

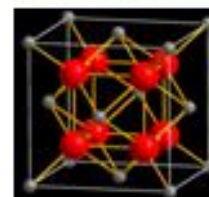
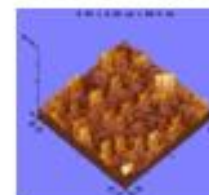
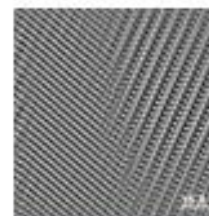
# 7º Congreso Nacional de Cristalografía

Villahermosa Tabasco, México , 4-8 de mayo 2014  
Centro Internacional de Vinculación y Enseñanza  
Universidad Juárez Autónoma de Tabasco



Sociedad Mexicana  
de Cristalografía A.C.  
**SMCr**

## Libro de Resúmenes



UNIVERSIDAD JUÁREZ  
AUTÓNOMA DE TABASCO

*"Estudio en la duda, acción en la fe"*

2014

International year of  
crystallography

## Contenido

	Pág.
Presentación	3
Organizadores y Delegaciones Regionales	4
Cursos y talleres	5
Conferencias Plenarias	6
Conferencias Invitadas	7
Patrocinadores	8
Conferencias Plenarias	10
Conferencias Invitadas	18
Presentaciones Orales	35
Presentaciones en Cartel Sesión I	43
Presentaciones en Cartel Sesión II	71
Presentación en Cartel Sesión III	94
Índice General de Participantes	119

## PRESENTACIÓN

Estimado(a)s Colegas:

La mesa directiva de la Sociedad Mexicana de Cristalografía A.C. (SMCr) y el Comité Organizador Local del evento, les damos la más cordial bienvenida al **7º Congreso Nacional de Cristalografía**, cuya sede en esta ocasión es el Centro Internacional de Vinculación y Enseñanza de la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco (UJAT), ubicado en la paradisiaca ciudad de Villahermosa Tabasco, y cuyas condiciones climatológicas durante la semana del congreso se estiman en 22°C como mínimo y 35°C como máxima. El hotel sede será el Hotel Viva Villahermosa.

Estamos seguros que este evento será un punto de encuentro y colaboración entre los investigadores y estudiantes interesados en la cristalografía. Al igual que en anteriores ediciones se contará con la presencia de reconocidos investigadores a nivel internacional en el desarrollo y uso de la cristalografía, quiénes nos impartirán pláticas plenarias e invitadas, deseamos que la comunicación con ellos fructifique en nuevos conocimientos y posibles colaboraciones.

A todos los patrocinadores del congreso, nuestro más sincero agradecimiento, es especial a las casas comerciales relacionadas con equipos y accesorios para análisis cristalográficos, quiénes siempre han apoyado a la SMCr, mostrando los avances tecnológicos de las firmas que representan.

Esperamos que este congreso sea un éxito científico y una ocasión para mostrar la importancia del uso de la cristalografía en el ámbito científico y productivo, prueba de ellos es que el año 2014 fue declarado como el año internacional de la cristalografía.

Agradecemos en nombre de todos los que formamos parte de la SMCr, su valiosa asistencia y contribuciones al 7º Congreso Nacional y los exhortamos a que continúen apoyando las actividades que organiza nuestra sociedad.

Sociedad Mexicana de Cristalografía, A.C.

## **Comité Organizador General**

Dr. José Álvaro Chávez Carvayar Presidente (IIM-UNAM)  
Dr. José Gonzalo González Reyes Secretario General (IIM-UNAM)  
Dra. María Elena Villafuerte Castrejón Secretario Adjunto (IIM-UNAM)  
Dr. Jesús A. Arenas Alatorre Tesorero (IFUNAM)  
Dr. José Reyes Gasga Primer Vocal (IFUNAM)  
Dr. Gustavo Tavizón Alvarado Segundo Vocal (FQ-UNAM)  
Dr. Lauro Bucio Galindo Expresidente de la SMCr (IFUNAM)  
C. Gabriela García Reyes, Secretaria SMCr

## **Comité Organizador Local**

### **División Académica de Ciencias Básicas, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco**

Dr. Richard Falconi Calderón  
(Representante de la Delegación Regional Tabasco)  
Dr. Manuel Acosta Alejandro  
(Secretario General de la Delegación Regional Tabasco)  
Dr. Carlos Rogelio Beltrán Moha  
Dr. Durvel de la Cruz Romero  
Dr. Carlos Lobato García  
Dr. José Miguel Mora Fonz  
Dr. Tito A. Ocaña Zurita  
Dr. José Guadalupe Pacheco Sosa  
Dra. Hermicenda Pérez Vidal  
Dr. Luis Fernando Roa de la Fuente  
Dr. Cristino Ricardez Jiménez  
Dra. Nancy Romero Ceronio  
Dr. Gilberto Torres Torres

## **Delegaciones Regionales**

Baja California Dr. Gerardo Aguirre Hernández (IT Tijuana)  
Chihuahua Dr. Luis Fuentes Cobas (CIMAV)  
Guanajuato Dr. Luis Armando Díaz Torres (CIO)  
Hidalgo Dr. José Guadalupe Alvarado R. (CIQ, UA EH)  
Jalisco Dr. Jorge Campa Molina (CU La Ciénega, Ocotlán, Jalisco)  
Michoacán Dra. Ma. Eugenia Contreras García (IIM, UMSNH)  
Nuevo León Dra. Cecilia Rodríguez González (FCQ, UANL)  
Puebla Dra. Ma. Eugenia Mendoza Álvarez (IFUAP)  
Querétaro Dr. Eric Mauricio Rivera Muñoz (CFATAUNAM)  
San Luis Potosí Dr. Miguel Angel Vidal B. (IICO, UASLP)  
Sinaloa Dra. Irma Araceli Belío Reyes (FO, UAS)  
Sonora Dr. Ricardo Rodríguez Mijangos (CIFUS, UNISON)  
Tabasco Dr. Richard Falconi Calderón (UJAT)  
Yucatán Dra. Patricia Quintana Owen (CINVESTAV, IPN)

## **Cursos y Talleres**

### **Curso-práctico de identificación de minerales**

*Elizabeth Araux, FICyM, Universidad de Sonora, México*

### **Gemología**

*Juan Carlos Cruz Ocampo, Instituto de Geología, UNAM, México*

### **Microcopía Electrónica**

*Miguel Ávalos, IPICYT, México*

### **Cristaloquímica Supramolecular**

*Sylvain Bernès, FCQ, Universidad Autónoma de Nuevo León, México*

### **Refinamiento de estructuras mediante el método de Rietveld**

*Xim Bokhimi, Instituto de Física, UNAM, México*

### **Taller de cristalografía para jóvenes**

*Delegación Regional Tabasco*

### **La relación-estructura propiedades**

*Luis Fuentes CIMAV Chihuahua, México*

### **Microscopía Electrónica Analítica aplicada al estudio del patrimonio cultural**

*Jesús Arenas, Instituto de Física, UNAM, México*

## Conferencias Plenarias

**William L. Duax.** *Hauptman-Woodward Medical Research Institute, Buffalo NY, USA.*  
Essential function and ancient origin of Ribosomal Protein S9.

**Anthony R. West.** *University of Sheffield, U.K.*  
Oxygen in oxides: some unexpected phenomena.

**Simon Billinge.** *Columbia University and Brookhaven National Laboratory, USA.*  
Nanocrystallography: Crystallography for 21st century problems.

**Adela Rodríguez Romero.** *Instituto de Química, UNAM, México.*  
Una visión estructural del funcionamiento de las proteínas a través de la Cristalografía.

**Sylvain Bernès.** *Facultad de Ciencias Químicas, UANL, México.*  
Complejos orgánicos basados en TTF. ¿Dónde se encuentra la transición hacia la transferencia de carga?

**Emilio Morán.** *Universidad Complutense, Madrid, España.*  
Cromo (IV) en coordinación octaédrica. Estructura y propiedades de nuevos óxidos mixtos obtenidos en condiciones extremas.

**Miguel Delgado.** *Universidad de Los Andes, Venezuela.*  
Caracterización de la microestructura en materiales mediante técnicas de difracción de rayos X de muestras policristalinas.

## Conferencias Invitadas

**Gerardo Aguirre Hernández**, *Instituto Tecnológico de Tijuana, B.C., México.*

Naturaleza de las interacciones  $\pi - \pi$  en apilamiento cara-cara por difracción de rayos X de monocristal y resonancia magnética nuclear.

**Xim Bokhimi**, *Instituto de Física, UNAM, México.*

Fuentes de rayos X compactas más brillantes que los sincrotrones actuales.

**J.P. Gonzalez**, *PANalytical*

Bragg Brentano HD: fijando un nuevo estándar en calidad de datos de difracción de Rayos X en polvos y más...

**Luis Fuentes**, *CIMAV, México.*

Implementing graphic outputs for the material properties open database (MPOD).

**Raúl García**, *Universidad de Sonora, México.*

Antecedentes desde la perspectiva de la óptica de la Ley de Bragg.

**Amador González**, *Universidad Politécnica de Madrid, España.*

Seguimiento por DRX de los cambios estructurales del BNBT durante la polarización ferroeléctrica.

**Víctor M. Malpica Cruz**, *Instituto de Geología, UNAM, México.*

Los cristales de Naica en las actividades de la Sociedad Mexicana de Cristalografía.

