04510, México, CDMX

yareli.rojas@materiales.unam.mx

Resumen

La palabra **nanotecnología** es cada vez más frecuente. Esto significa que se ha posicionado en la conciencia de las personas y que ha cobrado una enorme importancia, tanto en la academia como en el sector industrial por todas las implicaciones científicas, económicas y sociales que representa. A 60 años del discurso titulado “There is plenty of room at the bottom”, ¿cómo definimos hoy a la nanotecnología? ¿Cuál es el impacto actual de la nanotecnología en términos de aplicaciones y beneficios? Este artículo presenta, de manera general, los fundamentos de la nanotecnología. Así mismo, describe algunos casos de éxito en donde los nanomateriales ya están siendo utilizados.

Nanotecnología

El físico estadounidense Richard Feynman anticipó la llegada de la nanotecnología en su conferencia “There is plenty of room at the bottom”, impartida en el Instituto Tecnológico de California en 1959. En dicha conferencia afirmaba que no existe ley física que impidiera al ser humano diseñar, controlar y manipular la materia a nivel atómico y molecular para dar lugar a propiedades físicas y químicas distintas.¹ Sin embargo, fue hasta quince años después que el Profesor Norio Taniguchi, de la Universidad de Ciencias de Tokio, introdujo el término “**nanotecnología**”; mismo que definió como

“el proceso de separación, consolidación y deformación de los materiales, átomo por átomo” (Figura 1).²

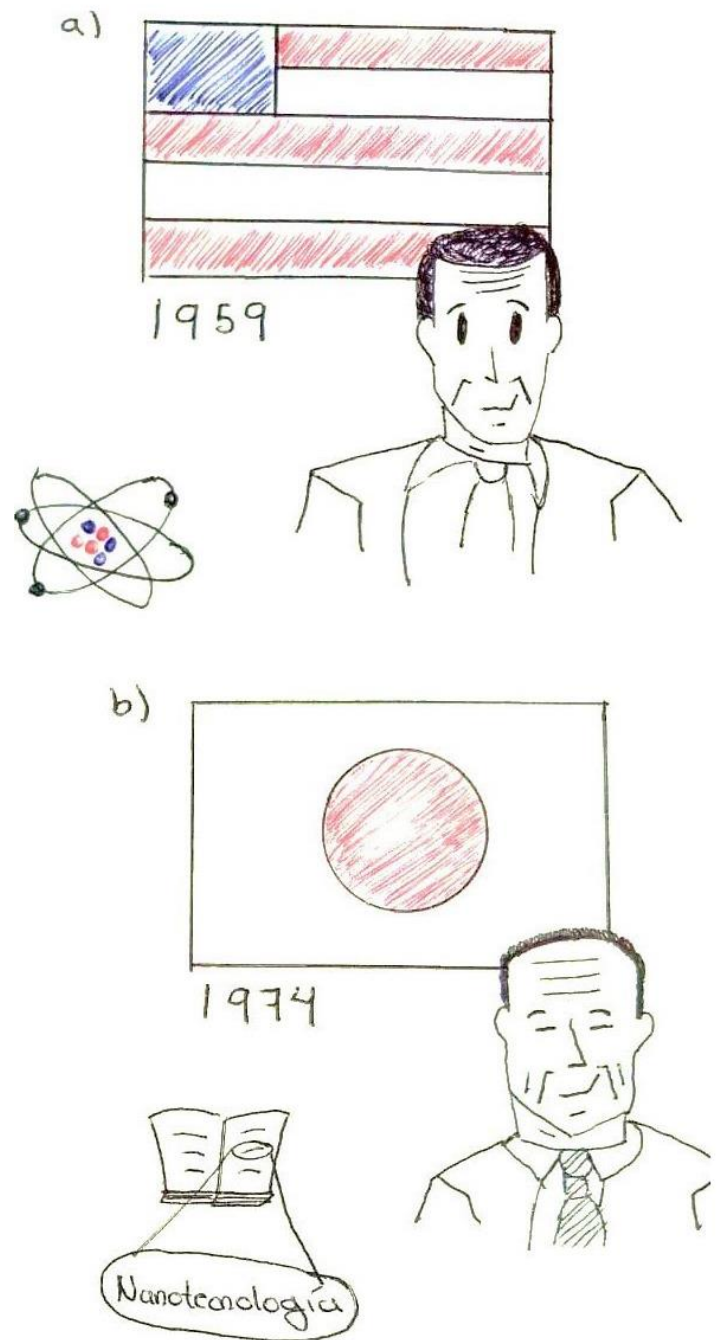


Figura 1. a) Richard Feynman y b) Norio Taniguchi

El concepto de nanotecnología ha evolucionado en estas cuatro décadas y actualmente se puede definir de la siguiente manera:

“Conjunto de disciplinas (Física, Química, Biología e Ingenierías) enfocadas en el estudio, manipulación y control de la materia a nivel atómico y molecular, con la finalidad de explotar las propiedades que ésta presenta en la nanoescala (1 - 100 nm), para generar materiales funcionales con atributos físicos y químicos que superen a aquellos que conocemos hoy en día”.

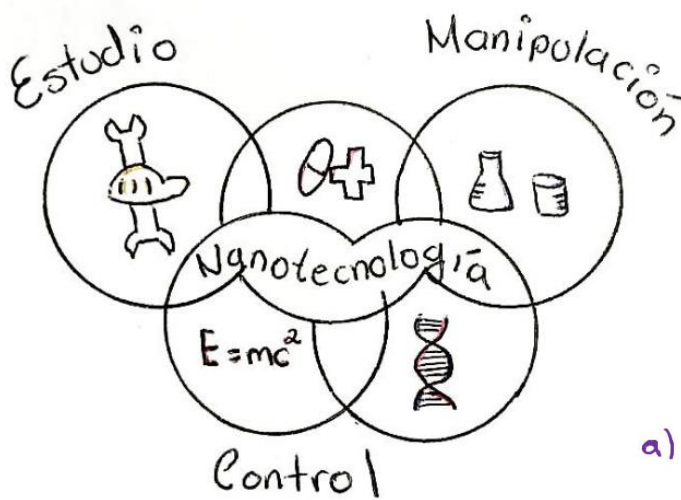


Figura 2. Nanotecnología

Nanómetro (nm) es la unidad de longitud del Sistema Internacional de Unidades que equivale a la milmillonésima parte de un metro (10^{-9}) y es la unidad que concierne a la nanoescala. Aunque la nanoescala abarca 1 - 1000 nm, es en el rango comprendido entre 1 - 100 nm en donde los materiales pueden exhibir comportamientos diferentes. Así, dentro del campo de la nanotecnología, la nanoescala se refiere al rango mencionado.³

Un nanomaterial es aquel en el que alguna de sus dimensiones está dentro de la nanoescala. De acuerdo a su naturaleza, los nanomateriales pueden ser metálicos, cerámicos, poliméricos o compuestos y se pueden clasificar en función de su dimensionalidad (Figura 3).^{4,5}

0D Todas las dimensiones se encuentran en la nanoescala (nanopartículas).

1D Una de las dimensiones se encuentra en la nanoescala y la otra en microescala (nanotubos y nanoalambres).

2D Una dimensión se encuentra en la nanoescala y dos en la microescala. Estos son materiales conformados por una sola capa de átomos. El ejemplo más representativo de esta clasificación es el grafeno.

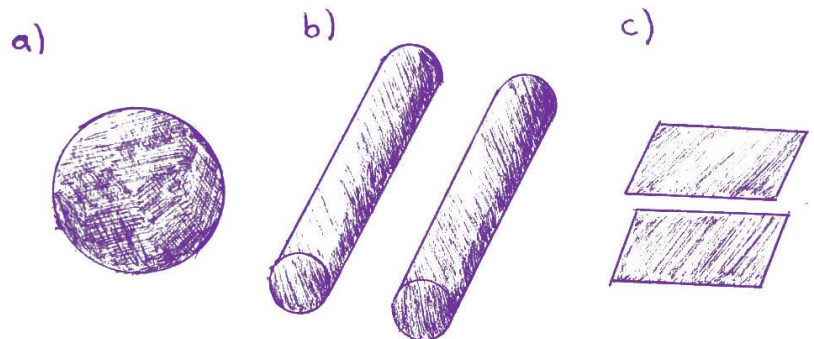


Figura 3. Nanomateriales a) 0D b) 1D c) 2D

Propiedades en la nanoescala

Las propiedades mecánicas, magnéticas, eléctricas, ópticas, térmicas y catalíticas de los nanomateriales pueden ser distintas en comparación a los micro o macromateriales (materiales en bulto). Tales cambios se atribuyen a:

1. La naturaleza química del nanomaterial.
2. El acomodo espacial de los átomos en dicho nanomaterial.
3. La relación entre el área superficial y el volumen.

Se discutirán a mayor profundidad cada una de las propiedades mencionadas.

Mecánicas

Las propiedades mecánicas se refieren al comportamiento de un material al ser sometido a fuerzas externas (tracción, compresión y torsión). Algunas de estas propiedades son dureza, elasticidad, ductilidad y maleabilidad. En la nanoescala estas propiedades pueden cambiar drásticamente. Por ejemplo, el módulo elástico puede disminuir desde un 30 hasta un 50% en algunas nanoestructuras. La dureza se incrementa considerablemente en nanomateriales metálicos, mientras que los cerámicos pueden exhibir ductilidad a bajas temperaturas.⁶

Magnéticas

El magnetismo es el fenómeno por medio del cual un material ejerce fuerzas de atracción o de repulsión sobre otro. Prácticamente todos los materiales presentan magnetismo, sin embargo, su comportamiento magnético dependerá de la configuración electrónica de los átomos que lo compongan (diamagnetismo, paramagnetismo, ferro y ferrimagnetismo). Uno de los fenómenos más interesantes y más estudiados que se presenta en la nanoescala es el superparamagnetismo. Bajo esta condición, los nanomateriales exhiben un solo momento magnético muy alto cuando están expuestos a un campo magnético.

Sin embargo, en ausencia del campo, la magnetización es cero; es decir, no tienen memoria magnética. Los nanomateriales superparamagnéticos resultan de gran interés por sus aplicaciones tecnológicas en dispositivos electrónicos, en nanomedicina, entre otras.⁷⁻⁹

Eléctricas

Las propiedades eléctricas determinan el comportamiento de un material al ser sometido a una corriente eléctrica. Debido a que los electrones quedan confinados a un volumen muy pequeño en un nanomaterial, la conductividad y resistividad se pueden ver alteradas. Por otro lado, es de gran interés el estudio de la superconductividad, que es la capacidad de un material de conducir la corriente eléctrica sin sufrir pérdidas en forma de calor y con una resistencia casi nula.¹⁰ Las propiedades conductoras y superconductoras de los nanotubos de carbono, por ejemplo, siguen siendo de gran interés entre la comunidad científica.

Ópticas

Las propiedades ópticas son el resultado de la interacción de la luz con la materia (fenómenos de absorción, emisión y dispersión). Su comportamiento puede depender del tamaño del material. Uno de los ejemplos más representativos son las nanopartículas esféricas de oro, en las que su capacidad de absorción y dispersión cambia drásticamente en función del tamaño de las partículas. Cuando estas son de ~ 5 - 20 nm, absorben la luz en la región azul-verde del espectro y reflejan la luz roja. Al aumentar el tamaño de la partícula (entre 30 y 100 nm), la luz roja es absorbida, mientras que la luz azul es reflejada, dando como resultado colores azul-violeta. Estos cambios se deben a que los electrones de conducción en la superficie de la partícula oscilan en resonancia con la luz incidente. Al aumentar o disminuir el tamaño de partícula, se modifica el área superficial y, por lo tanto, el comportamiento de dichos electrones ante la luz irradiada.^{7,11}

Térmicas

Las propiedades térmicas de los materiales determinan su comportamiento frente a un cambio de temperatura. Una de las características en la nanoescala es la modificación de la conductividad térmica y del punto de fusión como consecuencia directa del tamaño del nanomaterial.¹²

Catalíticas

De manera general, la función de un catalizador es acelerar una reacción química. Existen nanoestructuras que funcionan como catalizadores altamente eficientes, esto debido a su gran área superficial que permite que una enorme cantidad de átomos estén disponibles en la superficie para llevar a cabo la catálisis.¹³

Aplicaciones

La modificación de las propiedades de los materiales al disminuir su tamaño, que en algunos casos resultan superiores, puede explotarse para generar estructuras funcionales, con un mejor desempeño en comparación al material convencional. De esta manera los nanomateriales pueden encontrar cabida en una gran variedad de aplicaciones, que van desde productos cosméticos hasta naves aeroespaciales. A continuación, discutimos algunos casos de éxito de desarrollos basados en nanotecnología que se encuentran disponibles comercialmente (Figura 4).