**María Eugenia Mendoza Álvarez**, *Instituto de Física, BUAP, México.*

Dinámica de las paredes de dominios ferroicos.

**María Elena Montero**, *CIMAV Chihuahua, México.*

Origen de las impurezas en la superficie de los cristales de selenita en la Cueva de las Espadas de Naica.

**David Ríos**, *IPICYT, México.*

Precession electron diffraction as a tool for structural characterization.

**Abel Moreno**, *Instituto de Química, UNAM, México.*

Conventional and non-conventional methods of protein crystallization.

**José Luis Ruvalcaba**, *Instituto de Física, UNAM, México.*

Desarrollo de un espectrómetro para análisis simultáneo de Difracción y Fluorescencia de Rayos X para estudios arqueométricos *in situ*.

**José Gilberto Torres**, *DACB, UJAT, México.*

Caracterización de soportes, catalizadores y fotocatalizadores utilizando Difracción de Rayos X.

**Patrick Woo**, *Applications Scientist Hitachi High-Technologies Canada, Inc.*

Applications of EBSD using both broad and focus ion beam milling as sample preparation technique

## ***Apoyos Especiales***

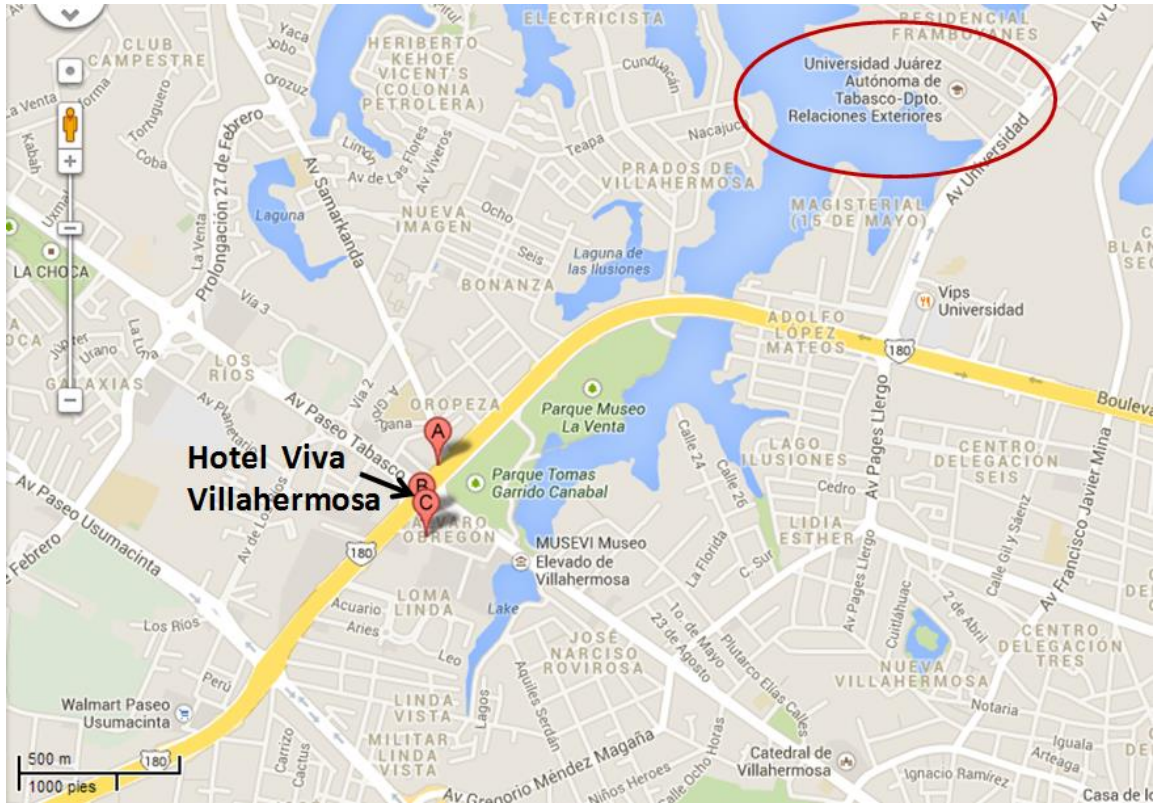
Centro de Investigación en Materiales Avanzados, S.C. Chihuahua  
Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología  
Escuela Superior de Física y Matemáticas del IPN  
Facultad de Química, UNAM  
Instituto de Física, UNAM  
Instituto de Química, UNAM  
Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM  
Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica A.C.

## ***Empresas Patrocinadoras***

Agilent  
Anton Paar S.A. DE C.V.  
Bruker Mexicana S.A. DE C.V.  
Diffractia  
FEI Company  
Hitachi High Technology  
JEOL de México S.A. DE C.V.  
MICRA Nanotecnología S.A. DE C.V.  
PANalytical  
Spectramex S.A. DE C.V.



### Croquis del Hotel Viva Villahermosa



Congreso Nacional de Cristalografía  
4 -9 Mayo 2014



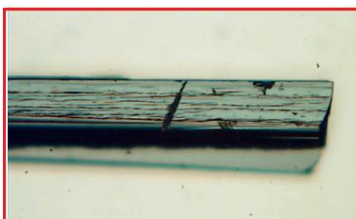
# **Conferencias Plenarias**

## Complejos orgánicos basados en TTF. ¿Dónde se encuentra la transición hacia la transferencia de carga?

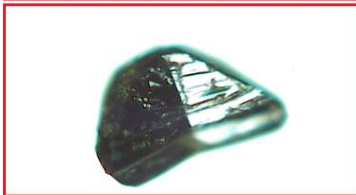
Sylvain Bernès

Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Nuevo León, Nuevo León, México

**Resumen:** Los complejos orgánicos donador-aceptor basados en el tetratiofulvaleno (TTF) como donador de electrones tienen ahora 40 años de historia, tomando como punto de partida una corta nota publicada en 1973 en el *J. Am. Chem. Soc.* por el grupo de Jérôme Perlstein, en Baltimore (US-MD). A pesar de esta larga historia, al interface entre la química del estado sólido y la química de los materiales, el campo sigue estudiándose activamente en la actualidad. Un ejemplo es el trabajo de la Dra. Amparo Salmerón Valverde (BUAP, 2008), enfocado al estudio de complejos entre el TTF y derivados de fluoreno. La caracterización cristalográfica (DRX) y por espectroscopia de vibración (IR & Raman) de estos materiales cristalinos ha permitido estimar la importancia de dos factores sobre el grado de transferencia de carga resultante en estos complejos: *i)* el polimorfismo latente, relacionado con la metaestabilidad de fases presentes en disolución; *ii)* el disolvente de cristalización, con su posible inclusión en la red cristalina.



Polimorfo  $\alpha$ , obtenido por Evaporación rápida



Polimorfo  $\beta$ , obtenido por Evaporación lenta

Estos parámetros, entre otros, parecen definir la transición entre sistemas de transferencia de carga nula y sistemas candidatos para ser metales orgánicos. Durante este trabajo, se ha sintetizado un compuesto mostrando una transferencia de carga nula, y su estructura cristalina muestra que no se trata de un complejo, sino más bien de un co-cristal. Del otro lado del espectro, se encuentran complejos con transferencia de carga total, considerados como sales iónicas, así como un complejo con una transferencia de carga,  $\delta \approx 0.4$ , cercana a la transferencia reportada para el complejo de referencia, TTF-TCNQ ( $\delta \approx 0.6$ ). Varios de estos complejos contienen disolvente de cristalización: acetona, acetonitrilo, clorobenceno, o agua. Estas moléculas, a pesar de tener momentos dipolares relativamente altos, no interactúan directamente con los donadores y aceptores en el cristal. Sin embargo, el disolvente modifica la estructura de apilamiento de estos componentes en el estado sólido, y tiene por lo tanto una influencia directa sobre la transferencia de carga resultante.

## Nanocrystallography: Crystallography for 21st century problems

Simon Billinge

Columbia University and Brookhaven National Laboratory, USA

**Abstract.** 2014 is the International Year of Crystallography, chosen to highlight, honor and celebrate 100 years of crystallography. So much of our modern technology, from health to the environment to electronics, was built on crystallographic discoveries, as reflected in the numerous crystallography-related Nobel prizes. Our 21st century problems of sustainable energy, environmentally friendly products that are made from earth abundant materials and affordable to people in all nations, and likewise accessible cures to a wide range of diseases, place extreme performance requirements on materials. Increasingly we are turning to the nanoscale to engineer materials at the atomic level in an attempt to increase performance. However, crystallography breaks down at the nanoscale. A nanoparticle is not an infinite, periodically repeating, object and is not susceptible to traditional crystallographic study. It is necessary to develop a new kind of crystallography, nanocrystallography, to meet this challenge. I will describe our efforts to study the structure of powders of nanomaterials using high intensity x-ray, neutron and electron sources and the use of Fourier filtering methods, the atomic pair distribution function (PDF) method, to get quantitative local structural information from nanomaterials. The approach is both straightforward and powerful and is having a significant impact on problems of great interest in emerging technologies. The next century of crystallography will have great discoveries associated with crystals, but I believe that of equal importance will be the development and impact of nanocrystallography

## Caracterización de la microestructura en materiales mediante técnicas de difracción de rayos X de muestras policristalinas

Miguel Delgado

Universidad de Los Andes, Facultad de Ciencias, Departamento de Química, LNDRX-Laboratorio de Cristalografía, Mérida 5101, Venezuela.

Autor a contactar: miguel@ula.ve

**Palabras clave:** Difracción de Muestras Policristalinas, Microestructura, Tamaño y Forma de los Dominios Cristalinos, Microtensiones, Defectos de Red. Nanomateriales.

**Resumen.** Durante más de cien años, la difracción de rayos-X ha mantenido una sólida posición dentro del conjunto de técnicas de que disponen los científicos del estado sólido para la caracterización de materiales de su interés. Para agregados policristalinos, además de los parámetros de la celda unidad (derivados de la posición de los máximos de difracción) y de la naturaleza y posiciones de los átomos dentro de dicha celda unidad (información extraída de las intensidades de los máximos), el registro experimental provee información sobre la denominada “microestructura”, contenida en el ancho y la forma de los máximos de difracción observados. Los parámetros que definen el perfil de los máximos de difracción suministran información sobre el tamaño y la forma de los dominios cristalinos, la distribución del tamaño de dichos dominios, las deformaciones de la red cristalina (“microtensiones”), los diversos defectos presentes en la estructura, entre otros aspectos.

En esta comunicación se presentará una discusión general sobre la caracterización de la microestructura en materiales cristalinos, un aspecto que afecta de manera importante las propiedades físicas y químicas de dichos materiales. Se revisarán las distintas metodologías desarrolladas para este fin, comenzando con el trabajo pionero de Scherrer [1]. Esta revisión incluye las contribuciones seminales de Williamson y Hall [2], de Warren y Averbach [3], entre otros, hasta llegar al “Modelado del Patrón de Polvo Completo” (Whole Powder Pattern Modelling), desarrollado por Scardi y Leoni en los últimos años [4]. La determinación del tamaño de los dominios cristalinos ha tomado una relevancia especial a raíz de la importancia de los nanomateriales. Al final de la exposición se demostrará la caracterización del tamaño y distribución de los dominios cristalinos con las facilidades incorporadas al Banco de Datos *PDF-4+* del *International Centre for Diffraction Data* (ICDD).

**Agradecimientos.** Se agradece el apoyo del FONACIT (Venezuela) a través del proyecto LAB-97000821.

### Referencias

1. Scherrer, P., *Göttingen Nachrichten*, 1918, **2**, 98.
2. Williamson, G.K. & Hall, W.H., *Acta Metall.*, 1953, **1**, 22-31.
3. Warren, B.E. & Averbach, B.L. Hall, W.H., *J. Appl. Phys.*, 1950, **21**, 595-600; *J. Appl. Phys.*, 1952, **23**, 497-512.
4. Scardi, P., Leoni, M. & Dong, Y.H. *Eur. Phys. J. B.*, 2000, **18**, 23-30; Scardi, P., 2008, in *Powder Diffraction. Theory and Practice*, edited by R.E. Dinnebier & S.J.L. Billinge (Cambridge, UK: RSC Publishing), pp. 376-413.

## Essential Function and Ancient Origin of Ribosomal Protein S9

William L. Duax<sup>\*</sup>, Sam Chen, Connor Huck, Nick Sass

Hauptman Woodward Institute, 700 Ellicott St. Buffalo NY 14203, USA

Autor to contact: duax@hwi.buffalo.edu

**Abstract.** We have discovered that ribosome function requires recognition between ribosomal protein S9 and the anticodon loop of the tRNA. The S9 sequences for all 11,266 species for which genomes have been published terminate in a fully conserved Arg. Although S9 is at the surface of the small subunit of the ribosome its C-terminus extends deep into the ribosome forming hydrogen bonds to the anticodon sequence of tRNAs. Hydrogen bonds link the C-terminal Arg of S9 with the tRNA in crystallographically determined structures in which the tRNA is in the entry (A) and polymerase (P) sites. Two ribosomal proteins of the large subunit (L28 and L35) have highly conserved residues that also form hydrogen bonds to nucleotides of the acceptor stem. The significance of this remarkable conservation of amino acid identity, its interaction with tRNA and critical role in ribosome function has previously escaped detection. A minimum universal fingerprint captures all S9s in which five residues have 100% conserved identity. Crystal structures of bacterial, plant, fungal, and mammalian ribosomes show that all S9s retain a common fold and residues critical to ribosome function. Examination of the DNA encoding S9s revealed an unexpected pattern in the 800 actinobacteria. The start code of over 45% of them is not ATG(M) but GTG(V) and 75% of those have no Met or Cys sequence in the coding frame. Of the actinobacteria, 647 have an antisense open reading frame (ORF) and 29 have three ORFS. With the exception of 66 mycobacterium none of the actinobacteria have a Met or Cys code in the full-length antisense strand. We have previously identified these amino acid and DNA sequence characteristics as hallmarks of ancient origin. These findings suggest a critical role for S9 in ribosomal function throughout evolution of all species and that the first ribosomes with Ribpro S9 arose before methionine or cysteine had been encoded in proteins.

## Cromo (IV) en coordinación octaédrica. Estructura y propiedades de nuevos óxidos mixtos obtenidos en condiciones extremas

E. Morán<sup>1\*</sup>, I. Pirrotta<sup>1</sup> y M. A. Alario-Franco<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Química Inorgánica. Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Complutense. 28040 Madrid. España

\*Autor a contactar: emoran@quim.ucm.es

**Palabras clave:** Óxidos mixtos, cromo (IV), alta presión, propiedades eléctricas y magnéticas.

**Resumen.** El número de óxidos conteniendo cromo (IV) es muy limitado debido, por un lado a la facilidad que tiene este catión para dismutarse en cromo(III) y cromo (VI), mucho más estables y, por otro, a la necesidad de utilizar condiciones de alta presión/ alta temperatura para su síntesis. Sin embargo, las propiedades fisicoquímicas que presentan muchos de los óxidos conteniendo cromo (IV) son de gran interés: el paradigma sería el dióxido  $\text{CrO}_2$ , a la vez metálico y ferromagnético a temperatura ambiente, propiedades que lo convierten en un material tecnológico de aplicación a gran escala (registro magnético) [1-2]; otros ejemplos de gran interés serían la holandita  $\text{K}_2\text{Cr}_8\text{O}_{16}$ , un material también ferromagnético y semimetálico [3] o las cromitas de calcio o estroncio  $\text{MCrO}_3$ , con estados electrónicos “anómalos”.

Teniendo en cuenta lo anterior, el objetivo de este trabajo ha sido preparar en “condiciones extremas” y estudiar la estructura y propiedades de diversas disoluciones sólidas de óxidos metálicos conteniendo cromo (IV) en coordinación octaédrica, a saber:

- (i)  $\text{Cr}_{1-x}\text{VO}_2$  ( $0 \leq x \leq 1$ ) con estructura tipo rutilo o relacionada;
- (ii)  $\text{Bi}_{1-x}\text{Pb}_x\text{CrO}_3$ , ( $0 \leq x \leq 1$ ) con estructura tipo perovskita y,
- (iii)  $\text{K}_{2-x}\text{Cr}_8\text{O}_{16}$  ( $0 \leq x \leq 0.8$ ), con estructura tipo holandita.

En el primero de los casos se han encontrado, dependiendo de la composición y de las condiciones de presión y temperatura utilizadas, diversas estructuras, desde el aristotipo rutilo a la tipo  $\text{CaCl}_2$  o la tipo  $\text{VO}_2$  monoclinica, esta última caracterizada por la ruptura de una banda metálica para dar lugar a pares metal-metal, con enlace covalente y electrones localizados. Como resultado de las transiciones estructurales tienen también lugar cambios notables en las propiedades magnéticas.

En el segundo de los casos, la valencia mixta del cromo ( $\text{Cr}^{3+}$  y  $\text{Cr}^{4+}$ ) junto con la distribución de bismuto y plomo al azar en las posiciones A, confieren a estos materiales propiedades magnéticas y eléctricas dignas de estudio, entre ellas la magnetorresistencia.

En el tercero y último de los casos, la extracción –por métodos de “química suave”, ya sea por vía química o electroquímica, de parte de los iones  $\text{K}^+$  desde los túneles característicos de la estructura holandita, también conlleva importantes cambios. Por un lado la aparición de valencia mixta ( $\text{Cr}^{3+}$  y  $\text{Cr}^{4+}$ ) produce cambios importantes en los parámetros cristalinos y, por otro se produce un aumento espectacular de la temperatura de Curie de la transición ferromagnética que llega a ser cercana a la temperatura ambiente (250K), 70 K por encima de la de la holandita estequiométrica original.

**Agradecimientos.** Los autores agradecen el apoyo económico de la Unión Europea (Proyecto SOPRANO, FP7-PEOPLE.2007-1-1-ITN), del Ministerio de Economía y Competitividad (Proyecto MAT2010-19460) y de la Comunidad Autónoma de Madrid (Proyecto MATERYENER, S2009-PPQ-1626)

### Referencias

1. Schwarz K. J. Phys. F. Met. Phys. 16 (1986), L211.
2. Ji. Y., Strijkers G. J., Yang. F. Y., Chien C. L., Byers, J. M., Anguelouch A. , Xiao G. and Gupta A., Phys. Rev. Lett., (2001), 5585.
3. Hasegawa K., Isobe M. Yamauchi T., Ueda H., Yahaura J. I., Gotou H., Yagi T., Sato H. and Ueda Y. Phys. Rev. Lett., 103 (2009), 146403.