Artículos deportivos

Los nanotubos de carbono y el grafeno se caracterizan por ser ligeros, flexibles, resistentes y buenos conductores eléctricos. Estos nanomateriales han dado lugar a desarrollos tecnológicos con aplicaciones en diversas áreas.¹⁴

En el año 2002, la empresa francesa *Babolat™* lanzó a la venta raquetas de tenis, en las cuales se combinan nanotubos de carbono con fibras de carbono convencional para aumentar la

rigidez y resistencia de dichas raquetas. Las raquetas no se doblan al momento del impacto con la pelota, aumentando así la intensidad de rebote.¹⁵⁻¹⁸

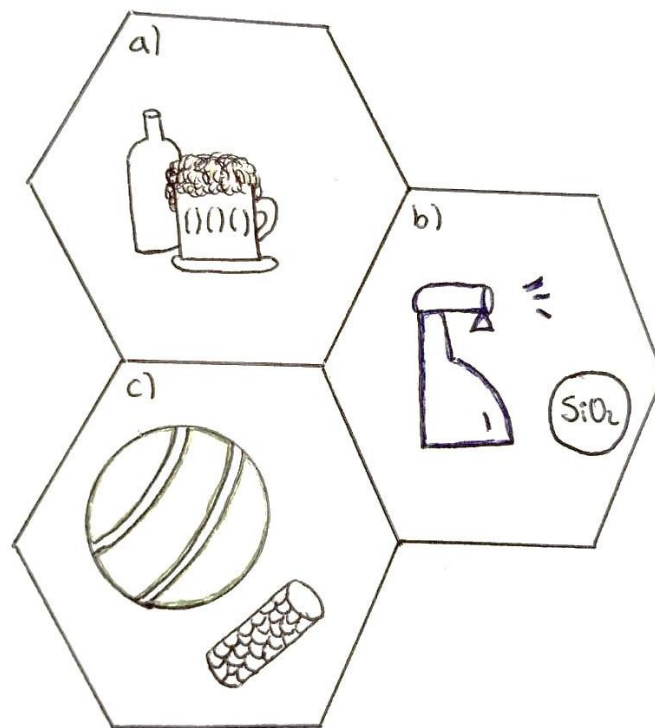


Figura 4. Algunas aplicaciones de la nanotecnología:
a) envases de cerveza, b) recubrimiento superhidrofóbico y
c) pelotas de tenis

Otro ejemplo más reciente son pelotas de golf a base de grafeno y nanotubos de carbono, las cuales fueron lanzadas a la venta por la empresa *Callaway Golf Company®* en 2018.¹⁹

Estas pelotas constan de dos núcleos compuestos de un material híbrido a base de grafeno y polibutadieno (figura 5). Esta composición permite que los disparos de los jugadores obtengan una mayor altura, además de aumentar la resistencia mecánica de las pelotas y por lo tanto su durabilidad.^{20,21}

Al igual que *Callaway Golf Company®*, la empresa *Wilson®* fabrica pelotas de tenis de doble núcleo con el fin de retener mejor el aire y por lo tanto, obtener un mejor rebote, resistencia y durabilidad.²²

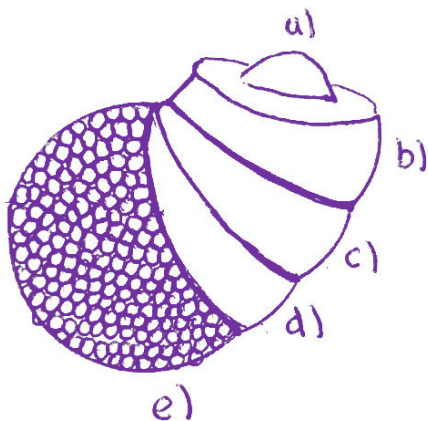


Figura 5. Estructura de una pelota de golf a base de nanomateriales de carbono: a) núcleo interno b) núcleo externo c) manto interno d) manto externo e) cubierta de la pelota (Esquema adaptado de Chavan V., 2018) ²⁰

Líquidos superhidrofóbicos

La susceptibilidad de superficies sólidas a “mojarse” depende de su composición química y su geometría molecular. Existen algunos nanomateriales con los que es posible elaborar películas superhidrofóbicas que puedan recubrir superficies sólidas. Por ejemplo, con el dióxido de silicio en forma de nanopartícula y combinado con matrices poliméricas (nanomaterial compuesto) se pueden preparar recubrimientos superhidrofóbicos.²³

La empresa mexicana NanoDepot® desarrolla recubrimientos superhidrofóbicos a partir de nanopartículas de dióxido de silicio. Estos recubrimientos se pueden utilizar en superficies metálicas y poliméricas para evitar o disminuir la suciedad y proteger contra la humedad, grasa, oxidación o contaminación; alargando la vida útil de las mismas y disminuyendo sus costos de mantenimiento. NanoDepot® sustituye materiales convencionales elaborados con siliconas, fluorocarbonos y resinas utilizados para tales fines, los cuales pueden ser dañinos para la salud y para el medio ambiente. Los productos de NanoDepot® han encontrado aplicaciones en la industria automotriz, textil, de la construcción, entre otras. Actualmente, trabajan en conjunto con el Sistema de Transporte Colectivo Metro, Interceramic®, Dormimundo®, Cirque du Soleil y algunas inmobiliarias.²⁴

Envases de cerveza

Las arcillas son materiales inorgánicos constituidos por silicatos de aluminio. A este material, en la nanoescala, se le conoce como nanoarcilla. La superficie de las nanoarcillas se puede modificar para permitir su incorporación en matrices poliméricas y dar lugar a un nanomaterial compuesto. Uno de los ejemplos más representativos del grupo de las nanoarcillas es la *montmorillonita*. Cuando ésta se incorpora a una matriz polimérica, las propiedades del nanocompuesto resultante pueden ser muy distintas a las del polímero puro.

Por ejemplo, tener mayor resistencia mecánica, actuar como retardante a la flama e incluso mayor transparencia.²⁵

La multinacional estadounidense *Honeywell Polymer* desarrolló *Aegis® OXCE*, un compuesto de poliamida 6 (Nylon 6) y nanoarcilla (*montmorillonita*). Las características más sobresalientes del nanomaterial son su dureza, su resistencia (tanto mecánica como química), así como la disminución en la permeabilidad a gases y humedad. Este producto se ha utilizado exitosamente por la compañía surcoreana *Hite Brewery Co* para el envasado de cervezas *Hite Pitcher*. *Imperm®* es otro nanomaterial (*Mitsubishi Gas Chemical Company*) utilizado por la cervecera estadounidense *Miller Brewing Co®* para envasar la cerveza *Miller Lite®* y *Miller Genuine®*. Estos envases conservan el sabor y características de la cerveza en una forma similar a las botellas de vidrio, son más seguros y no se rompen.²⁶

Conclusiones

Las propiedades en la nanoescala son producto de la composición y el arreglo espacial de los átomos y moléculas que componen un material determinado. Por lo tanto, entender la manera en cómo se construye la materia para que refleje dichas propiedades sigue siendo primordial, al igual que entender las interacciones de los nanomateriales con un ecosistema determinado.

La nanotecnología es, en esencia, un campo multidisciplinario en donde convergen diversas áreas del conocimiento. Durante las últimas décadas se ha evidenciado que la investigación, fabricación y utilización de los nanomateriales es un campo en continuo crecimiento de gran interés para el sector industrial,

ya que podemos considerarlos como *materiales de nueva generación*. La nanotecnología está llena de nuevas posibilidades y es capaz de revolucionar diversas áreas con implicaciones económicas, medioambientales, de sustentabilidad e incluso en la concepción misma del ser humano y su interacción con el mundo que le rodea.

Con la información aquí presentada se realizó un video llamado “Nanotecnología *Draw My Life*” que se encuentra disponible en el canal de *YouTube* del Instituto de Investigaciones en Materiales (IIM-UNAM). Para acceder al video, ingresar al siguiente QR:



Agradecimientos

Los autores agradecen a la Arq. Lorena Jáuregui Solares por su contribución en la composición de las Figuras de este artículo. YRA agradece al proyecto PAPIME-UNAM PE117419 por el financiamiento otorgado para la realización de este trabajo.

Referencias

1. Feynman, R. There's plenty of room at the bottom. *Caltech Eng. Sci.* **1**, 22–36 (1960).
2. Taniguchi, N. On the basic concept of Nano-Technology. in *Proceedings of the International Conference on Production Engineering* 18–23 (1974).
3. Hornyak, L., Tibbals, H. F., Dutta, J. & Moore, J. *Introduction to Nanoscience & Nanotechnology*. CRC Press (2008).
4. Fahlman, B. D. *Materials Chemistry*. Springer Netherlands (2011). doi:10.1007/978-94-007-0693-4
5. Tiwari, J. N., Tiwari, R. N. & Kim, K. S. Zero-dimensional, one-dimensional, two-dimensional and three-dimensional nanostructured materials for advanced electrochemical energy devices. *Prog. Mater. Sci.* **57**, 724–803 (2012).
6. Guo, D., Xie, G. & Luo, J. Mechanical properties of nanoparticles: Basics and applications. *J. Phys. D: Appl. Phys.* **47**, 25 (2014).
7. Cao, G. *Nanostructures and Nanomaterials - Synthesis, Properties and Applications*. Imperial College Press (2004). doi:10.1142/9781860945960
8. Unsoy, G. *et al.* Magnetite: From Synthesis to Applications. *Curr. Top. Med. Chem.* **15**, 1622–1640 (2015).
9. Ali, A. *et al.* Synthesis, characterization, applications, and challenges of iron oxide nanoparticles. *Nanotechnol. Sci. Appl.* **9**, 49–67 (2016).
10. Ferrier, M., Kasumov, A., Deblock, R., Guéron, S. & Bouchiat, H. Superconducting properties of carbon nanotubes. *Comptes Rendus Phys.* **10**, 252–267 (2009).
11. González, A. L., Noguez, C. & Barnard, A. S. Map of the Structural and Optical Properties of Gold Nanoparticles at Thermal Equilibrium. *J. Phys. Chem. C* **116**, 14170–14175 (2012).
12. Huang, C. W. *et al.* Direct observation of melting behaviors at the nanoscale under electron beam and heat to form hollow nanostructures. *Nanoscale* **4**, 4702 (2012).
13. Zanella, R. Aplicación de los nanomateriales en catálisis. *MundoNano* **7**, 66–82 (2014).
14. Bhushan Bharat. *Handbook of Nanotechnology*. Springer (2007).
15. Berry, L. Boulder firm uses nanotechnology to improve tennis game. *Denver Business Journal* (2002).
16. Overstock. Babolat NS Drive OS Tennis Racquet. (2019).
17. THE PROJECT ON EMERGING NANOTECHNOLOGIES. Babolat® NS™ Tour Tennis Racket. (2019).
18. Poggi, M., Bernard, Y. & Le Bozec, Y. Racket frame and racket comprising such a frame. 2–4 Patent (2002).
19. Callaway Golf Company. Used Golf Clubs, Pre-Owned Drivers, Irons, Putters, Wedges: Callaway Golf Pre-Owned. (2019).
20. Chavan, V. & Bartels, D. Graphene core for a golf ball. 2–4 Patent (2017).
21. Comeau, B. Carbon nanotube reinforced composites for golf ball layers. 354 Patent (2005). doi:10.1037/t24245-000
22. Taylor, D. *Nanotechnology in Sports. EE453 Project Report* (2008).
23. Wang, J. *et al.* Preparation of superhydrophobic poly(methyl methacrylate)-silicon dioxide nanocomposite films. *Appl. Surf. Sci.* **257**, 1473–1477 (2010).
24. Nano Depot. Nanotecnología para proteger todo. (2018).
25. Schoonheydt, R. A. Reflections on the material science of clay minerals. *Appl. Clay Sci.* **131**, 107–112 (2016).
26. Bumbudsanpharoke, N. & Ko, S. Nano-Food Packaging: An Overview of Market, Migration Research, and Safety Regulations. *J. Food Sci.* **8**, 910–923 (2015).

Degradación electroquímica: una alternativa para el tratamiento de contaminantes emergentes en aguas

Ricardo Enrique Palma Goyes,
Issis Claudette Romero Ibarra*, Mario Fidel García Sánchez,
Jorge Gabriel Vázquez Arenas

Unidad Profesional Interdisciplinaria en Ingeniería y
Tecnologías Avanzadas (UPIITA) - Instituto Politécnico
Nacional (IPN). Av. IPN No. 2580, Gustavo A. Madero, C.P.
07340, Ciudad de México, México

*iromero@ipn.mx

Contaminación en las aguas residuales por contaminantes emergentes

La contaminación del agua es uno de los problemas más apremiantes que enfrenta la humanidad. La captación, regeneración y reutilización de las aguas residuales o de lluvia podrían representar una vía directa para aumentar los recursos hídricos. México tiene una legislación que pretende mitigar la contaminación de aguas por sustancias químicas, regulando a las industrias y sus descargas, pero la presencia de contaminantes emergentes no está contemplada aún. Además, no se conoce el impacto real que representa este tipo de aguas contaminadas.

Un grupo de contaminantes emergentes de interés es el de los fármacos. Un ejemplo de ellos son los antibióticos, que son fármacos ampliamente utilizados para el tratamiento de

enfermedades bacterianas en humanos, animales e incluso en plantas. Su uso ha permitido el control de muchas enfermedades infecciosas alrededor del mundo. No obstante, la aplicación masiva de estos fármacos ha propiciado que se liberen enormes cantidades de este tipo de sustancias al ambiente. Como consecuencia de actividades que incluyen la excreción (orina, heces) y la disposición industrial; estos compuestos están presentes en las aguas superficiales y subterráneas en intervalos que van desde los $\mu\text{g/kg}$ a mg/kg (figura 1). La naturaleza antimicrobiana de los antibióticos los hace resistentes a la biodegradación, y es por ello que han sido clasificados como *contaminantes orgánicos emergentes pseudopersistentes* (por su continua llegada y presencia en el medio ambiente).

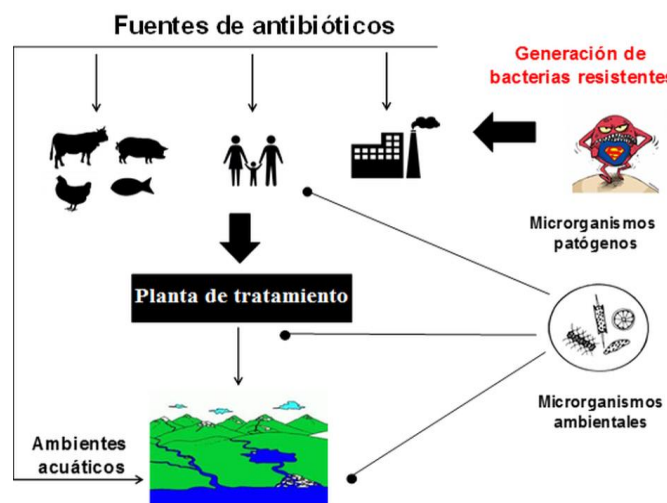


Figura 1. Fuentes de contaminación con fármacos en las aguas residuales municipales.

Los métodos fisicoquímicos y biológicos convencionales tienen una limitada aplicación para tratar estas sustancias. Muchos solo logran la degradación parcial de estos contaminantes; en algunos casos no se logra ni siquiera modificarlos estructuralmente. Otros métodos son limitados, por su elevado costo, haciendo necesaria la búsqueda de alternativas eficientes que conlleven a una mejora en el tratamiento de las aguas contaminadas.