## Una visión estructural del funcionamiento de las proteínas a través de la Cristalografía

Adela Rodríguez Romero

Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México

Autor a contactar: adela@unam.mx

**Palabras clave:** Cristalografía, alérgenos proteicos, glicohidrolasas, proteínas parásito, interacciones proteínas-ligando.

**Resumen.** La determinación de la estructura tridimensional de macromoléculas biológicas ha promovido una revolución en la comprensión de los procesos de la vida. Baste mencionar que el conocimiento de la estructura del ADN, obtenida por difracción de rayos X en los años cincuentas, permitió establecer el dogma central de la genética, generó la Biotecnología y ha originado aplicaciones inusitadas en nuestros días. Unos años después J.C. Kendrew y M. Perutz determinaron las primeras estructuras moleculares de proteínas como la mioglobina y la hemoglobina, aportando información no conocida en la época sobre los mecanismos de transporte de O<sub>2</sub>. Actualmente, los avances en la materia son enormes existiendo ahora fuentes muy intensas de radiación (sincrotrón), así como detectores, computadoras y programas de cómputo que permiten determinar cada día con mayor precisión y velocidad la estructura de macromoléculas cada vez más complejas, tales como canales iónicos, virus o ribosomas.

En nuestro país la primera estructura de una proteína la determinamos en el año de 1991 y a partir de esa fecha se llevaron acciones para consolidar esta disciplina. En 1997 se creó en el Instituto de Química de la UNAM el Laboratorio Universitario de Estructura de Proteínas, que tenía la misión de apoyar a todos los investigadores interesados en cristalografía. Usando como plataforma a ese laboratorio, recientemente se creó el Laboratorio Nacional de Estructura de Macromoléculas Biológicas, el cual cuenta con infraestructura moderna para impulsar esta disciplina en nuestro país.

Uno de los problemas que hemos abordado en el IQ-UNAM es el estudio de las proteínas alérgicas, esencialmente del látex del árbol del hule, *Hevea brasiliensis*. El conocimiento de la estructura tridimensional de éstas macromoléculas facilita la identificación e incrementa la posibilidad de modificar epítomos conformacionales o determinantes antigénicos que son importantes para el diseño de herramientas de diagnóstico y de agentes inmunoterapéuticos. También se han analizado aspectos estructurales novedosos relacionados con la actividad de glicohidrolasas de algunos de estos alérgenos. Por otra parte, hemos determinado las estructuras tridimensionales de varias proteínas de parásitos, tales como *Taenia solium*, las cuales se han considerado blancos terapéuticos. En esta plática se presentarán algunos de estos resultados.

**Agradecimientos.** Este trabajo ha sido financiado por la DGAPA-UNAM (proyecto IN207613) y el CONACYT (82947 y 166472). Agradecemos el apoyo de las M. en C. Georgina Espinosa Pérez y Carol S. Martínez Caballero del Laboratorio de Estructura de Proteínas-LANEM y al LANEM.

### Referencias

1. Rodríguez-Romero A., Hernández-Santoyo, A., Fuentes-Silva, D., Palomares, L.A, Samira Muñoz-Cruz S., Yépez-Mulia L., Orozco-Martínez, S. Structural analysis of the endogenous glycoallergen Hev b 2 (endo- $\beta$ -1,3-glucanase) from *Hevea brasiliensis* and its recognition by human basophils. Acta Crystallogr. Section D, 70, 329-341, 2014.
2. Hernández-Santoyo A, Landa A, González-Mondragón E, Pedraza-Escalona M, Parra-Unda R, Rodríguez-Romero A. Crystal structure of Cu/Zn superoxide dismutase from *Taenia solium* reveals metal-mediated self-assembly. FEBS J 278, 3308-3318, 2011.



## Oxygen in oxides: Some unexpected phenomena

Anthony R. West

University of Sheffield, Department of Materials Science and Engineering, United Kingdom

**Abstract.** This talk will challenge the presumption that oxygen in oxides is always present in the -II oxidation state. From the surface science literature, there are many examples of surface oxygen in intermediate oxidation states, such as -I in peroxides and -0.5 in superoxides, but there has been very little evidence of such species in bulk oxide materials, with the exception of certain alkali and alkaline earth oxide systems.

Results will be presented showing evidence, under certain conditions, for (i) superoxide  $O_2^-$  ions in doped barium titanate ceramics<sup>1</sup> and (ii)  $O^-$  ions in a range of acceptor-doped perovskites that are modest, p-type semiconductors<sup>2</sup>. Some unexpected consequences of the presence/creation of  $O^-$  ions are (i) materials whose resistance does not obey Ohm's law and (ii) novel, pseudo-resistive switching phenomena, in which reversible changes in sample resistance occur on application/removal of a small dc voltage. The key characteristic common to these phenomena is the facile ionisation of underbonded  $O^{2-}$  ions associated with the defect structure of acceptor-doped materials. An overview of the crystallography of the defect structures and doping mechanisms will be presented.

### References

1. P. Ren, N. Maso and ARW, Phys. Chem. Chem. Phys (2013) accepted
2. H. Beltran, M. Prades, N. Maso, E. Cordoncillo and ARW, J Amer. Ceram. Soc., 94 (2011) 2951

# **Conferencias Invitadas**

## Naturaleza de las interacciones $\pi$ - $\pi$ en apilamiento cara-cara por difracción de rayos X de monocristal y resonancia magnética nuclear

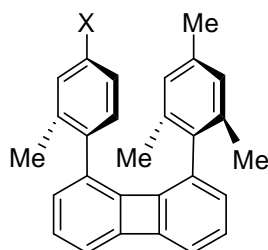
Gerardo Aguirre Hernández

Instituto tecnológico de Tijuana, Tijuana, Baja California, México

**Resumen.** En los últimos años se ha generado un especial interés en las interacciones  $\pi$ - $\pi$  en áreas como la biología molecular, química farmacéutica y supramolecular, ciencia de materiales, ingeniería de cristales, entre otras. También se ha reconocido que desempeñan un importante papel en diversos sistemas en la naturaleza como el ADN y proteínas, así como, en procesos de reconocimiento molecular y de fármacos.

Con el fin de comprender la naturaleza las interacciones  $\pi$ - $\pi$ , se han realizado estudios teóricos, así como, investigaciones experimentales en las que se han utilizado estructuras diseñadas sintéticamente que han servido como sistemas modelos; estos han demostrado ser de gran utilidad para obtener un conocimiento más profundo del papel que ejercen las interacciones  $\pi$ - $\pi$  en diversos sistemas químicos y biológicos.

En el presente proyecto se propuso un estudio experimental cuantitativo con compuestos modelos de tipo 1,8-diarilbifenilenos con variación de uno de los sustituyente al anillo aromático que sean capaces de proveer información de las fuerzas predominantes en las interacciones aromáticas con apilamiento cara cara, (ver figura 1)



a, X = OMe      d, X = CN  
 b, X = H        e, X = F  
 c, X = Cl        f, X = OH

Figura 1. Derivados de tipo 1,8-diarilbifenilenos sintetizados.

Se determinaron las estructuras por difracción de rayos X y se estudiaron las barreras de rotación de los anillos arílicos por dinámica molecular (RMN). Este modelo nos permitió entender las interacciones **polar/p** entre arenos a una distancia de vdW.

Se presentarán los resultados y las conclusiones de este proyecto.

### Referencias

1. Meyer, E. A.; Castellano, R. K.; Diederich, F. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2003**, *42*, 1210-1250.
2. Hobza P. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2008**, *10*, 2581-2583.
3. Cozzi, F.; Annunziata, R.; Benaglia, M.; Baldridge, K. K.; Aguirre, G.; Estrada, J.; Sritana-Anant, Y.; Siegel, J. S. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2008**, *10*, 2686-2694.

## Fuentes de rayos X compactas más brillantes que los sincrotrones actuales

X. Bokhimi

Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México  
Autor a contactar: bokhimi@fisica.unam.mx

**Palabras clave:** Rayos X, Laser, Aceleración, Electrones, Plasma

**Resumen.** Los rayos X producidos en sincrotrones han permitido realizar estudios de difracción de rayos X muy especiales, debido a la brillantez de estas fuentes, que están en el rango entre  $10^{14}$  y  $10^{22}$  fotones/s/mm<sup>2</sup>/mrad<sup>2</sup>/0.1% ancho de banda. Estos sistemas requieren instalaciones con dimensiones de algunos kilómetros para acelerar los electrones a velocidades relativistas y almacenarlos antes de emplearlos para generar los rayos X. Recientemente se ha demostrado que es posible acelerar electrones a velocidades relativistas en distancias de sólo algunos milímetros. Esto se logra haciendo incidir pulsos de rayos laser de potencias de algunas decenas de TW, de longitud de onda del orden 1  $\mu$ m y longitudes en el tiempo de algunos fs, sobre un gas diluido de He. Al inicio de la interacción, el pulso laser produce un plasma el cual oscila mientras el pulso lo atraviesa, generando una acumulación de electrones, atrás y junto al pulso, sujetos a gradientes de voltaje del orden de 1 TV/m, lo cual en distancias de algunos mm los lleva a energías de algunos GeV. Con ello, los electrones se producen en pulsos con dimensiones en el tiempo semejantes a los del pulso laser. Estos electrones pueden sufrir también una aceleración transversal a la trayectoria del láser, por lo cual emiten rayos X. En otras configuraciones los electrones se hacen pasar por un ondulator magnético o se hacen interactuar con otro pulso laser que se mueve en dirección contra a ellos (arreglos que son comunes en los sincrotrones actuales) para generar pulsos de rayos X de las mismas dimensiones en el tiempo que los pulsos laser que aceleraron a los electrones. Estas fuentes de rayos X son compactas y producen una brillantez igual o mayor que la de los sincrotrones actuales. La gran diferencia con los sincrotrones es que las dimensiones de estas fuentes de rayos X compactas están dadas por las dimensiones del láser que emite los pulsos. Por ejemplo, el láser que produce los pulsos más potentes en la actualidad, 1 PW, caben en un cuarto con dimensiones de 26 m<sup>2</sup>; el resto de los elementos de sistema para generar los rayos X ocupan un área similar. El método descrito en este trabajo para acelerar electrones es tan atractivo, que inclusive los constructores de las fuentes de rayos X basadas en láseres libres de electrones (XFEL, los llamados sincrotrones de la 4<sup>a</sup> generación), están pensando en cambiar sus sistemas de aceleración de electrones por este método. Las dimensiones y el costo del sistema compacto descrito en este trabajo para producir rayos X generará toda una revolución en la difracción de rayos X porque estará disponible en casi cualquier laboratorio estándar. Debe mencionarse también que como la dimensión en el tiempo de los pulsos de rayos X generado en estas fuentes compactas es de sólo algunos fs, será posible analizar no sólo la estructura cristalina de un sistema, sino también su dinámica. Estos pulsos son mucho más cortos que los generados en los sincrotrones actuales.

## **Combined Analysis as a general scheme of characterization by rays: structure, texture, stress state, nanocrystals, phase and more in a global approach**

D. Chateigner, L. Lutterotti, M. Morales, PH. Boullay

CRISMAT-ENSICAEN, IUT-Caen UCBN, Univ. Trento, CIMAP-ENSICAEN

**Abstract.** The 10-years old methodology called Combined Analysis using rays (x-rays, neutrons, electrons) has proved its efficiency in particular in the field of thin architectures characterization and real materials. Not only it avoids false minima in the refinements when e.g. texture or structure is the only targeted aspect, but it also allows to benefit from anisotropies in real samples rather than to suffer for them during characterizations.

We illustrate in this presentation:

- the quantitative determinations of texture, microstructure (anisotropic nanocrystal sizes and microstrains), structure, residual stresses, phases on complex examples of thin structured layers using x-ray diffraction,
- the actual developments of the methodology, noticeably concerning the use of TEM Debye-ring patterns
- some milestones about the future developments

## Implementing graphic outputs for the Material Properties Open Database (MPOD)

L. Fuentes<sup>1,\*</sup>, D. Chateigner<sup>2</sup>, G. Pepponi<sup>3</sup>, S. Gražulis<sup>4</sup>, A. Muñoz<sup>5</sup>, G. Ramírez<sup>6</sup>, I. Templeton<sup>1</sup>, J. Hernández<sup>1</sup>, M. López<sup>1</sup>, A. Márquez<sup>6</sup>, D. Sánchez<sup>7</sup>

<sup>1</sup> Centro de Investigación en Materiales Avanzados, S.C. Chihuahua, México

<sup>2</sup> IUT-Caen Université de Caen Basse-Normandie and CRISMAT-ENSICAEN, Caen, France

<sup>3</sup> MiNALab, CMM-irst, Fondazione Bruno Kessler, Trento, Italy

<sup>4</sup> Vilnius University Institute of Biotechnology, Vilnius, Lithuania

<sup>5</sup> Delphi Automotive Systems, Ciudad Juárez, Chihuahua, México

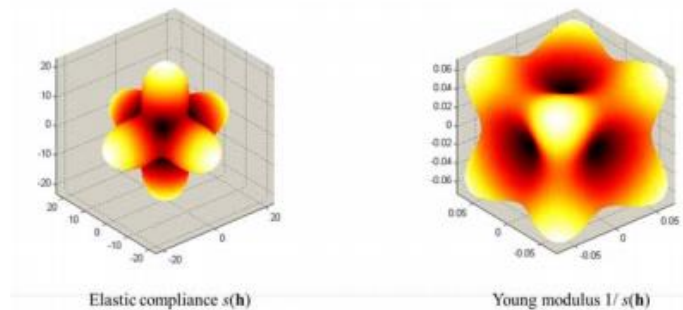
<sup>6</sup> Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de Chihuahua, Chihuahua, México

<sup>7</sup> Bituos Tools. Chihuahua, México.

\* Corresponding Author e-mail: luis.fuentes@cimav.edu.mx

**Keywords:** Crystal tensor properties, Geometric representation

**Abstract.** The tensor nature of single- and polycrystalline materials' physical properties highlights both the diversity of possible technological applications and the difficulties of assimilation for those new to the subject. The Material Properties Open Database (MPOD [1]) is a useful tool that provides access to a wide spectrum of properties tensors for an extensive selection of materials. In the present contribution an extension of the MPOD system is reported. The introduced innovation is the output, in the form of a graphical representation, of registered second, third and fourth rank tensors. The objective is to provide the crystallographic community a friendly means to help the intuitive understanding of crystalline anisotropy. The given graphical output is the so-called longitudinal surface representation [2]. The accompanying figure shows an example of the MPOD graphical output. Shown surfaces represent the compliance tensor and its inverse (Young's modulus) longitudinal surfaces for a silver single-crystal. MPOD's new version may be accessed by the original website <http://www.materialproperties.org/> and also by its Mexican mirror <http://mpod.cimav.edu.mx>. The MPOD websites continue under development. The international MPOD group systematically adds new published data. Modeling and representing textured polycrystals' properties is on target.



**Acknowledgements.** Support from Project CONACYT-CNPQ 174391 is recognized.

### References

1. Giancarlo Pepponi, Saulius Gražulis, Daniel Chateigner. MPOD: A Material Property Open Database linked to structural information. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 284, 10–14 (2012).
2. Robert E. Newnham. Properties of Materials. Oxford Univ. Press. NY (2012).

## Antecedentes desde la Perspectiva de la Óptica de la Ley de Bragg

Raúl García Llamas

Departamento de Investigación en Física de la Universidad de Sonora, Hermosillo, Sonora, México  
ragal@cifus.uson.mx

**Resumen.** En esta platica abordaremos muy brevemente, los antecedentes científicos de Bragg padre y Bragg hijo, antes de su Ley, concretamente su perfil de óptico. También estableceremos una analogía entre la ecuación de la rejilla y la ley de Bragg. Posteriormente puntualizaremos hechos importantes sobre el descubrimiento de la difracción de rayos X por Von Laue *et al.*, que llevaría a Bragg a meditar sobre los paralelismos entre sus conocimientos de óptica y este nuevo resultado experimental. Las consideraciones anteriores le llevarían a formular la Ley de Bragg en 1914 y cuya repercusión es tal que la UNESCO declara al 2014 como el Año Internacional de la Cristalografía. Además, analizaremos una analogía entre la propagación de electrones en cristales atómicos y ondas electromagnéticas en cristales fotónicos.

## Seguimiento por DRX de los cambios estructurales del BNBT durante la polarización ferroélectrica

Amador M. González<sup>1\*</sup>, M. Lorena Pardo<sup>2</sup> y Luis E. Fuentes<sup>3</sup>

<sup>1</sup>CEMDATIC, ETSIS Telecomunicación, Campus Sur UPM, Ctra. de Valencia, km 7, 28031-Madrid, España.

<sup>2</sup> Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid. (ICMM-CSIC). Cantoblanco. 28049-Madrid, España.

<sup>3</sup>Centro de Investigación en Materiales Avanzados. 31109 Chihuahua. Chih. México

\* Autor a contactar; e-mail: amador.m.gonzalez@upm.es

**Palabras clave:** cerámicas ferroélectricas, BNBT, cristalografía, transición de fase.

**Resumen:** En este trabajo estudiamos el comportamiento estructural de las cerámicas de  $(\text{Bi}_{0.5} \text{Na}_{0.5})_{1-x} \text{Ba}_x \text{TiO}_3$  durante el proceso de polarización. Las medidas se han realizado estudiando la estructura por medio de difracción de rayos X, en condiciones de campo aplicado, para valores superiores al del campo coercitivo de la fase ferroélectrica. En estos materiales no sólo observa una variación en los parámetros de red de la estructura cristalina con la aplicación de campo sino que el propio campo induce una transición de fase y la aparición de regiones con estructura y propiedades diferentes.



## Los Cristales de Naica en las Actividades de la Sociedad Mexicana de Cristalografía

Víctor M. Malpica

División Mineralogía, Sociedad Mexicana de Cristalografía, México D.F., México

**Resumen.** La Sociedad Mexicana de Cristalografía realizó ocho excursiones para visitar los fabulosos macro cristales de selenita (una variedad de yeso), de 11.5 metros de largo por 1,20 de diámetro, que se encuentran en el distrito minero de Naica, Chihuahua, propiedad de la empresa Peñoles. Estas visitas se realizaron con el objetivo de que los miembros de la sociedad pudieran observar estos gigantescos cristales de yeso, únicos en el mundo por su tamaño.