¿Qué es la oxidación electroquímica?

La oxidación anódica (oxidación electroquímica) involucra la aplicación de una diferencia de potencial o densidad de corriente entre dos electrodos (ánodo y cátodo) entre los cuales se encuentra el agua contaminada (**figura 2**) [1]. En uno de estos electrodos se deposita el catalizador, el cual es la clave en este proceso electrocatalítico heterogéneo de degradación de contaminantes, pues es donde ocurren las reacciones de oxidación y reducción de las especies orgánicas e inorgánicas respectivamente. Esta es una tecnología de gran importancia por su alta eficiencia, simplicidad, versatilidad, bajo costo y por tener el potencial de degradar los contaminantes emergentes a CO_2 , agua y minerales (proceso conocido como mineralización). El electrolito en la celda electroquímica debe ser conductor de electricidad. La presencia de iones inorgánicos en las aguas residuales proporciona un excelente medio conductor de la electricidad, haciendo viable el uso de técnicas electroquímicas como la oxidación anódica en el tratamiento, remoción y degradación de estos efluentes contaminados.

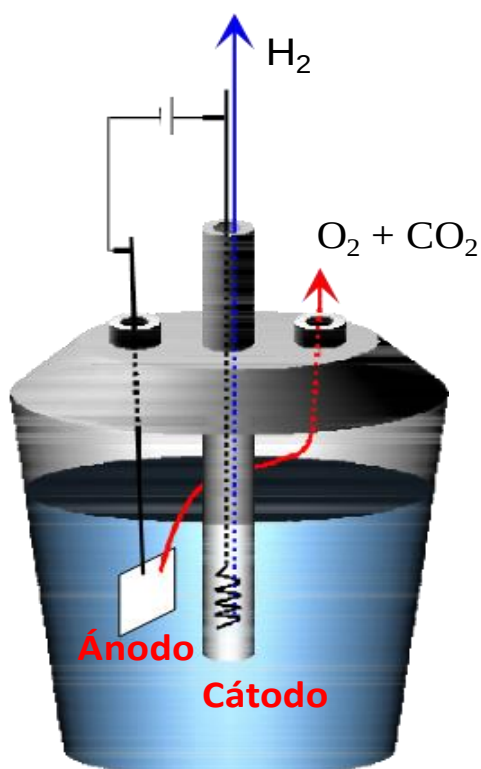


Figura 2. Celda electroquímica para la degradación de contaminantes orgánicos

La oxidación electroquímica presenta numerosas ventajas, entre las cuales se destacan la fácil automatización y el uso de un reactivo limpio y amigable con el ambiente (como lo es el electrón). Lo anterior está en concordancia con los principios de la química verde. Sumado a ello, la técnica permite llevar gran parte de la materia orgánica hasta su mineralización [1]. El buen desempeño de este proceso está determinado por un conjunto de parámetros que pueden ser optimizados para una efectiva y económica degradación de los contaminantes. Los principales factores que determinan el desempeño son: potencial de electrodo o densidad de corriente, régimen de transporte de masa, diseño de celda, medio electrolítico y el material anódico.

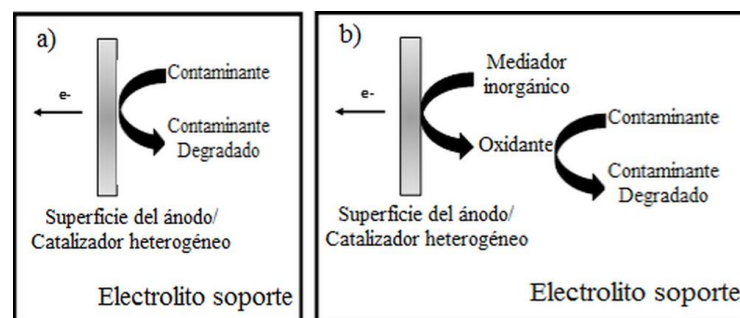


Figura 3. Esquema general para la oxidación (a) directa e (b) indirecta de contaminantes orgánicos

¿Cómo funciona la oxidación electroquímica?

La oxidación electroquímica de contaminantes orgánicos puede ser llevada a cabo de diferentes maneras, e incluye una oxidación, ya sea directa o indirecta. En el método directo los contaminantes se adsorben sobre la superficie del ánodo, en donde son oxidados por la acción directa de los electrones. Por este mecanismo se han obtenido altas velocidades de tratamiento utilizando materiales anódicos como platino y óxidos metálicos (RuO_2 , IrO_2 , $\text{SnO}_2\text{-Sb}_2\text{O}_5$) conocidos como ánodos dimensionalmente estables (DSA) [2-5]. En el método indirecto, el intercambio de electrones se da con especies oxidantes electrogeneradas provenientes del agua o presentes en el medio conductor; estas actúan como intermediarios para

el intercambio de electrones con las especies orgánicas a degradar. Ambas vías de oxidación se resumen en la **figura 3**. Durante la oxidación electroquímica, los compuestos orgánicos pueden sufrir electroconversión (en la cual estos solo son parcialmente oxidados a compuestos de menor tamaño) o electrocombustión (en la cual la materia orgánica es oxidada directamente hasta dióxido de carbono).

Aplicaciones de la oxidación electroquímica

El grupo de investigación de Materiales Avanzados y Tecnologías para Energía y Ambiente (MATEA) de la UPIITA en el Instituto Politécnico Nacional, trabaja en el tratamiento de aguas residuales con contaminantes orgánicos (antibióticos, colorantes, pesticidas y metales pesados) en matrices reales como aguas residuales domésticas, orina o agua de lluvia. Un primer paso es la síntesis de los materiales que se utilizarán como catalizadores. Las condiciones y el método de síntesis determinarán muchas de las propiedades del material. La **figura 4** muestra una imagen de microscopía electrónica de transmisión de RuO_2 preparado por un método *in situ* asistido por microondas [6]. En esta imagen se observa que el material tiene un tamaño de partícula menor a 20 nm, lo que aumenta la superficie activa donde potencialmente pueden ocurrir los procesos catalíticos.

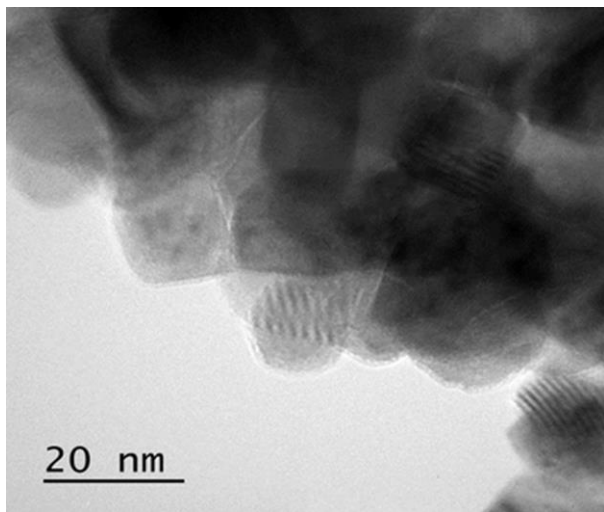


Figura 4. Imagen de microscopía electrónica de transmisión de nanopartículas de RuO_2 preparadas por microondas

En otro estudio realizamos la oxidación electroquímica con catalizadores de óxidos de rutenio e iridio para la degradación de un antibiótico de amplio espectro, la cefalexina [7]. La **figura 5** muestra la disminución de la concentración de 20 mgL^{-1} cefalexina (C/Co) y su actividad antibiótica (AA) en diferentes matrices reales (agua residual doméstica y orina) a diferentes tiempos de tratamiento. En la figura se observa una rápida caída de la concentración del contaminante con el tiempo, la cual depende del medio en que éste se encuentre. Por lo tanto, es posible eliminar la concentración del antibiótico y su actividad en tiempos que van desde los 5 minutos hasta las 2 horas de tratamiento electroquímico, en dependencia de las diferentes matrices evaluadas. Este es un resultado importante, pues da respuesta en tiempos razonables y a bajos costos a una gran problemática actual. El estudio se completa con el seguimiento de otros parámetros importantes tales como: el carbono orgánico total, la evolución de los iones y diversas pruebas de biodegradabilidad. Estos análisis permiten evaluar la eficiencia del proceso de oxidación.

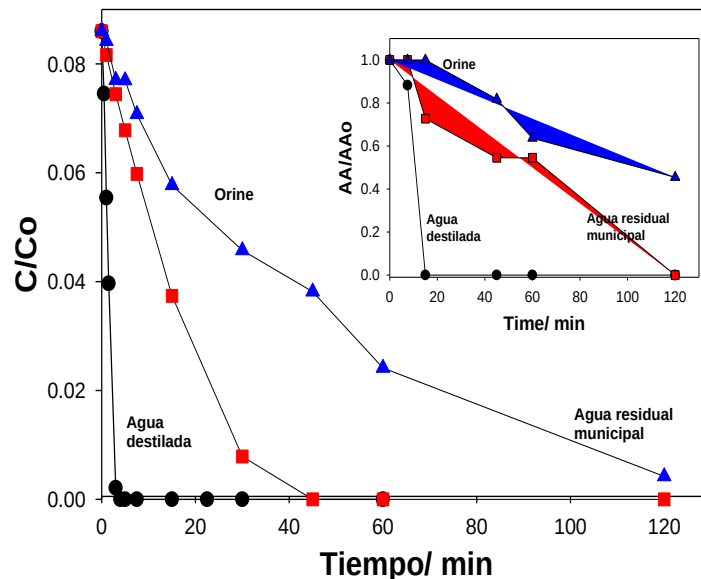


Figura 5. Eliminación de Cefalexina en diferentes matrices: agua destilada, agua residual municipal y orina. La figura insertada muestra la eliminación de la actividad antibiótica (AA)

Agradecimientos

Los autores agradecen al proyecto SECITI 071/2016 y CM-SECITI 069/2018 de la CDMX por el apoyo y financiamiento otorgado, así como a los proyectos SIP-Multidisciplinario 1983, SIP 20196708 y SIP 20196667 del Instituto Politécnico Nacional. Finalmente, también se agradece al CONACyT por el proyecto de PN-1373.

Referencias

- [1] C. E. Barrera Díaz “Aplicaciones electroquímicas al tratamiento de aguas residuales”. Ed. Reverté (2014).
- [2] R. E. Palma-Goyes, J. Vázquez-Arenas, C. Ostos, F. Ferraro, R. A. Torres-Palma, I. González “Microstructural and electrochemical analysis of Sb_2O_5 doped-Ti/ RuO_2 - ZrO_2 to yield active chlorine species for ciprofloxacin degradation”. *Electrochimica Acta* 213 (2016) 740–751.
- [3] R. E. Palma-Goyes, J. Vázquez-Arenas, C. Ostos, R. A. Torres-Palma, I. González “The effects of ZrO_2 on the electrocatalysis to yield active chlorine species on Sb_2O_5 -doped Ti/ RuO_2 anodes”. *Journal of The Electrochemical Society*, 163 (2016) H818-H825.
- [4] R. E. Palma-Goyes, J. Vazquez-Arenas, C. Ostos, A. Manzo-Robledo, I. Romero-Ibarra, A. Calderón, I. González “In search of the active chlorine species on Ti/ ZrO_2 - RuO_2 - Sb_2O_3 anodes using DEMS and XPS”. *Electrochimica Acta*, 275 (2018) 265-274.
- [5] R. Palma-Goyes, J. Silva-Agreto, J. Vazquez-Arenas, I. Romero-Ibarra, R. Torres-Palma “Electrochemical oxidation of organic pollutants for wastewater treatment”. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 6 (2018) 3010-3017.
- [6] R. E. Palma Goyes, J. Vazquez Arenas; I. C. Romero Ibarra, C. Ostos “Microwave-assisted solvothermal one-pot synthesis of RuO_2 nanoparticles: first insights of its activity towards oxygen and chlorine evolution reactions”. *Chemistry Select* 3 (2018) 12937-12945.
- [7] A. Perea, R. E. Palma-Goyes, J. Vázquez-Arenas, I. C. Romero-Ibarra, C. Ostos, R. A. Torres-Palma “Efficient cephalexin degradation using active chlorine produced on ruthenium and iridium oxide anodes: Role of bath composition, analysis of degradation pathways and degradation extent”. *Science of the Total Environmental*, 648 (2019) 377-387.

Pirroles 1,2,5-trisustituidos Nuevos semiconductores orgánicos

Olivia Monroy^a, Lioudmila Fomina^{a*},
María Elena Sánchez-Vergara^b, Rubén Gaviño^c,
Alonso Acosta^a y Roberto Salcedo^a

^a Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM

^b Universidad Anáhuac México. Avenida Universidad Anáhuac
46, Col. Lomas Anáhuac, Huixquilucan 52786, Estado de
México, México

^c Instituto de Química, UNAM

lioudmilafomina@gmail.com

Resumen

En este trabajo se muestran, tanto la síntesis de pirroles 1,2,5-trisustituidos, como el estudio de sus propiedades electrónicas. La principal característica de estos materiales radica en que el anillo de pirrol tiene unido al átomo de nitrógeno un anillo aromático, el cual posee uno o dos de los siguientes grupos electroattractores: -NO₂, -CF₃, -CN, -F, -COOH como sustituyentes. Estos grupos pueden propiciar un comportamiento semiconductor en el material resultante.

Para la obtención de los pirroles trisustituidos se preparó el precursor 1,4-difenil-1,3-butadiino mediante la reacción de Glaser-Hay; misma que consiste en un acoplamiento oxidativo de alquinos terminales (en este caso, fenilacetileno). Posteriormente, se sintetizaron los pirroles 1,2,5-trisustituidos empleando la reacción de Reisch-Schulte que implica la adición de aminas aromáticas sustituidas al

1,4-difenil-1,3-butadiino. Estos compuestos fueron caracterizados por Espectroscopía en el Infrarrojo, Espectroscopía en el Ultravioleta visible, Espectroscopía de Resonancia Magnética Nuclear, Análisis térmico y Difracción de Rayos X. También se llevaron a cabo optimizaciones de geometría de los pirroles trisustituidos. Con las anteriores se obtuvieron los valores de los orbitales moleculares HOMO y LUMO y, de este modo, se determinó el *band gap* teórico de cada compuesto. Los valores de *band gap* obtenidos se ubican en un intervalo de 2.10 - 4.55 eV; el menor *band gap* lo presentó el pirrol trisustituido que posee dos grupos -NO₂. Posteriormente se obtuvieron los valores de *band gap* óptico utilizando dos metodologías *cuasi* experimentales: el método de Tauc y el método de Cody. Los valores de *band gap* óptico de ocho pirroles trisustituidos se encuentran dentro del intervalo de los semiconductores orgánicos, por lo que estos materiales podrían tener potenciales aplicaciones en optoelectrónica.

Introducción

Los semiconductores, fabricados principalmente a base de silicio, son materiales que habitualmente forman parte de los dispositivos electrónicos utilizados hoy en día. La capacidad que presentan de aumentar su conductividad eléctrica con la temperatura o por medio de la introducción de dopantes, ha hecho de los semiconductores inorgánicos objeto de extensos estudios. Sin embargo; en las últimas décadas ha crecido el interés en los materiales orgánicos semiconductores.¹ Esto se debe a las características que presentan estos materiales: bajo costo, fácil procesamiento, flexibilidad, versatilidad para llevar a cabo su síntesis química, así como sus potenciales aplicaciones en dispositivos optoelectrónicos como Diodos Orgánicos Emisores de Luz (OLED's), Celdas Colares Orgánicas (OCS), Transistores de Capa Fina (OFET's), sensores, entre otros.^{2,3}

La aplicación de estos materiales en dispositivos como los mencionados se basa en el comportamiento de los electrones que se encuentran en los orbitales frontera de dichas sustancias. En materiales orgánicos, el comportamiento de un electrón, (incluyendo transferencia y transporte de electrones), depende básicamente de los niveles de energía HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) y LUMO (Lowest

Unoccupied Molecular Orbital), es decir, de aquellos orbitales moleculares que sostienen la última ocupación y la primera vacancia de electrones, y de la interacción entre ellos. Mediante el diseño de moléculas con energía HOMO y LUMO ajustables es posible tener control sobre las propiedades electrónicas del material y de su desempeño en dispositivos optoelectrónicos. Las moléculas con bajas diferencias de energía HOMO-LUMO (*band gap*) son de particular interés por su capacidad para donar (desde el HOMO) o aceptar (desde el LUMO) un electrón, que es el proceso básico en todos los dispositivos electrónicos orgánicos. El valor del *band gap* en semiconductores orgánicos está directamente relacionado con la posición de los niveles HOMO-LUMO en la molécula individual y en las interacciones intermoleculares en el sólido.⁴

Una de las principales características de las moléculas que son candidatas para formar parte de dispositivos optoelectrónicos es un *band gap* estrecho entre los niveles HOMO-LUMO, permitiendo excitaciones electrónicas de baja energía, e indicando un comportamiento semiconductor. La mayor eficiencia en los dispositivos comerciales se ha dado cuando el *band gap* se encuentra en la región visible del espectro de emisión de luz (1.59 - 3.18 eV),⁵ aunque el comportamiento semiconductor se sitúa en un intervalo más amplio (1 - 4 eV). La reducción de la brecha energética entre el HOMO y el LUMO es entonces un factor determinante para favorecer el transporte de cargas a lo largo del dispositivo. Existen dos posibilidades para reducir el *band gap* en una molécula: (i) extendiendo la conjugación *pi* en la molécula y (ii) por construcción de interacciones donador-aceptor.⁴ En moléculas pequeñas (a diferencia de los polímeros *pi* conjugados), un *band gap* estrecho es una característica rara, sin embargo, ha sido conseguido empleando la primera estrategia.⁴

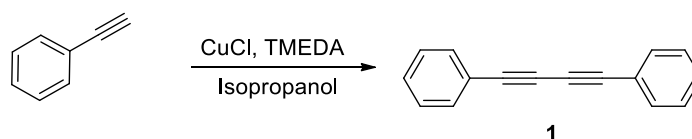
Adicionalmente, para proporcionar estabilidad térmica, cristalinidad y rigidez a los materiales, éstos deben contener estructuras aromáticas y planas. Una estructura aromática conocida es el anillo de pirrol, que es un heterociclo fundamental y que está presente en una gran cantidad de moléculas biológicamente activas e importantes tales como las porfirinas, pigmentos biliares, coenzimas y alcaloides. En años recientes se ha incrementado el interés en la síntesis de pirroles y sus oligómeros debido a las importantes aplicaciones que estos tienen como materiales semiconductores.

Los materiales orgánicos semiconductores presentan deseables características, tales como: su bajo costo, fácil procesamiento, flexibilidad, versatilidad para llevar a cabo su síntesis química, así como potenciales aplicaciones en dispositivos optoelectrónicos como OLED's, celdas solares, transistores de capa fina, sensores, entre otras.

Obtención de pirroles 1,2,5-trisustituidos

Síntesis y caracterización del 1,4-difenil-1,3-butadiino

La síntesis del diacetileno 1,4-difenil-1,3-butadiino (**1**) se llevó a cabo mediante la reacción de acoplamiento oxidativo de alquinos terminales de Glaser en la modificación de Hay,⁶ siendo el fenilacetileno el alquino terminal. El método de síntesis del compuesto (**1**), reportado previamente,⁷ emplea cloruro de cobre (I) como catalizador, TMEDA como ligante complejante bidentado e isopropanol como disolvente. Esto permite la precipitación del compuesto de interés y facilita su purificación (Esquema 1).



Esquema 1. Acoplamiento oxidativo del fenilacetileno

El rendimiento del compuesto obtenido fue del 95 % y fue caracterizado por espectroscopía de IR, ¹H-RMN, ¹³C-RMN y DSC.

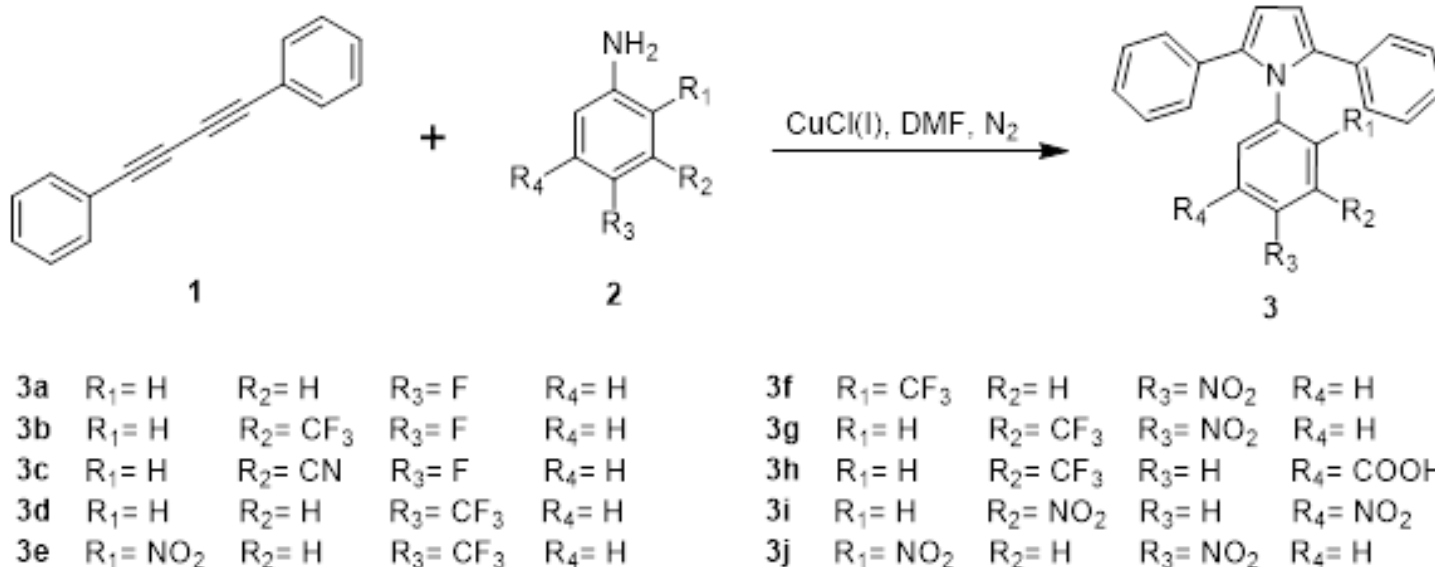
Síntesis y caracterización de pirroles 1,2,5-trisustituídos

Los pirroles trisustituídos fueron sintetizados empleando la reacción reportada por Reisch y Schulte.⁸ En un estudio previo⁷ se reportó que, al emplear cloruro de cobre (I) como catalizador en una relación del 20 % en mol con respecto al compuesto **1**, se obtienen altos rendimientos. Al igual que en el método reportado, se empleó DMF como disolvente en atmósfera de N₂. En este trabajo se utilizaron aminas aromáticas sustituidas con grupos electroattractores, tal como se muestra en el Esquema 2.

El rendimiento de los compuestos obtenidos osciló entre el 40 y el 90 %. La caracterización de estos materiales sintetizados se llevó a cabo por espectroscopía de IR, ¹H-RMN, ¹³C-RMN, UV-Vis, DSC y DRX. Las temperaturas de fusión de los materiales varían en un intervalo de 56 a 256 °C.

Mediante DRX se obtuvieron los patrones y se puede observar que todos los pirroles trisustituídos son compuestos cristalinos.

En los espectros de UV-Vis de los compuestos **3a - 3j**, la banda intermolecular que aparece en la región de alta energía en un intervalo de 280 a 380 nm pertenece a las transiciones electrónicas en los compuestos; esto se debe a la deslocalización electrónica que existe en la estructura conjugada del material.



Esquema 2. Obtención de pirroles trisustituídos a partir del 1,4-difenil-1,3-butadieno (**1**) con aminas aromáticas (**2**)

Actualmente es posible el diseño de materiales conductores orgánicos con niveles HOMO-LUMO ajustables para obtener valores de conductividad deseados para su potencial aplicación.

Cálculo teórico de la energía de los orbitales HOMO-LUMO de los pirroles trisustituidos

Como se ha mencionado anteriormente, la aplicación de los materiales en dispositivos optoelectrónicos tiene como base el comportamiento de los electrones en el medio, el cual depende sustancialmente de los niveles de energía HOMO y LUMO y de la interacción entre estos. Es por ello que los compuestos con bajas diferencias energéticas entre los orbitales frontera (*band gap*) son los deseables de obtener, debido a que poseen cierta habilidad para donar o aceptar electrones entre sus orbitales HOMO-LUMO, proceso básico que rige a los dispositivos electrónicos.

Por tal motivo, el cálculo teórico de la energía de los orbitales HOMO-LUMO para obtener los valores de *band gap* teórico de los materiales es indispensable para el diseño de nuevos materiales y para la determinación de posibles aplicaciones.

Los pirroles trisustituidos, objeto de estudio de este trabajo, tienen los sustituyentes electroattractores (de los cuales cada compuesto posee uno o dos). La diferencia en los pirroles trisustituidos radica en la naturaleza y posición de los sustituyentes electroattractores, ya que la presencia de éstos genera valores de *band gap* más estrechos, mayores afinidades electrónicas y mayores potenciales de ionización; a diferencia de los sustituyentes electrodonadores, que producen un efecto opuesto en los orbitales HOMO-LUMO debido a la densidad de electrones ampliada en la estructura.⁹

En trabajos anteriores se han estudiado a los pirroles trisustituidos con un solo sustituyente electroattractor en la posición *para*, obteniéndose un estrecho *band gap*.¹⁰ En este trabajo, el estudio se ha ampliado para mejorar el comportamiento semiconductor, ya sea cambiando la naturaleza del sustituyente o introduciendo un sustituyente electroattractor más (para reforzar el fenómeno).

Para obtener la energía de los orbitales HOMO-LUMO se llevaron a cabo cálculos teóricos que consisten en optimizaciones de geometría por los métodos DFT empleando la paquetería del programa GAUSSIAN09¹¹ con el funcional b3pw91^{12,13} y funciones base 6-31G; los cuales son adecuados para modelar moléculas orgánicas con una buena aproximación.^{14,15} Cabe mencionar que el error estándar de este método es del 4 %.¹⁶

Los cálculos realizados para los pirroles trisustituidos se muestran en la Tabla 1.

La principal característica considerada es la presencia del sustituyente $-\text{NO}_2$ en la mitad de los casos; ya que existen otros grupos atractores de electrones importantes, pero los compuestos con el grupo $-\text{NO}_2$ arrojan los mejores resultados. En reportes anteriores se ha encontrado que la presencia de grupos electroattractores se relaciona con un comportamiento semiconductor.¹⁰ Es importante destacar que, en los compuestos estudiados en este trabajo, el efecto electrónico es mayor cuando uno o ambos sustituyentes son el grupo $-\text{NO}_2$, como se observa en los compuestos **3e**, **3f**, **3g**, **3i** y **3j**; que son los que poseen los valores de *band gap* más estrechos.

La geometría del compuesto produce un flujo electrónico desde el anillo del pirrol hasta el anillo aromático sustituido, o en la dirección inversa (dependiendo de la naturaleza de los sustituyentes). En la Figura 1 se muestra en conjunto HOMO-LUMO para las moléculas que poseen el grupo $-\text{NO}_2$, el caso mostrado en la figura corresponde al compuesto **3i**, sin embargo, el comportamiento es similar para los compuestos que poseen al menos un grupo nitro en su estructura. El orbital HOMO se localiza en el pirrol y sus anillos aromáticos laterales, mientras que el orbital LUMO se encuentra ubicado en el anillo aromático unido al átomo de nitrógeno del pirrol y con una fuerte participación de los sustituyentes electroattractores.

Existen dos posibilidades para reducir el band gap en una molécula:
(i) extendiendo la conjugación pi en la molécula y
(ii) por construcción de interacciones donador-aceptor.