Los cristales se encuentran en la Cueva de los Cristales, a 290 metros de profundidad, con una temperatura de entre 47° y 54° C y con humedad del 98%. De los comentarios que nos hacían los técnicos de la unidad minera y que corresponden a una de las hipótesis que se han desarrollado es que hace ~26 de años un flujo de magma ascendió desde el interior de la tierra hasta detenerse a unos tres kilómetros de la superficie. En su ascenso empujó y plegó las rocas sedimentarias –fundamentalmente calizas- formando la Sierra de Naica, impregnándola de fluidos de alta temperatura, ricos en minerales. Hoy día, los vestigios de ese magma ya muy apagado, son los responsables de la anomalía térmica que existe en el lugar.

Las cuevas se formaron junto a las grandes fallas y fracturas por donde circulaba agua meteórica, disolviendo las calizas, lo que generó cavidades kársticas de gran tamaño. Posteriormente, al estar inundadas con fluidos ricos en solutos, permitió el crecimiento de los grandes cristales.

Se platicaran algunas anécdotas de los diferentes grupos que han asistido.

## Dinámica de las paredes de dominios ferroicos

María Eugenia Mendoza Álvarez

Instituto de Física, BUAP

Autor a contactar: emendoza@ifuap.buap.mx

**Resumen.** Las propiedades ferroicas primarias: ferromagnetismo, ferroelectricidad, ferroelasticidad y ferrotoroidicidad tienen como rasgo común la formación de dominios asociada a la transición entre las fases prototipo y ferroica, las cuales tienen una relación grupo-subgrupo determinada. El estudio de la dinámica de las paredes de dominios es importante para entender por ejemplo, la formación de multidominios, la estabilidad de su microestructura y en general, el comportamiento físico del ferroico, puesto que las paredes de dominios son regiones de alta energía en las que el sistema almacena energía.

Se presentarán resultados del estudio de la dinámica de dominios en función de la temperatura de varios materiales ferroicos, que permiten determinar por ejemplo, la evolución de la microestructura de las paredes desde una estructura no fractal, esto es, ordenada y homogénea hacia una estructura multifractal o compleja [1,2]; o bien la existencia una memoria de la microestructura de dominios a alta temperatura; también es posible estimar el valor de la capacidad calorífica de la transición de fase a partir de evaluar la distribución de las paredes de dominios [2,3] y calcular la tensión asociada a las paredes [4].

### Referencias

1. R Moctezuma, M E Mendoza, J L Carrillo, *J. Magn.Magn. Mat.* **320**, 186 (2008).
2. R. Moctezuma, J L Carrillo, M E Mendoza, *Int. Ferroel.* **111**, 88 (2009).
3. J A Reyes, M E Mendoza, J L Carrillo, and Z G Ye, *Int. Ferroel.***126**, 166 (2011).
4. U Salazar, M E Mendoza, *IEEEExplore*, DOI: 10.1109/ISAF.2011.6013993 (2011).

## Origen de las impurezas en la superficie de los cristales de selenita en la Cueva de las Espadas de Naica

M.E. Montero-Cabrera<sup>1,\*</sup>, I. Castillo-Sandoval<sup>1</sup>, L.E. Fuentes-Cobas<sup>1</sup>, M.E. Fuentes-Montero<sup>2</sup>, H. E. Esparza-Ponce<sup>1</sup>, I.J. Carreño-Márquez<sup>1</sup>, M. Reyes-Cortés<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Centro de Investigación en Materiales Avanzados S.C., Chihuahua, México

<sup>2</sup> Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Chihuahua, Chihuahua, México

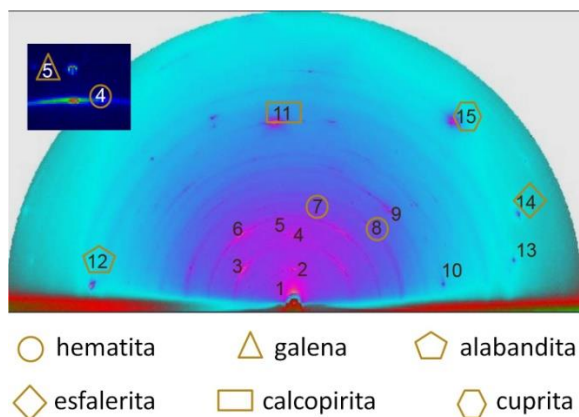
<sup>3</sup> Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de Chihuahua, Chihuahua, México

\* Autor a contactar: elena.montero@cimav.edu.mx.

**Palabras clave:** Naica, cristales de selenita, impurezas superficiales

**Resumen.** La Cueva de las Espadas fue descubierta en 1910 [1]. Su nombre alude a la apariencia de los cristales, de 1-2 m de largo, que la cueva poseía cuando fue descubierta. Actualmente los cristales muestran longitudes de 0.1-0.3 m como máximo. La superficie de los cristales es opaca y de color ocre. A más de 100 años de su descubrimiento, la cueva y sus cristales siguen asombrándonos y dándonos pistas sobre su formación [2]. La conservación de la Cueva de los Cristales Gigantes de Naica es la motivación de esta investigación. En total se analizaron 13 muestras mediante Microscopía confocal láser con microscopio de contraste de interferencia diferencial (LCM-DIM), Microscopía Electrónica de Barrido con Espectroscopia de Dispersión de Energía (SEM-EDS) y Microscopía Electrónica de Transmisión modo Barrido (STEM). Para el análisis elemental se utilizó Fluorescencia de Rayos X ( $\mu$ -SXRF) con Estructura Fina de la Absorción de Rayos X cercana al borde ( $\mu$ -XANES), y Espectroscopia Fotoelectrónica de Rayos X (XPS). Para identificar las fases presentes se utilizaron Difracción de Rayos X (XRD) en geometrías simétrica y de incidencia rasante (GI-XRD) y Micro Difracción de electrones en el Microscopio Electrónico de Transmisión (TEM). Las impurezas poseen una distribución heterogénea de los elementos presentes. El espesor de las impurezas va desde 120 nm hasta 150  $\mu$ m. Las fases identificadas fueron: yeso policristalino, hematita, esfalerita, calcopirita, cuprita, galena, alabandita, halita y fluorita y los amorfos constituidos por oxihidróxidos de plomo. Se formuló un modelo para el origen de las impurezas: La selenita detiene su crecimiento cuando la solución pasa a sub-saturada. A continuación la fase principal que se deposita es la hematita, que está disuelta o suspendida en la solución. La hematita sirve de matriz para la adsorción de otras fases cristalinas y amorfas. Se concluye que las impurezas en la superficie de los cristales no son producidas por el humano, sino que ellas son testigos de la formación de los cristales de selenita.

**Agradecimientos.** Stanford Synchrotron Radiation Lightsource, Harvard Museum of Natural History y Proyecto CONACYT CB-183706.



### Referencias

1. Foshag, W., 1927, American Mineralogist, **12**, 252.
2. Garcia-Ruiz, J. M., Villasuso, R., Ayora C. et al., 2007, Geology, **35**, 327.

## Conventional and non-Conventional Methods of Protein Crystallization

Abel Moreno

Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de Mexico, Mexico, D.F. 04510 México.

Autor a contactar: carcamo@unam.mx

**Abstract.** In this talk, it is presented an overview of crystal growth methods from conventional (classic) and non-conventional (using electric and magnetic fields) techniques for protein crystallization and crystal growth. In order to control the kinetics of the crystallization process, it will be also presented what physical and chemical parameters allow us to control the nucleation, and crystal growth of biological macromolecules. Finally, in the particular case of the use of electric and magnetic fields applied to protein crystallization for crystal quality enhancement, novel devices to grow protein crystals will be also presented. Finally the influence of these electric and magnetic fields on the 3D structure of proteins will be also shown.

**Acknowledgements:** the author (AM) thanks to CONACYT Project No. 175924.

## **Precession Electron Diffraction as a Tool for Structural Characterization**

David Rios Jara

Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A.C., IPICYT, Camino a la Presa San Jose 2055, Lomas 4a. seccion, 78216 San Luis Potosi, SLP, México.

Autor a contactar: david.rios@ipicyt.edu.mx

**Abstract.** It is well known that electron diffraction patterns in transmission electron microscopy cannot be used in general for the crystallographic characterization of crystals, because of the high dynamical diffraction effects and the inaccurate measurement of the integrated intensity of the diffraction spots. This is so even if the electron diffraction pattern contains all the required crystallographic information for a given material.

A new method has recently been developed to address this inconvenience: the precession electron diffraction mode. Indeed, by inclining and rotating the incident beam by few degrees (typically 3 to 5 degrees) around a zone axis, the dynamical effects are considerably reduced and the Ewald sphere cuts the diffraction spots in all its extend, giving an integrated value of its intensity distribution and allowing a more accurate measure of the real diffraction pattern. Further modeling by conventional methods and software led us to determine the crystallographic structure of a given material. An additional advantage is the possibility of working with small crystals (even nanometric) that becomes impossible with conventional X-ray techniques.

This equipment is actually installed at IPICYT in a FEI XL30, FEG TEM, and all potential users have access to this interesting and useful device.