Para que los pirroles trisustituídos puedan ser empleados como semiconductores orgánicos es necesario considerar los valores de los orbitales frontera por separado, ya que los semiconductores tipo *p* o transportadores de huecos tienen valores bajos de energía en el nivel HOMO, lo que permite una inyección de huecos factible y una gran movilidad de los mismos; por el contrario, los semiconductores tipo *n* son aquellos que poseen bajos valores de energía en el nivel LUMO y una alta movilidad de electrones; finalmente, los semiconductores ambipolares son aquellos que presentan una eficiente inyección de carga y altas movilidades para huecos y electrones.

Como se puede observar en la Tabla 1, los valores que corresponden a los orbitales HOMO son muy similares para todos los compuestos, que sugiere que presentan la misma tendencia con respecto a la movilidad de huecos; sin embargo,

el compuesto **3i** presenta el menor valor, lo que indica que este compuesto podría ser empleado como semiconductor tipo *p*.

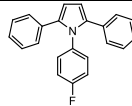
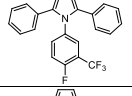
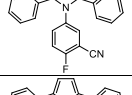
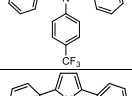
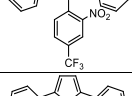
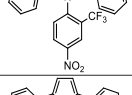
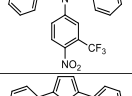
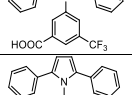
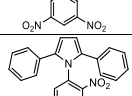
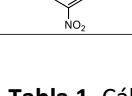
Compuesto	Estructura	Nombre del compuesto	HOMO (eV)	LUMO (eV)	Band gap (eV)
3a		1-(4-fluorofenil)-2,5-difenil-1H-pirrol	-5.306	-0.761	4.55
3b		1-(4-fluoro-3-(trifluorometil)fenil)-2,5-difenil-1H-pirrol	-5.523	-1.632	3.89
3c		5-(2,5-difenil-1H-pirrol-1-yl)-2-fluorobenzonitrilo	-5.551	-1.986	3.57
3d		2,5-difenil-1-(4-(trifluorometil)fenil)-1H-pirrol	-5.442	-1.442	4.00
3e		1-(2-nitro-4-(trifluorometil)fenil)-2,5-difenil-1H-pirrol	-5.660	-3.238	2.42
3f		1-(4-nitro-2-(trifluorometil)fenil)-2,5-difenil-1H-pirrol	-5.551	-2.802	2.75
3g		1-(4-nitro-3-(trifluorometil)fenil)-2,5-difenil-1H-pirrol	-5.714	-3.374	2.34
3h		3-(2,5-difenil-1H-pirrol-1-yl)-5-(trifluorometil)ácido benzoico	-5.741	-2.394	3.35
3i		1-(3,5-dinitrofenil)-2,5-difenil-1H-pirrol	-5.796	-3.700	2.10
3j		1-(2,4-dinitrofenil)-2,5-difenil-1H-pirrol	-5.697	-3.238	2.45

Tabla 1. Cálculo teórico del *band gap*

En la Tabla 1 también se presentan los valores que pertenecen a los orbitales LUMO, de los cuales el compuesto **3i** exhibe el menor valor, lo que señala que puede ser empleado como semiconductor tipo *n*; por lo tanto, el compuesto **3i** podría comportarse como un material ambipolar, ya que puede presentar altas movilidades de huecos y de electrones.

El modelo teórico sugiere que, en el caso de los compuestos que poseen al menos un grupo $-\text{NO}_2$ en su estructura, el efecto inductivo es fundamental para obtener valores estrechos de *band gap*, ya que el flujo electrónico originado por la nube

aromática tiene una dirección específica que se encuentra definida por la carga negativa deslocalizada entre ambos átomos de oxígeno del grupo $-\text{NO}_2$. Por lo tanto, el HOMO, que comprende en mayor parte el sistema aromático y que posee el menor número de electrones, tiende a acercarse al orbital LUMO, disminuyendo el valor del *band gap*. Este efecto es más fuerte en el compuesto **3i**.

La Figura 2 muestra la forma y ubicación de los orbitales moleculares frontera correspondientes a los compuestos que no poseen al grupo $-\text{NO}_2$ en su estructura, particularmente los orbitales HOMO-LUMO del compuesto **3b**. No obstante, el comportamiento es análogo para los compuestos **3a**, **3c**, **3d**, **3h**. En estos casos los valores de *band gap* calculados son relativamente mayores a los casos que presentan al menos un grupo $-\text{NO}_2$, lo cual se atribuye a los orbitales frontera en estos compuestos. El orbital HOMO presenta el mismo comportamiento que en los compuestos que contienen al menos un grupo $-\text{NO}_2$ en su estructura, es decir, se sitúa en el pirrol y sus anillos aromáticos laterales; sin embargo, el orbital LUMO se ubica predominantemente en el anillo aromático unido al átomo de nitrógeno del pirrol, lo cual difiere del primer caso en el que el orbital LUMO se localiza sobre el grupo $-\text{NO}_2$. Este hecho sugiere que el flujo electrónico es equivalente en todos los casos, esto es, los electrones fluyen desde los anillos aromáticos laterales del pirrol al anillo aromático sustituido. No obstante, el flujo electrónico de mayor importancia es el que se presenta en las moléculas que poseen al sustituyente $-\text{NO}_2$.

Los valores de *band gap* que se presentan en la Tabla 1 indican que el compuesto **3a** tiene un comportamiento aislante con un *band gap* superior a 4 eV, a diferencia del resto de los compuestos que poseen valores de *band gap* dentro del intervalo de un semiconductor. Estos valores calculados deben compararse con los valores de *band gap* experimentales para definir sus propiedades eléctricas.

Band gap óptico en los pirroles trisustituidos

Los pirroles trisustituidos fueron caracterizados por DRX. Se puede observar que ellos son compuestos cristalinos. Con el conocimiento de esta información se empleó el método de Tauc con el fin de determinar el *band gap* óptico de los materiales. Este método se basa en la obtención del espectro UV-vis de cada material, para el posterior cálculo del coeficiente de absorción (α) y la energía del fotón ($h\nu$). A partir de estos parámetros se construye la gráfica de Tauc y en las curvas obtenidas para cada material se identifica la zona lineal, que fue extrapolada hasta la intersección con el eje $h\nu$; el punto de intersección con la abscisa se considera el *band gap* óptico de cada material.

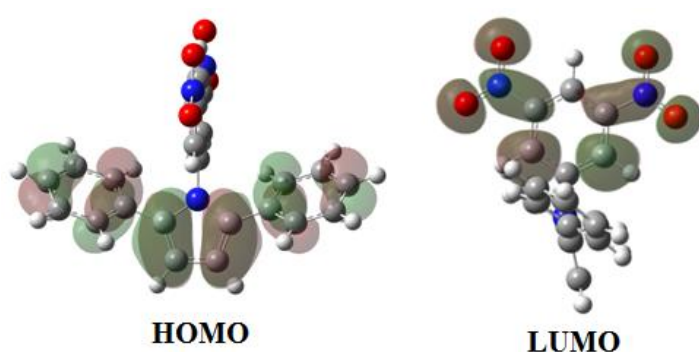


Figura 1. Orbitales moleculares frontera de las moléculas que contienen el sustituyente $-\text{NO}_2$

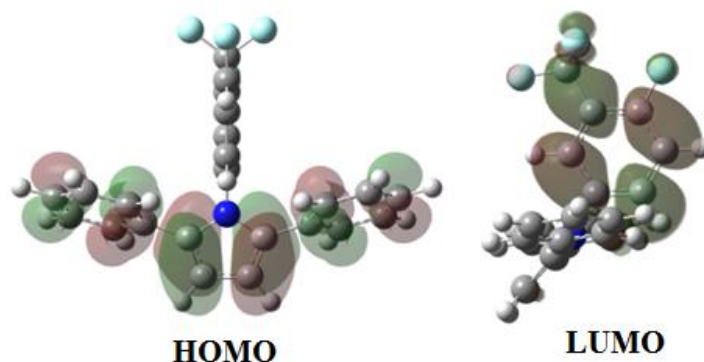


Figura 2. Orbitales moleculares frontera de las moléculas que no contienen el sustituyente $-\text{NO}_2$

Los resultados numéricos obtenidos se muestran en la Tabla 2, en la que se puede apreciar que los compuestos **3a**, **3b**, **3c**, **3d** y **3h** tienen un *band gap* de Tauc considerablemente diferente del obtenido por el método de DFT.

Para corroborar el *band gap* obtenido por el método de Tauc, e incluir la influencia del espesor en los valores de *band gap* de los compuestos, se llevó a cabo la determinación del *band gap* óptico empleando la metodología propuesta por Cody, que consiste en extrapolar la tendencia lineal observada en las gráficas $(\alpha/h\nu)^2$ vs $h\nu$ hasta hallar la intersección con el eje $h\nu$. El valor de la intersección del eje de la abscisa corresponde al valor del *band gap* de Cody, estos valores se presentan en la Tabla 2 para los diferentes compuestos.

Band gap obtenidos por el método de Tauc son muy similares a los obtenidos por el método de Cody y el método de DFT. La similitud en los valores de *band gap* de Cody y Tauc, también es indicio de que en estos compuestos el espesor no es un factor determinante en el transporte de cargas eléctricas. Con el fin de mejorar su eficiencia, en un número importante de dispositivos optoelectrónicos, los semiconductores orgánicos se depositan como películas delgadas cuya fabricación puede ser compleja y los puede degradar químicamente. El hecho de que, en estos compuestos, el espesor no sea un factor de gran relevancia podría permitir su aplicación en forma de obleas delgadas con alto grado de cristalinidad.

Compuesto	<i>Band gap</i> (eV)		
	DFT	Tauc	Cody
3a	4.55	2.7	2.4
3b	3.89	3.3	3.2
3c	3.57	1.2	---
3d	4.00	3.3	3.2
3e	2.42	2.5	2.6
3f	2.75	2.7	2.9
3g	2.34	2.2	2.1
3h	3.35	1.1	---
3i	2.10	2.1	2.0
3j	2.45	2.8	2.6

Tabla 2. Comparación de los valores de *band gap* de los compuestos **3a** - **3j** obtenidos por el método de DFT, de Tauc y de Cody

**Los nuevos pirroles
1,2,5-trisustituidos
obtenidos presentan un
comportamiento
semiconductor con valores
de *band gap* en un
intervalo de 2.0 - 3.2 eV;
por lo que estos materiales
pueden ser empleados en
aplicaciones
optoelectrónicas**

Además, en este grupo de compuestos se encuentran los que presentan menores valores de *band gap*, como el compuesto **3i**, el cual posee dos grupos $-\text{NO}_2$ en las posiciones 3,5 de anillo aromático unido al átomo de nitrógeno, seguido del compuesto **3g**, el cual cuenta con un grupo $-\text{NO}_2$ en la posición *para* y un grupo $-\text{CF}_3$ en la posición *meta* del anillo aromático sustituido.

Cuando los sustituyentes se encuentran en las posiciones *orto* y *para*, se observa un incremento en los valores de *band gap* como ocurre en los compuestos **3e**, **3f** y **3j**. Sin embargo, la combinación más favorecida, al poseer el menor *band gap*, se presenta al contar con un grupo $-\text{NO}_2$ en la posición *orto* y un grupo $-\text{CF}_3$ en la posición *para* (**3e**). Los compuestos que no cuentan con el grupo $-\text{NO}_2$ en su estructura (**3a**, **3b** y **3d**), presentan valores de *band gap* óptico menores a los obtenidos por el método de DFT. La diferencia puede atribuirse a un proceso de transporte de carga basado en saltos, en el que las cargas eléctricas se desplazan fácilmente entre estructuras ordenadas.

De los pirroles trisustituidos que no cuentan con el grupo $-\text{NO}_2$, el que presenta el menor valor de *band gap* óptico, es el compuesto **3a**, el cual tiene como único sustituyente al grupo $-\text{F}$ en la posición *para* del anillo aromático sustituido. Cuando el compuesto posee al grupo $-\text{CF}_3$ sus valores de *band gap* ópticos se incrementan, como ocurre en los compuestos **3b** y **3d**. El compuesto **3b** tiene como sustituyentes al grupo $-\text{CF}_3$ y al grupo $-\text{F}$ en las posiciones *meta* y *para* respectivamente, mientras que el compuesto **3d** cuenta el grupo $-\text{CF}_3$ como único sustituyente en la posición *para*.

Finalmente, se observa que los valores de *band gap* óptico obtenidos por los métodos de Tauc y Cody para los compuestos **3a**, **3b**, **3d**, **3e**, **3f**, **3g**, **3i**, **3j** se encuentran dentro del intervalo establecido para los semiconductores orgánicos. Por lo tanto, estos materiales pueden ser considerados para su uso en la producción de dispositivos optoelectrónicos. Los pirroles trisustituidos con al menos un grupo $-\text{NO}_2$ en su estructura pueden comportarse como semiconductores tipo *p* y los materiales que poseen los grupos $-\text{F}$ y $-\text{CF}_3$ como semiconductores tipo *n*.

Conclusiones

Se realizaron las optimizaciones de geometría de los pirroles 1,2,5-trisustituidos, con las que se determinó la energía de los orbitales frontera HOMO y LUMO para obtener los valores de *band gap* de los compuestos, los cuales se encontraron en un intervalo de 2.10 - 4.55 eV. Los compuestos con los menores valores de *band gap* son los que cuentan con al menos un grupo $-\text{NO}_2$ en su estructura y son: **3e**, **3f**, **3g**, **3i** y **3j**; de los cuales el compuesto 1-(3,5-dinitrofenil)-2,5-difenil-14H-pirrol (**3i**) posee el valor más bajo de *band gap*.

Se sintetizaron, mediante la reacción de Reisch-Schulte, diez nuevos pirroles 1,2,5-trisustituidos con sustituyentes electroattractores ($-\text{NO}_2$, $-\text{CF}_3$, $-\text{CN}$, $-\text{COOH}$, $-\text{F}$) ubicados en el anillo aromático unido al átomo de nitrógeno del pirrol. Además, se caracterizaron por espectroscopía de IR, UV-Vis, ^1H -RMN, ^{13}C -RMN, DSC y DRX.

Se determinó el *band gap* óptico de los pirroles 1,2,5-trisustituidos por el método de Tauc y el método de Cody. Ocho pirroles trisustituidos presentan un comportamiento semiconductor con valores de *band gap* en un intervalo de 2.0 - 3.2 eV; por lo que estos materiales pueden ser empleados en aplicaciones optoelectrónicas. En particular, el compuesto **3i** podría comportarse como semiconductor ambipolar. La cristalinidad de los compuestos favorece el transporte de cargas eléctricas y la similitud entre el *band gap* de Cody y de Tauc dan indicio de que los compuestos pudieran formar parte de dispositivos optoelectrónicos tanto en la forma de película como en oblea.

Agradecimientos

Los autores agradecen a Adriana Tejeda, María Teresa Vázquez, Oralia Jiménez, Alberto López, Miguel A. Canseco y Alejandro Pompa por el aporte técnico. También se agradece a DGAPA-UNAM por la ayuda financiera de los proyectos DGAPA PAPIIT IN203816 y RN203816. Olivia Monroy agradece a CONACYT por la beca recibida. M. E. Sánchez-Vergara agradece la ayuda financiera de la Anahuac Mexico University con el proyecto número NNAIASEVM16070616.

Bibliografía

- ¹C. Zhang, P. Chen & W. Hu. Organic Light-Emitting Transistors: Materials, Device Configurations, and Operations. *Small* **12** (2016), 1252–1294.
- ²R. J. Mortimer, A. L. Dyer & J. R. Reynolds, Electrochromic organic and polymeric materials for display applications. *Displays* **27** (2006), 2–18.
- ³A. C. Arias, J. D. MacKenzie, I. McCulloch, J. Rivnay & A. Salleo. Materials and Applications for Large Area Electronics: Solution-Based Approaches. *Chem. Rev.* **110** (2010), 3–24.
- ⁴M. Bendikov, F. Wudl & D. F. Perepichka. Tetrathiafulvalenes, Oligoacenes, and Their Buckminsterfullerene Derivatives: The Brick and Mortar of Organic Electronics. *Chem. Rev.* **104** (2004), 4891–4946.
- ⁵R. Salcedo. Aromaticity and electronic properties of Heterosuperbenzene (Heterohexabenzocoronene). *J. Mol. Model.* **13** (2007), 1027–1031.
- ⁶A. Hay, A. Oxidative Coupling of Acetylenes. II 1. *J. Org. Chem.* **27** (1962), 3320–3321.
- ⁷G. Huerta, L. Fomina, L. Rumsh & M. G. Zolotukhin. New polymers with N-phenyl pyrrole fragments obtained by chemical modifications of diacetylene containing-polymers. *Polym. Bull.* **57** (2006), 433–443.
- ⁸J. Reisch, K.E. Schulte. Pyrrol-Derivate aus Diacetylenen. *Angew. Chemie* **73** (1961) 241–241.
- ⁹J. Roncali. Molecular Engineering of the Band Gap of π -Conjugated Systems: Facing Technological Applications. *Macromol. Rapid Commun.* **28** (2007), 1761–1775.
- ¹⁰L. Fomina, L. *et al.* Semiconductor behavior of 2,5-aromatic disubstituted pyrroles, viewed from an experimental and theoretical perspective. *Mater. Chem. Phys.* **124** (2010), 257–263.
- ¹¹M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H. P. Hratchian, A. F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J. L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J. A. Montgomery Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J. Heyd, E. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, N. J. Millam, M. Klene, J. E. Knox, J. B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, R. L. Martin, K. Morokuma, V. G. Zakrzewski, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, S. Dapprich, A. D. Daniels, Ö. Farkas, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, J. Cioslowski, and D. J. Fox. Gaussian 09, Revision A.1, Gaussian, Inc., Wallingford, CT, 2009.
- ¹²A. D. Becke. Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior, *Phys. Rev. A* **38** (1988), 3098–3100.
- ¹³J. P. Perdew and Y. Wang. Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy. *Phys. Rev. B* **45** (1992), 13244–13249.
- ¹⁴C. J. Wu, L. H. Yang, L. E. Fried, J. Quenneville, & T. J. Martinez. Electronic structure of solid 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene under uniaxial compression: Possible role of pressure-induced metallization in energetic materials. *Phys. Rev. B* **67** (2003), 235101.
- ¹⁵C. W. Bauschlicher, J. W. Lawson, A. Ricca, Y. Xue, & M. A. Ratner. Current–voltage curves for molecular junctions: the effect of Cl substituents and basis set composition. *Chem. Phys. Lett.* **388** (2004), 427–429.
- ¹⁶H. Arı & Z. Büyükmumcu. Comparison of DFT functionals for prediction of band gap of conjugated polymers and effect of HF exchange term percentage and basis set on the performance. *Comput. Mater. Sci.* **138** (2017), 70–76 (2017).



Las fibras sintéticas revolucionan el automovilismo

Alan Joel Miralrio Pineda

Tecnológico de Monterrey, Campus Toluca
Eduardo Monroy Cárdenas 2000, 50110 Toluca, Estado de
México, México

miralrio@tec.mx

En 1981 se marcó un hito en la historia del automovilismo con la introducción de la fibra de carbono en los monocascos de los autos de la Fórmula 1™. Es probable que el diseñador, Colin Chapman, nunca hubiera imaginado que materiales similares al que implementó en el Lotus Type 87 salvarían la vida de muchos pilotos en los años venideros, al igual que llevarían a romper varios records en otros deportes. A diferencia del McLaren MP4/1, para el cual la firma aeroespacial Hercules Corporation elaboró su monocasco en fibra de carbono (McLaren Automotive Limited, s/f), el automóvil desarrollado enteramente por Lotus incorporó una solución todavía más innovadora (Robson, 2015). En el cuerpo del Type 87, las fibras de carbono fueron reforzadas con otras de un compuesto sintético mejor conocido por su nombre comercial, el **Kevlar®**.

El Kevlar®, fibra de **poliparafenileno tereftalamida** (Figura 13), fue sintetizada por primera vez en 1965 por la química Stephanie Kwolek de la firma DuPont™ (Science History Institute, 2016). Para ese entonces, DuPont™ ya era una compañía reconocida internacionalmente por lo revolucionario de sus polímeros. Con el Kevlar® se dio el nacimiento de toda un área de investigación y desarrollo en fibras sintéticas, con prestaciones que superan a las encontradas en las sustancias de origen natural. Curiosamente, las maravillosas propiedades de la fibra de **p-aramida** (su nombre no comercial) emergen de la similitud que ésta guarda con la seda de araña, una sustancia natural que todos conocemos.

Antes que nada, debemos entender la razón por la cual se empleó la p-aramida en el Type 87 en conjunto con, la de por sí muy resistente, fibra de carbono. Las velocidades cada vez más altas que se alcanzaban con los autos de la máxima categoría del automovilismo mundial también aumentaban los riesgos para la vida del piloto, al mismo tiempo que se ponía mayor presión en la estructura misma de los vehículos. Esto último llegó a tal grado, en los años 80, que se tuvo que recurrir a materiales que fueran más resistentes y ligeros que las aleaciones metálicas que se usaban en ese entonces. Así, la solución propuesta en el Lotus Type 87 fue reforzar la estructura de carbono con otra fibra, una mejor conocida por servir como blindaje contra proyectiles (Utracki, 2010).

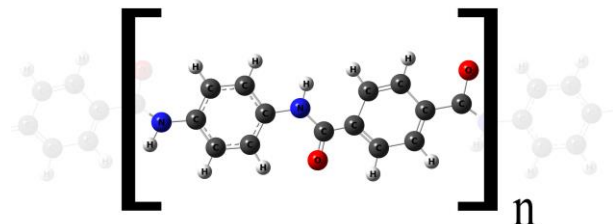


Figura 13. Estructura del *poliparafenileno tereftalamida*, entre corchetes se resalta su monómero

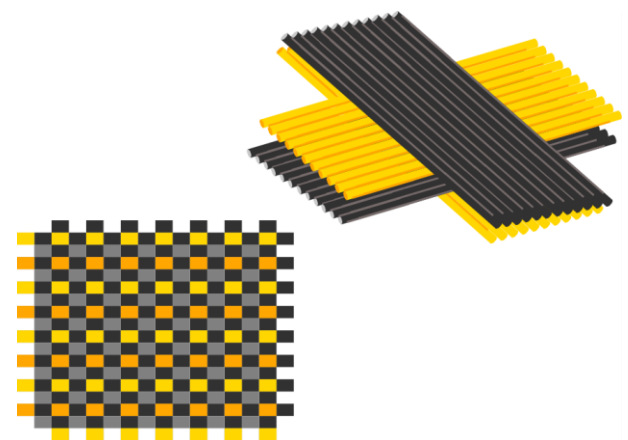


Figura 14. A) Esquema de un cruce de filamentos de fibra de carbono con otros de fibra de p-aramida. B) Entramado típico de fibras de carbono y p-aramida

Al igual que la fibra de carbono, la p-aramida es mucho más ligera y “resistente” si se le compara con el aluminio o el acero. Por poner un ejemplo, un filamento de la fibra comercial Kevlar® 49 es capaz de soportar 8 veces más peso (sin romperse), que otro hecho con la aleación de aluminio 2014-T6 (MatWeb, LLC., s/f). Una ventaja más radica en su “ligereza” (menor densidad), ya que una pieza hecha de Kevlar® 49 tendrá casi la mitad de la masa de otra fabricada con aquella aleación de aluminio (MatWeb, LLC., s/f). Así, a primera vista, las propiedades de la p-aramida parecen ser muy similares a las de la fibra de carbono (Toray Composite Materials America, Inc., s/f), pero sus diferencias son remarcables.

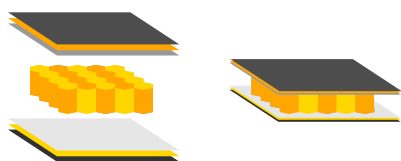


Figura 15. Esquema de un material compuesto de capas de fibras de carbono, p-aramida, m-aramida y nido de fibra de PBO en forma de panal de abeja

La fibra de p-aramida sobrepasa a la de carbono en cuanto a “ligereza”, por su menor densidad, aunque también es ligeramente menos resistente (Askeland & Wright, 2015). Algo muy importante es que la p-aramida puede soportar más de 400 °C de temperatura, en presencia de aire, sin alterarse (DuPont, 1992). Si bien este material puede llegar a arder, al retirar la fuente de calor el fuego se apagará sin ayuda (DuPont, 1992). Finalmente, pero no por eso menos importante, está el hecho de que se requieren grandes cantidades de energía para romper el material (Figucia, 1980). Esto último hace que esta fibra sea ideal para aplicaciones en donde se requiera protección adicional, como en los cascos de los pilotos y en los habitáculos que se requieren. Para fines prácticos, en términos coloquiales, se puede decir que los autos empleados en el automovilismo son a prueba de balas. Así, ambas fibras guardan diferencias sutiles que llevan a usarlas en forma de **materiales compuestos**, formando “tejidos” con ambas fibras (**Figura 14**). Aunque también

existela posibilidad de unir capas de diferentes materiales mediante resinas y adhesivos (Askeland & Wright, 2015) (

Figura 15).

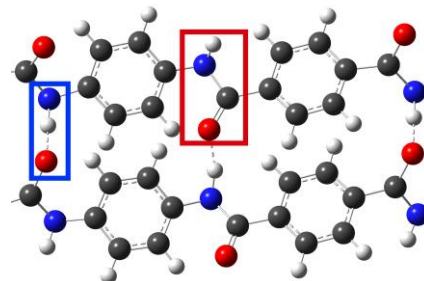


Figura 16. Estructura de una capa de cadenas de PBO enlazadas por puentes de hidrógeno. En el recuadro rojo, la amida que enlaza dos anillos de carbono. En el recuadro azul, un enlace por puente de hidrógeno entre los átomos de dos cadenas vecinas

Ahora viene algo importante ¿De dónde surgen esas singulares propiedades de la fibra de p-aramida? Una vez más, la respuesta está en la estructura misma de la fibra. Al ser una **amida**, abreviación de **poliamida aromática**, estamos ante un polímero. En este, cada “eslabón” está unido con sus vecinos mediante enlaces **amida** (**Figura 16**). En este tipo de enlaces se forman al “conectar” un átomo de **nitrógeno (N)** con uno de **carbono (C)**, el cual a su vez debe estar **doblemente enlazado** con otro de **oxígeno (O)** (**Figura 16**). Ese **doble enlace** hace referencia a que, entre el carbono y el oxígeno, se comparten cuatro electrones, en lugar de los dos usados en un enlace simple. Como los electrones hacen el trabajo de “pegar” los átomos en una molécula, ese doble enlace (C=O) es más difícil de romper que uno simple (C-O). Por último, los enlaces tipo amida le dan gran rigidez a toda la cadena que forma el polímero.

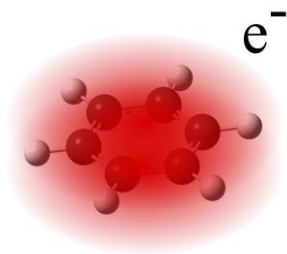


Figura 17. En rojo se muestran las regiones donde se pueden encontrar los electrones deslocalizados en un anillo aromático de carbono

Solo nos resta explicar el significado de aromática y el misterioso prefijo “p-”. Como en el caso del grafito, cada átomo de carbono en los anillos “hexagonales” de la p-aramida se une con otros tres átomos, dejando libres a los electrones restantes para moverse por todo el anillo (**Figura 17**), esta propiedad es la llamada **aromaticidad**. También, de forma similar al grafito, esos electrones sirven de adhesivo entre los átomos de los anillos, dando como resultado una estructura más fuerte y difícil de romper. El prefijo “p-” hace alusión a la posiciones en las cuales se unen los grupos amida al anillo de carbono. En una **substitución-para**, abreviada como “p-”, a las dos moléculas que se unen con el anillo se encuentran en posiciones opuestas una de la otra. Esa forma de “conectar” los anillos con el resto de los átomos le confiere algunas de sus inusuales propiedades.