## La relación entre Interfases cristalinas bidimensionales y el fenómeno de interferencia de dos ondas armónicas en una dimensión

David Romeu\*

Instituto de Física. UNAM. Apartado Postal 20-364. México D.F. 01000

\*Autor a contactar: romeu@fisica.unam.mx

**Palabras clave:** Interferencia, Interfases, Cristalografía de Interfases

**Resumen.** El propósito de este trabajo es mostrar que la interferencia entre dos ondas armónicas en una dimensión contiene toda la información necesaria para calcular el campo de esfuerzos de la interfase (bidimensional) entre dos redes cristalinas rotadas.

Usando patrones de Moiré a modo de ejemplo, se demostrará que la bien conocida expresión de interferencia entre dos ondas armónicas  $U_1(x)$  y  $U_2(x)$ , permite calcular la cristalografía básica, i.e. las posiciones de mínimo esfuerzo en la interfase entre dos redes cristalinas bidimensionales  $L_1(x,y)$ ,  $L_2(x,y)$  iguales pero rotadas por un ángulo que depende del cociente de frecuencias de  $U_1$  y  $U_2$ . Asumiendo que  $U_1$  y  $U_2$  tienen amplitud unitaria, se pueden escribir de forma sencilla como  $U_1(x) = \cos(2\pi f_1 x)$  y  $U_2(x) = \cos(2\pi f_2 x)$ , donde  $f_1$  y  $f_2$  son sus respectivas frecuencias espaciales. Como es bien conocido, la suma  $U_1 + U_2$  puede expresarse como el producto de otras dos ondas  $U_p(x)$  y  $U_m(x)$  respectivamente denominadas ondas promedio modulante, cuyas frecuencias están dadas por  $f_p = (f_1 + f_2)/2$  y  $f_m = (f_2 - f_1)/2$ .

Usando  $U_1(x)$  y  $U_2(x)$  para representar sendas redes unidimensionales con puntos localizados en sus respectivas crestas, entonces la superposición  $U_1 + U_2$  representa una interfase unidimensional. Es fácil ver que las zonas de mínimo esfuerzo en esta simple interfase (las zonas claras de su patrón de Moiré) se localizan en el conjunto de posiciones  $\{x_o\}$  donde  $U_1$  y  $U_2$  tienen la misma fase. El conjunto de puntos  $\{x_o\}$  forma una red conocida como O-lattice [1].

La observación que permite ligar el patrón unidimensional de esfuerzos  $\{x_o\}$  con el de una interfase bidimensional real (entre  $L_1$  y  $L_2$ ) consiste en notar que cuando el ángulo de rotación  $\theta$  es igual a

$2\pi \tan^{-1}(\sqrt{N}/\xi)$  donde  $\xi = f_2/f_1$  y  $N$  es un entero que depende de la simetría de  $L_1$  y  $L_2$  [2] (ver abajo), entonces las crestas de  $U_1(x)$  coinciden con la intersección de la familia de planos  $\{1,0\}$  de  $L_1$  y  $L_2$  mientras que las crestas de  $U_2(x)$  coinciden con la intersección de la otra familia de planos  $\{0,1\}$  a lo largo de una dirección  $\mathbf{i}$  dada. El punto importante es que en estas condiciones las crestas de  $U_p(x)$  y  $U_m(x)$  se coinciden con la intersección de las mismas familias de planos pero en otra dirección  $\mathbf{j}$  que forma un ángulo  $\alpha/2$  con  $\mathbf{i}$ , donde  $\alpha$  es la rotación de mayor simetría de  $L_1$  y  $L_2$ . Por ejemplo, si  $L_1$  y  $L_2$  tienen simetría hexagonal entonces  $N=3$  y  $\alpha=60^\circ$  mientras que si son redes cuadradas  $N=1$  y  $\alpha=90^\circ$ . Una vez que se tienen las O-lattices unidimensionales en las direcciones  $\mathbf{i}$  y  $\mathbf{j}$ , la O-lattice de la interfase bidimensional, y con ella la cristalografía básica (antes de relajar) de la interfase queda determinada. Cabe añadir que dado que la O-lattice es el conjunto de puntos en una interfase donde el campo de esfuerzos es cero, estos puntos permanecen invariantes al relajar la interfase aplicando un potencial.

### Referencias

1. Bollmann W., 1970, *Crystal Defects and Crystalline Interfaces*, Springer-Verlag, Berlin and New York.
2. Romeu D., 2003, Phys. Rev. B, **67**, 024202

## Desarrollo de un Espectrómetro para Análisis Simultáneo de Difracción y Fluorescencia de Rayos X para Estudios Arqueométricos *In Situ*

J.L. Ruvalcaba Sil\*, V. Aguilar Melo

Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.

\*Autor a contactar: sil@fisica.unam.mx

**Palabras clave:** Difracción, Fluorescencia, In situ, Pigmentos, Lítica.

**Resumen.** Los estudios arqueométricos in situ requieren el uso de diversas técnicas analíticas, así como el desarrollo e implementación de nuevas metodologías e instrumentación especializada [1,2]. En particular la identificación de materiales culturales puede ser compleja debido a la naturaleza del material, su heterogeneidad, sus técnicas de manufactura y su deterioro; así como a las limitaciones técnicas de cada equipo. En otros casos existe escasa información sobre el material, y hay lagunas en cuanto a materiales y espectros de referencia para las diversas espectroscopias. La difracción de rayos X (XRD) puede contribuir a afrontar esta problemática debido a que es una técnica muy sólida sustentada en extensas bases de información de los materiales cristalinos. Este es el caso de la lítica y pigmentos minerales. No obstante, la aplicación de XRD requiere en general la toma de muestras, o bien se limita a objetos pequeños para su análisis directo. Hoy día, existen algunos prototipos de equipos de rayos X portátiles para el estudio in situ de objetos y sólo un equipo comercial [3-6]. En este trabajo se presenta el desarrollo de un prototipo, resultado de la modificación de un equipo de difracción de rayos X Equinox X 100 de INEL, dotado de un detector de posición para realizar análisis in situ de minerales y pinturas [7]. Dicho sistema se puede configurar en dos geometrías para dos intervalos angulares  $2\theta$  ( $0-110^\circ$ ,  $25-135^\circ$ ) correspondientes al estudio de objetos de dimensiones menores a 20 cm y a pinturas murales y de caballete, sin perder además la capacidad de realizar el análisis convencional de polvos. En dicho sistema se implementó además un detector de rayos X Si-PIN Amptek para realizar mediciones de Fluorescencia de Rayos X [1] para el análisis simultáneo de XRD y XRF. En este trabajo se presentan los primeros resultados de su aplicación.

**Agradecimientos.** Esta investigación ha sido apoyada por los proyectos CONACYT 131944, PAPIIT UNAM IN403210 y ICyTDF PICCO10-57. Se agradece el apoyo técnico del Ing. Guillermo Picco Ruiz de Spectramex.

### Referencias

1. Ruvalcaba J.L., Ramírez D., Aguilar V., Picazo F., 2010, *X-ray Spectrometry* **39**, 338-345.
2. Ruvalcaba Sil J.L., Casanova González E., Pérez-Castellanos N.A., García Bucio M.A., 2013, *Journal of Raman Spectroscopy* **44**, 1711-1717.
3. Uda M., Ishizaki A, Satoh R., Okada K., Nakajima Y., Yamashita D., Ohashi K., Sakuraba Y., Shimono A., Kojima D., 2005, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* **239**, 77-84
4. Giaconelli A., Castaig J., Ortega L., Dooryhée E., Salomon J., Walter P., Hodeau J.L., P. Bordet, 2008, *X-Ray Spectrometry* **37**, 418 -423.
5. Nakai I., Abe Y. 2012, *Applied Physics A* **106** 279-293.
6. Sarrazin P., Chiari G., Gailhanou M. 2009, *A portable non-invasive XRD-XRF instrument for the study of art objects*, JCPDS-International Centre for Diffraction Data, 175 -186.
7. Aguilar Melo V., 2014, *Desarrollo y aplicación de difracción y fluorescencia de rayos X in situ para la caracterización de materiales*, Tesis de Maestría en Ciencia e Ingeniería de Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, México.

## **Caracterización de soportes, catalizadores y fotocatalizadores utilizando Difracción de Rayos X**

José Gilberto Torres Torres

Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, Tabasco, México

**Resumen.** Se presentan diversos estudios de soportes, catalizadores y fotocatalizadores utilizando la difracción de rayos X como una técnica de caracterización complementaria para explicar la actividad catalítica y fotocatalítica en reacciones de descontaminación de efluentes acuosos de contaminantes orgánicos como los oxigenados de gasolinas, pesticidas y fenol.

Se determina por DRX la proporción de las fases anatasa y rutilo en fotocatalizadores de  $\text{TiO}_2$  y su relación en la actividad fotocatalítica de pesticidas así como el efecto de la inserción de un dopante al  $\text{TiO}_2$  en la transformación de fase anatasa a rutilo. Asimismo se presenta el estudio de la determinación de los tamaños de cristal a partir de la ecuación de scherrer en catalizadores de  $\text{ZrO}_2$  y el efecto de la variación del tamaño de éste al agregarle  $\text{CeO}_2$  así como la interacción metal soporte en las reacciones de oxidación en fase líquida del Metil-Ter-Butil-Eter (MTBE).



## Electron Crystallography Study of PLZT Perovskite Oxides

R. Villaurrutia<sup>1</sup>, A. Pelaiz-Barranco<sup>2</sup>

<sup>1</sup>FEI Technology, Mexico,

<sup>2</sup>Facultad de Física-Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales Universidad de La Habana. San Lázaro y L, Vedado. La Habana 10400 (Cuba).