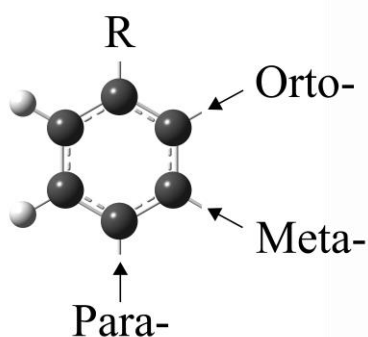


Figura 18. Patrón que siguen las sustituciones *para*, *meta* y *orto*. Con la letra R se denota el enlace fijo que se usa como referencia

Gracias a la sustitución *para*, las cadenas pueden formar múltiples enlaces entre sí, los llamados **enlaces por puente de hidrógeno** (**Figura 16**). Para simplificar este concepto (o complicarlo aún más), podemos imaginarnos a este tipo de

enlace como un triángulo amoroso. En este, el oxígeno de una cadena vecina, busca interponerse entre el amor (enlace) que hay entre una pareja de átomos de nitrógeno e hidrógeno (**H**). Este tipo de uniones hacen que las cadenas sean más difíciles de separar las unas de las otras, lo que lleva a formar capas. Cada una de esas capas, como en el grafito, puede unirse débilmente con otras hasta formar “paquetes de hojas”. Los filamentos de la fibra de p-aramida son el resultado de “enrollar” esos paquetes, capas, alrededor de un eje (**Figura 19**).

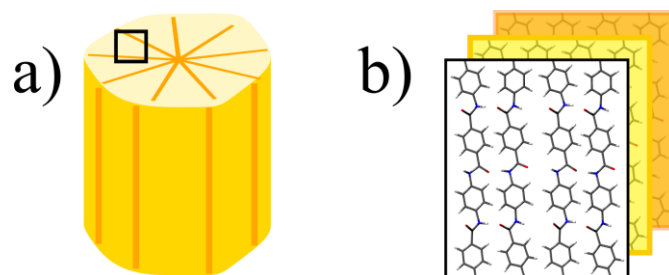


Figura 19. A) Estructura de un filamento de p-aramida. B) Apilamiento de las capas formadas por cadenas de p-aramida en una sección del filamento

Tal vez la genialidad detrás de la fibra de p-aramida no radica en sus asombrosas cualidades, sino en el proceso mismo que desarrolló Stephanie Kwolek para su obtención. Hasta su descubrimiento, las fibras que se producían en DuPont™ se basaban en sustancias poliméricas traslúcidas y viscosas, por lo que aquellas que eran opacas y fluían con gran facilidad eran descartadas. Kwolek tuvo la iniciativa de persuadir a sus colaboradores para usar una de esas sustancias “fallidas” en un aparato llamado **hilera** (**Figura 20**). En este dispositivo, similar a una duya pastelera o una jeringa, el fluido se presiona para hacerlo pasar por un pequeño orificio. El resultado de procesar el fluido de p-aramida con este aparato fueron filamentos muy rígidos de color amarillo-dorado, que terminaron siendo el Kevlar®. Esto le valió a la científica un gran reconocimiento internacional, por todas las vidas que han sido salvadas gracias a su valioso descubrimiento.

La posibilidad de “hilar” aquel fluido se debió a que la sustancia de la cual se obtuvo la fibra de p-aramida se encontraba en un estado de la materia poco común, el de **crystal líquido**. Este estado tiene algunas propiedades tanto de los **sólidos** como de los **líquidos** (formas de la materia que vemos a diario). Mientras que en un sólido es fácil encontrar los átomos que lo forman, en arreglos ordenados que se repiten una y otra vez

como pisos de mosaico (los llamados **sólidos cristalinos**), las partículas que forman un líquido están completamente desordenadas. En la sustancia que sirve de base para la fibra, las moléculas del polímero se arreglan paralelas entre sí, formando paquetes de planos bien definidos llamados **cristales**. Esos pequeños “paquetes”, dispersos al azar en ácido sulfúrico (H_2SO_4), dan lugar al cristal líquido (**Figura 20**).

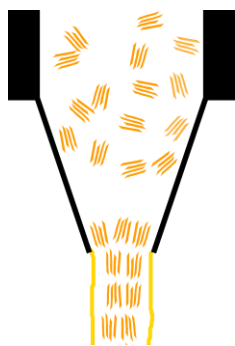


Figura 20. Diagrama de la formación de un filamento de p-aramida al hacer pasar el cristal líquido, su precursor, a través de una hilera

El proceso ideado por Kwolek forzaba a los pequeños cristales de p-aramida a alinearse unos con otros al salir por el orificio de la hilera (**Figura 20**), resultando en esos filamentos sólidos de gran rigidez. Lo siguiente fue eliminar el ácido sulfúrico restante para “secar la fibra”. Por último, consiguió que la fibra fuera más resistente al hacerla pasar por unos rodillos que la estiran y la presionan. Con este proceso se logra que los cristales de p-aramida se acerquen más entre sí, aumentando el número de puentes de hidrógeno entre sus cadenas. A mayor número de enlaces entre los átomos de diferentes cadenas, más difícil será separarlas, y la fibra obtenida será más “fuerte”.

Algo que también nos puede resultar muy impresionante es que esa forma de obtener fibras sintéticas (con base en cristales líquidos) resultó ser casi idéntica a la que realizan las arañas para fabricar su seda. Varios años después del descubrimiento de Kwolek, se reveló que las sustancias empleadas por las arañas para fabricar sus sedas también son cristales líquidos. En este caso, los cristales se componen por moléculas muy complejas llamadas proteínas, las cuales son producidas en órganos especializados que tienen las arañas (**Figura 21**) llamados glándulas de la seda. Igual que con la p-aramida, la seda de araña se forma al “expulsar” ese cristal

líquido por otro de sus órganos que tiene forma de hilera, provocando así que los cristales de proteínas se alineen y formen una fibra sólida (**Figura 21**). Algunas arañas incluso poseen la capacidad de formar diferentes tipos de proteínas y de sedas, según sus necesidades. Algunas de estas “telarañas” son conocidas por ser mucho más resistentes que el acero, al grado de incluso poder compararse con la fibra de p-aramida. Nos puede parecer sorprendente como un método desarrollado en el laboratorio, después de años de investigación, resultó similar a un proceso que ocurre en la naturaleza y que vemos comúnmente a nuestro alrededor.

Aunque la fibra de p-aramida logra conjuntar resistencia con ligereza, haciéndolo un excelente material estructural para los automóviles de competencia, también es parte de otras ingeniosas aplicaciones. Por poner un ejemplo, los tanques de combustible de estos vehículos están hechos de un *material compuesto* que contiene la fibra de p-aramida, de esta forma el tanque será difícil de penetrar y/o romper, pero también será flexible como una bolsa de plástico. A pesar de estas medidas, estar involucrado en un incendio sigue siendo un riesgo inherente a este deporte.

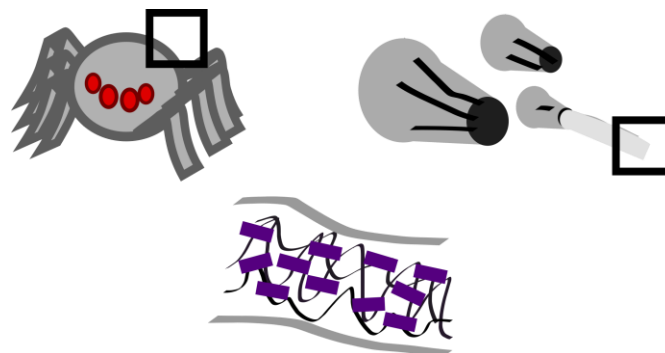


Figura 21. A) Esquema de una araña y la posición de sus hileras. B) Formación de la seda al expulsar el precursor de la seda por una de las hileras. C) Arreglo cristalino de las proteínas en la seda

El primero de agosto de 1976 quedó marcado en la historia del automovilismo mundial por un trágico suceso. Durante la sesión de calificación del Gran Premio de Alemania, el campeón reinante de la Fórmula 1™, Nikki Lauda, se vio envuelto en llamas después de impactarse contra el muro de contención al perder control sobre su Ferrari 312 T2 (Ferrari F1, s/f). El auto quedó a mitad de la pista con Lauda atrapado dentro de la cabina. Para después verse impactado en la parte trasera por el Surtees de Brett Lunger y el Hesketh de Harald Ertl. (BBC-UK, 1976) Evitando la colisión, los también pilotos

Arturo Merzario y Guy Edwards, se detuvieron al borde del camino para auxiliar a su compañero y rival. Después de un intento fallido, los pilotos lograron rescatar a Lauda de las llamas, quedándose junto al piloto de la escudería Ferrari hasta el arribo de los servicios de emergencia.

Lauda sobrevivió a aquel accidente con notorias secuelas físicas, ya que su casco salió disparado desde el impacto inicial. Sin esta protección adicional, el piloto perdió parte de una oreja y ambos párpados, debido a las quemaduras sufridas. Los pulmones de Lauda también fueron gravemente afectados por el humo que inhaló durante el incendio. A pesar de todo esto, solo seis semanas después del incidente (todavía cubierto de vendas ensangrentadas) el sobreviviente regresó a defender su título como campeón mundial. Aunque los pilotos están conscientes de todos estos peligros a los que se encuentran expuestos. ¿Cómo se puede proveerles de una protección efectiva contra el fuego y las altas temperaturas?

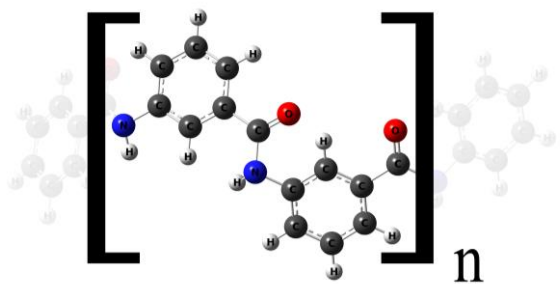


Figura 22. Estructura del polimetafenileno isoftalamida. Entre corchetes se resalta su monómero

Apenas un año antes de aquel drama vivido en Nürburgring, Alemania, la **Federación Internacional de Automovilismo (FIA)** había impuesto que los pilotos usaran ropa retardante al fuego. La solución en aquel momento fue emplear trajes con los mismos materiales usados por los astronautas de la NASA (Formula 1(R), s/f). Hoy en día, la respuesta es la fibra de otra aramida de altas prestaciones, comercializada por Dupont™ bajo el nombre Nomex®. La fibra de **polimetafenileno isoftalamida**, como también se conoce al Nomex (R), es una meta-aramida. Con esto nos referimos a que las aminas se unen al anillo en un ángulo de 120°, dejando un átomo de hidrógeno entre ambos enlaces, denominándose **sustitución meta**. Esta pequeña diferencia entre meta- y para- aramidas les da propiedades totalmente diferentes. La sola sustitución meta es suficiente para que no se formen numerosos puentes de hidrógeno entre las cadenas de m-aramida, produciendo un

material más fácil de romper. Con la m-aramida (para abreviar), no es posible formar los pequeños arreglos cristalinos del tipo p-aramida, por lo que ésta no es un cristal líquido. Sin embargo, las telas producidas con estas fibras, mediante el procesado con hileras, resultan ser muy flexibles y resistentes a las altas temperaturas (Formula 1 (R), s/f). Además, las fibras son resistentes a sustancias químicas comunes y no son tóxicas para los seres humanos u otros animales (DuPont, s/f).

Por otro lado, mientras que la temperatura del aceite usado para freír alimentos es de unos 150 °C, la m-aramida puede soportar temperaturas de 220 °C sin sufrir alteraciones. Su resistencia al fuego quedó de manifiesto desde su invención; en la patente original del Nomex® se hace mención a que una tela de m-aramida tardaría unos 3.8 segundos en arder ante una flama directa, mientras que a otra hecha de algodón le tomaría solo 2 segundos (Wilfred, 1966). También, la fibra sintética dejará de arder a los 5 segundos después de remover la fuente de calor, mientras que a la de algodón le tomará entre 13 y 430 segundos (Wilfred, 1966). También es un excelente aislante eléctrico y térmico (Wilfred, 1966). Todo esto lo hace un fuerte candidato a tomar en cuenta en un sinfín de aplicaciones en donde se requiera protección ante las altas temperaturas, sustancias químicas y corrientes eléctricas. Es parte integral de los equipos de protección empleados por los bomberos y pilotos de combate, aunque también se le encuentra en la aviación civil, como recubrimiento.



Figura 23. Esquema de los **materiales compuestos** utilizados en un casco moderno

Las regulaciones sobre el equipo que deben usar los pilotos se han hecho más exigentes dentro del mundo del automovilismo. En la actualidad, el traje de un piloto debe resistir temperaturas de 600 a 800 °C, sin exceder 41 °C en su interior, por al menos 11 segundos (Formula 1(R), s/f). También las cabinas de los vehículos pueden estar formadas por materiales compuestos que contengan fibras de m-aramida, para darle cierta resistencia a la estructura en caso

de un incendio. Inclusive, podemos decir que la regulación sobre los cascos que fue introducida en 2019 por la FIA lleva las regulaciones al extremo. Según estos requisitos, el casco de un piloto debe resistir el impacto de un objeto de 225 g a una velocidad de 250 km/h, lo que es equivalente, en términos de energía cinética, a una bala disparada por un arma de calibre 9 mm. Además, el fuego producido sobre un casco, al exponerlo ante una flama a 790 °C de temperatura, debe extinguirse espontáneamente al quitarlo de la fuente de calor. Aparte de todo, el casco también debe ser muy ligero, con alrededor de 1.2 Kg de masa total (Formula 1(R), s/f). La única forma de cumplir con todos esos requisitos es empleando materiales compuestos con fibras de p-aramida, m-aramida, fibra de carbono y uno más, el Zylon®.

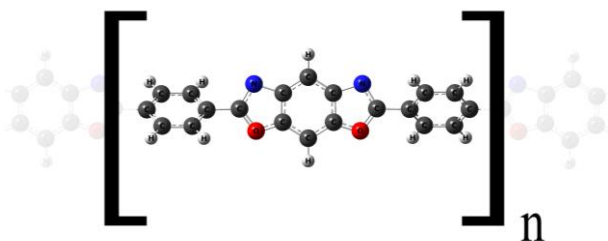


Figura 24. Estructura del poliparafenileno benzobisoxazol. Entre corchetes se resalta su monómero

El Zylon®, fibra de **poliparafenileno benzobisoxazol (PBO)**, es comercializado por la empresa japonesa Toyobo™. Entre sus notables características podemos mencionar que la fibra de PBO es casi el doble de resistente que la de p-aramida. Esto significa que un filamento de PBO puede cargar casi el doble del peso que basta para romper a otro, de dimensiones idénticas, que está hecho con p-aramida. Además, la fibra de PBO puede soportar sin descomponerse temperaturas de hasta 650 °C. Esto es más de 100 °C de temperatura por encima de lo que se puede alcanzar con la p-aramida. Todavía más sorprendente es el hecho de que, para que la fibra de PBO arda, se necesita aire con más de 68% de oxígeno, algo que no se encuentra en la superficie terrestre. Así, el PBO marca nuevos límites en cuanto a materiales resistentes a las altas temperaturas, fuertes y ligeros (con densidad casi idéntica a la fibra de p-aramida).

Prácticamente la fibra de PBO se puede emplear en los mismos campos en las cuales se ha usado la p-aramida; enfocándose en temas de seguridad, donde la resistencia del material

resulta crítica para salvar vidas. Por poner un ejemplo del mundo automovilístico: siempre ha resultado peligroso que una rueda se desprenda de un automóvil de competencia a alta velocidad. Las ruedas pueden salir despedidas, siendo muy peligrosas para los oficiales de pista, pilotos e incluso público en general. Para prevenir esto, las ruedas se “amarran” al cuerpo del automóvil mediante cuerdas hechas con fibras de PBO. Así, aunque el auto quede destrozado, se pretende que sus ruedas permanezcan unidas a los restos del vehículo.

Un suceso reciente que demostró lo útil de la fibra de PBO se presentó durante el Gran Premio de Australia 2016, cuando el piloto de McLaren, Fernando Alonso, intentó un rebase a más de 300km/h. Sin conseguirlo, el bicampeón mundial tocó en la parte trasera al HASS VF-16 del mexicano Esteban Gutiérrez. Instantes después, el McLaren MP4-31 de Alonso se proyectó contra el muro de contención, para después dar dos giros en el aire, hasta caer lejos de la pista. Aunque impactante a la vista, las cuerdas de fibra de PBO mantuvieron las ruedas “ancladas” al automóvil en todo momento. Además, a pesar de que muchos fragmentos salieron despedidos a alta velocidad por la colisión inicial, estos proyectiles no penetraron el habitáculo del piloto, el cual estaba hecho con materiales compuestos que incluían a la fibra de PBO. Así, en este accidente, todas las medidas de seguridad funcionaron a la perfección y Alonso pudo salir ileso de los restos del auto.

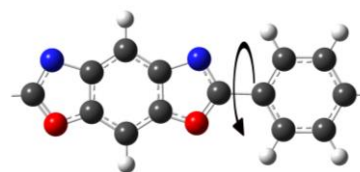


Figura 25. Fragmento de una cadena de PBO. La flecha indica el eje en torno al cual se pueden girar los anillos de carbono

La casi mágica fibra de PBO se obtiene mediante un proceso similar al empleado en la p-aramida, donde a partir de un cristal líquido se hace pasar una hilera para obtener los filamentos amarillo-dorados de PBO. Las fibras obtenidas se pueden emplear en estado “puro” y junto con resinas o adhesivos en *materiales compuestos* (

Figura 15).

Un requerimiento

especial para su uso es que debe ser protegida de la luz solar,

ya que es muy sensible a la radiación ultravioleta y se degrada con facilidad al exponerla al Sol (Toyobo Co., LTD., s/f).

Internamente, las cadenas del PBO tienen la apariencia de “barras ovaladas”, esto se debe a que sus anillos pueden estar rotados en torno al eje del polímero (**Figura 25**). De todas formas, esas “barras” se encuentran bien arregladas entre sí, en una estructura cristalina (Hu et al., 2003) (**Figura 26**). Por todo lo anterior, el nombre que les damos a este tipo de compuestos es el de “polímeros de barra rígida” (Chae & Kumar, 2006).

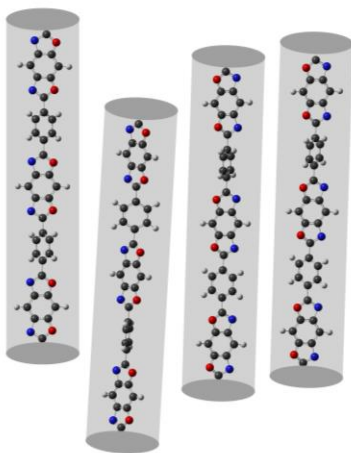


Figura 26. Arreglo de “barras rígidas” de PBO

Por otro lado, si los enlaces por puentes de hidrógeno que le dan su fortaleza a la p-aramida ya eran un concepto difícil de explicar, las fuerzas involucradas en la unión de las cadenas de PBO pueden ser todavía más complicadas, pero otra analogía en términos amorosos podrá servirnos para entenderlas... aunque sea un poco. Esas “uniones” se dan de forma instantánea, se pierden fácilmente con la distancia, pero pueden ser lo suficientemente fuertes como para unir diferentes átomos, tal como en esos amores a primera vista. A estas interacciones “débiles” las conocemos como fuerzas de van der Waals (Welsh, Bhaumik, Jaffe, & Mark, 1984).

Aunque podríamos seguir “hablando” de las maravillosas propiedades de la fibra de PBO o la ciencia que se encuentra detrás, la razón por la cual se hizo obligatorio su uso en los cascos de la Formula 1™ también fue muy relevante para el automovilismo en general. El 25 de julio de 2009, durante la sesión de calificación del Gran Premio de Hungría, el brasileño Felipe Massa fue golpeado en la cabeza por un amortiguador

que se desprendió del Brawn BGP 001 del piloto Rubens Barrichello (BBC-UK, 2009). El resorte, de unos 700 gramos, golpeó y penetró el casco de Massa cuando este iba a más de 260 km/h (BBC-UK, 2009). Aunque el piloto salvó la vida gracias a su casco, las graves fracturas en su cráneo dejaron de manifiesto que se requería de una mayor protección. Aunque ya desde 2007 se había usado este material como refuerzo en las cabinas de los autos de la máxima categoría (Formula 1 (R), s/f). A partir de 2011, una banda de fibra de PBO, como refuerzo en las viseras de los cascos, se hizo obligatoria a raíz del accidente de Felipe Massa.

Por último, ¿qué otros materiales se emplearán en los autos de competencia del futuro? Tal vez nadie lo sabe con certeza, lo que sí conocemos son las necesidades que estos deberán cubrir y las condiciones extremas a las que se verán sometidos. Así, mientras la ciencia y la tecnología avancen, el automovilismo no detendrá su paso hacia velocidades más altas, al mismo tiempo que se busca darle la mayor protección a los pilotos en competencia.

Referencias

- BBC-UK. (1976, agosto 1). 1976: Lauda fights for life after Grand Prix crash. Recuperado octubre 12, 2018, a partir de http://news.bbc.co.uk/onthisday/hi/dates/stories/august/1/newsid_2526000/2526869.stm
- BBC-UK. (2009, julio 26). F1 to investigate Massa accident. Recuperado octubre 22, 2018, a partir de http://news.bbc.co.uk/sport2/hi/motorsport/formula_one/8169206.stm
- Chae, H. G., & Kumar, S. (2006). Rigid-rod polymeric fibers. *Journal of Applied Polymer Science*, 100(1), 791–802.
- DuPont. (1992). *Kevlar Aramid Fiber: Technical Guide*. Dupont. Recuperado a partir de <https://books.google.com.mx/books?id=fPpGAAAAYAAJ>
- DuPont. (s/f). Nomex® characteristics. Recuperado octubre 12, 2018, a partir de http://www2.dupont.com/ReliatranV3/en_RU/products/Nomex/More/Nomex_features.html

Ferrari F1. (s/f). Niki Lauda's horrifying accident at the Nürburgring | Scuderia Ferrari Official Site - History.

Recuperado octubre 12, 2018, a partir de <https://formula1.ferrari.com/en/happened-today-08-01/>

Figucia, F. (1980). *Energy Absorption of Kevlar (Trade Name) Fabrics under Ballistic Impact*. ARMY NATICK RESEARCH AND DEVELOPMENT CENTER MA.

Formula 1 (R). (s/f). Part One - carbon, Zylon & Nomex. *Formula 1® - The Official F1® Website*. Recuperado octubre 22, 2018, a partir de /en/championship/inside-f1/safety/did-you-know/Part_One_carbon_Zylon_Nomex.html

Formula 1(R). (s/f). Clothing. *Formula 1® - The Official F1® Website*. Recuperado octubre 12, 2018a, a partir de </en/championship/inside-f1/safety/helmets-hans-clothing/Clothing.html>

Formula 1(R). (s/f). Helmets. *Formula 1® - The Official F1® Website*. Recuperado octubre 12, 2018b, a partir de </en/championship/inside-f1/safety/helmets-hans-clothing/Helmets.html>

Hu, X.-D., Jenkins, S. E., Min, B. G., Polk, M. B., & Kumar, S. (2003). Rigid-Rod Polymers: Synthesis, Processing, Simulation, Structure, and Properties. *Macromolecular Materials and Engineering*, 288(11), 823–843.

MatWeb, LLC. (s/f). Aluminum 2014-T6; 2014-T651. Recuperado octubre 8, 2018, a partir de <http://www.matweb.com/search/DataSheet.aspx?MatGUID=e5de9f1161d34f71a34ae016723d097f>

McLaren Automotive Limited. (s/f). McLaren Formula 1 - Heritage - MP4/1. Recuperado octubre 8, 2018, a partir de <https://www.mclaren.com/formula1/heritage/cars/1981-formula-1-mclaren-mp4-1/>

Robson, G. (2015). *Grand Prix Ford: Ford, Cosworth and the DFV*. Veloce Publishing. Recuperado a partir de <https://books.google.com.mx/books?id=-y-FCgAAQBAJ>

Science History Institute. (2016, junio 1). Stephanie L. Kwolek. *Science History Institute*. Recuperado octubre 23, 2018, a

partir de <https://www.sciencehistory.org/historical-profile/stephanie-l-kwolek>

Tomlin, D. W., Fratini, A. V., Hunsaker, M., & Wade Adams, W. (2000). The role of hydrogen bonding in rigid-rod polymers: the crystal structure of a polybenzobisimidazole model compound. *Polymer*, 41(25), 9003–9010.

Toray Composite Materials America, Inc. (s/f). Types of Carbon Fiber. Recuperado octubre 8, 2018, a partir de <https://www.toraycma.com/page.php?id=661>

Toyobo Co., LTD. (s/f). Properties | ZYLON is a new high-performance fiber developed by TOYOBO | 【TOYOBO】東洋紡. Recuperado octubre 24, 2018, a partir de http://www.toyobo-global.com/seihin/kc/pbo/zylon_bussei.html

Utracki, L. A. (2010). Rigid ballistic composites (Review of literature). Recuperado octubre 9, 2018, a partir de <http://nparc.cisti-icist.nrc-cnrc.gc.ca/eng/view/object/?id=694f50f6-38bf-4740-9f49-45c2b2f6a1b8>

Welsh, W. J., Bhaumik, D., Jaffe, H. H., & Mark, J. E. (1984). Theoretical investigations on some rigid-rod polymers used as high-performance materials. *Polymer Engineering and Science*, 24(3), 218–225.

Wilfred, S. (1966, noviembre 22). Poly-meta-phenylene isophthalamides. Recuperado octubre 12, 2018, a partir de <https://patents.google.com/patent/US3287324/en>



Fotografía artística

**Carlos Ignacio
Mendoza Ruiz**

Instituto de Investigaciones
en Materiales,
Universidad Nacional
Autónoma de México,
Ciudad Universitaria, CP
70360, Coyoacán 04510,
México, CDMX

cmendoza@iim.unam.mx

El doctor Carlos Ignacio Mendoza Ruiz es Investigador Titular B del Instituto de Investigaciones en Materiales de la UNAM. Sus líneas de investigación principales consisten en el estudio teórico del autoensamblado, las propiedades ópticas, reológicas y estructurales de la Materia Blanda y la física de los virus.

Cuando no se encuentra trabajando, le gusta realizar otras actividades como viajar y tomar fotografías. Le invitamos, apreciable persona lectora, a conocer más de su trabajo y a ver sus fotografías en Instagram: [carlosi.mendoza](https://www.instagram.com/carlosi.mendoza)

Este número 30 de Materiales Avanzados se engalana con sus fotografías, mismas que puede encontrar en portada, contraportada, última de guardas y en las páginas: 7, 14, 15, 19, 37, 43, 85, 94, 95 y 96.





Material de apoyo a la docencia

Crucigrama

Vertical

- 1.-Proceso en el cual se libera energía y un electrón pasa de un nivel de mayor a uno de menor energía.
- 3.-Aumenta de izquierda a derecha y disminuye de arriba hacia abajo (propiedad periódica de los elementos químicos).
- 4.-Unidad de energía que se absorbe o emite en un proceso.
- 6.-Fuerzas de interacción entre especies que dan lugar a diferentes moléculas.
- 8.-Cuando un electrón se encuentra en un nivel de energía superior al de su estado más estable se dice que está...
- 10.-Unidad fundamental neutra y estable de la materia constituida por un denso núcleo de carga positiva.
- 11.-Medida de la distribución de la densidad electrónica en un enlace.

Horizontal

2.-Capacidad de un cuerpo para realizar un trabajo.

5.-Fuerzas de interacción entre especies que dan lugar a diferentes estados de agregación.

7.-Función de onda monoelectrónica.

9.-Al estado de energía más estable de un átomo se le conoce como...

12.-Disminuye de izquierda a derecha y aumenta de arriba abajo.

13.-Ley da Lavoisier.