Presenting author's: rafael.arenas@fei.com

Keywords: High Resolution Electron Microscopy, Ferroelectrics, Incommensurate.

**Abstract.** Lead Zirconate titanate ceramics with a Zr:Ti ratio of 90:10 and doped with 3% La is at the edge between an antiferroelectric and ferroelectric composition and display an incommensurate antiferroelectric phase with a long period ordering along a perovskite [110] direction of the primitive cubic perovskite unit cell with a periodicity of 7-8 (110) spacings. The microstructure of this phase is dominated by domains, each having a single orientation of the long b-axis of the cell, and separated by boundaries which tend towards {101} planes of the primitive perovskite sublattice. The microstructure of this incommensurate phase was determined by conventional transmission electron microscopy, whilst the nano-structure of 2 stacking sequences formed in a 90 degrees domain boundary is determined using quantitative analysis of high-resolution transmission and scanning transmission electron microscopy images, with the lead atom positions located with an exceptional precision. This allows the estimation of local polarisation variations across the stacking units from the positions of the A-type ion (Pb ion), taking the B-type ions (Zr/Ti ions) of the perovskite as a reference assuming that their position in the unit cell is not influenced by the Pb shifts. This allows as well, the estimation of a near sinusoidal modulation of Pb- ion positions across both stacking sequences. The obtained data are compared to well known data of purely antiferroelectric, commensurate PbZrO<sub>3</sub> and they fit those data extremely well.

### References

1. E. Sawaguchi, H. Maniwa, and S. Hoshino, Phys. Rev. **83**, 1078 (1951).
2. F. Jona, G. Shirane, F. Mazzi, and R. Pepinsky, Physical Review **105**, 849 (1957).
3. Y. J. Chang, J.Y. Lian, and Y.L. Wang, Appl. Phys. A - Mater. **36**, 221 (1985).
4. X. H. Dai, Z. Xu, J.F. Li, and D. Viehland, J. Mater. Res. **11**, 626 (1996).
5. Z. Xu, X.H. Dai, and D. Viehland, Phys. Rev. B **51**, 6261 (1995).
6. Z. Xu, D. Viehland, P. Yang, and D.A. Payne, J. Appl. Phys. **74**, 3406 (1993).

## **Applications of EBSD using both broad and focus ion beam milling as sample preparation technique**

Patrick Woo

Applications Scientist Hitachi High-Technologies Canada, Inc.

Keywords: High Resolution Electron Microscopy, Ferroelectrics, Incommensurate.

**Abstract.** Lead Zirconate titanate ceramics with a Zr:Ti ratio of 90:10 and doped with 3% La is at the edge between an antiferroelEBSD is a common microscopy technique in the SEM for analyzing grain orientation and texture of polycrystalline materials. In order to perform EBSD analysis, vigorous sample preparation is required in order to remove any residual deformation that affect the quality of the Kikuchi diffraction pattern used for orientation indexing. Traditionally mechanical grinding and polishing is used in preparing samples for EBSD. In this presentation, the use of broad beam Ion milling (BBIM) and Focus ion beam (FIB) milling is used here in preparing samples for grain/channeling contrast imaging, and in particular EBSD analysis. Applications such as Phase ID of minerals, FIB micro-sampling and thinning into electron thin films for transmitted EBSD will also be discussed.

# Orales

## On The Quality Of Single Crystal X-ray Results

W. Fabiola Sanjuan Szklarz<sup>1</sup>, Sławomir Domagała<sup>1</sup>, Krzysztof Woźniak<sup>1</sup>.

<sup>1</sup> aChemistry Department, University of Warsaw, Pasteura 1, 02-093 Warszawa, Poland.

\* [fabian.sanjuan@chem.uw.edu.pl](mailto:fabian.sanjuan@chem.uw.edu.pl)

Keywords: accurate geometry; quality of X-ray results, routine vs. high resolution data

Abstract. Although everything seems to be already well known in the field of routine structural single crystal X-ray analysis, even commonly used approaches should be critically reevaluated. In this communication, a detailed comparison of single crystal X-ray and neutron structural results will be presented. It will be shown how structural parameters, such as bond lengths and valence angles, are dependent on the  $2\theta$  diffraction angle. Accuracy and precision of structural data will be discussed. The commonly accepted checkcif benchmark parameters will be questioned. Some practical suggestions will be presented how to estimate and improve the quality of single crystal X-ray diffraction structural results. It appears that one can optimise measurements of diffraction data to get structural results comparable to those obtained by using single crystal neutron diffraction. Also a comparison of geometrical parameters obtained from routine low resolution and charge density high resolution single crystal X-ray studies will be presented.

## Catalizadores nanoparticulados Ag-Au soportados en TiO<sub>2</sub>-CeO<sub>2</sub> para uso en la Desulfuración Oxidativa de compuestos azufrados: Un estudio con DFT

Carlos Fernando Murillo Córdova, Ignacio Cuauhtémoc López, José Miguel Mora Fonz \*\*

Universidad Juárez Autónoma de Tabasco. División Académica de Ciencias Básicas. Depto. de Físicoquímica Teórica

\*\* jmiguel.mora@ujat.mx

Palabras clave: Desulfuración Oxidativa, TiO<sub>2</sub>-CeO<sub>2</sub>, Modelamiento molecular, DFT

Resumen. En este trabajo, los catalizadores bimetálicos de Ag y Au soportados en TiO<sub>2</sub>-CeO<sub>2</sub>, se estudian con la Teoría de Funcionales de la Densidad (DFT), para demostrar su actividad catalítica en la Desulfuración Oxidativa (ODS) de compuestos azufrados, como el 4,6 Dimetildibenzotiofeno (4,6 DMDBT) que son refractarios al proceso de Hidrodesulfuración.

Se propone un modelo teórico para el mecanismo de reacción del sistema catalítico. Además se determinará la energía de adsorción y la geometría entre los metales Ag-Au y la superficie del soporte, considerando la fase cristalina anatasa del TiO<sub>2</sub>. Los efectos de la solvatación también son considerados ya que la reacción ocurre en solución y esto tiene un efecto en la energía de reacción. También se efectúan cálculos para determinar la energía y la forma de absorción de la molécula 4,6 DMDBT sobre el catalizador soportado.

Los cálculos se realizan utilizando el método B3LYP/6-31G (d) para la molécula orgánica, y el modelo COSMO para modelar la solución con el código NWchem (High Performance Computational Chemistry Software). El desarrollo de un modelo teórico de éste mecanismo, permitirá aportar información valiosa para mejorar el método de preparación experimental de catalizadores más activos en la ODS.

**Agradecimientos.** Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por el Programa Nacional de Posgrados de Calidad (PNPC) y a la División Académica de Ciencias Básicas de la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco (DACB-UJAT), por todos los recursos que ha facilitado para éste proyecto.

### Referencias

- [1] Thompson D. T. Bond, G. C. Catalysis Reviews-Science and Engineering, 41:319–388, 1999.
- [2] Fajula F. Bousquet J. Hulea, V. Journal of Catalysis, 198:179–186., 2001.
- [3] Michael J. Janik Xiaoliang Ma Chunshan Song Jiahua Guo, Shingo Watanabe. Catalysis Today, 149:218–223, 2010.
- [4] O. Viveros y E. Mireles R. Zanella, L. Cedeño-Caero. Revista Mexicana de Ingeniería Química, 6(2):147–156., 2007.

## Caracterización estructural y funcional de dos proteínas tipo quitinasa de *Hevea brasiliensis* de la familia 19 de glicosil-hidrolasas

Siseth Martínez-Caballero<sup>1</sup>, Patricia Cano-Sánchez<sup>1</sup>, Israel Mares-Mejía<sup>1</sup>, Martha L. Macías-Rubalcava<sup>1</sup>, Juan A. Hermoso<sup>2</sup> y Adela Rodríguez-Romero<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito Exterior, Ciudad Universitaria, México D. F. 0410, México

<sup>2</sup> Departamento de Cristalografía y Biología Estructural, Instituto de Química-Física "Rocasolano", CSIC, Serrano 11, 200, Madrid, España

\* Adela Rodríguez-Romero; e-mail: adela@unam.mx

Palabras clave: Proteínas tipo quitinasa, Cristalografía de proteínas, Proteínas de defensa, Actividad anti- fúngica, Interacción proteína-carbohidrato

### Resumen.

Las quitinasas y proteínas tipo quitinasa (PTQ) son macromoléculas importantes en los procesos de regulación y defensa desarrollados en plantas. Las quitinasas hidrolizan la quitina contenida en la pared celular de varios patógenos incluyendo hongos e insectos, mientras que las PTQ carecen de actividad enzimática debido a mutaciones en uno o más de los aminoácidos requeridos para la catálisis. En este estudio, se clonaron, expresaron y caracterizaron dos PTQs de *H. brasiliensis*, relacionadas a la familia 19 de glicosil hidrolasas (GH19). HbPTQ1 presentó una identidad de secuencia del 100% con Hev b 11.0101 reportada por O'Riordan y cols. en el 2002 (1). Interesantemente, se encontró una nueva isoforma (HbPTQ2), la cual está compuesta por un dominio de unión a quitina largo que no había sido descrito antes. Ambas proteínas carecen de actividad enzimática debido a una mutación en el residuo catalítico E117A y E147A, respectivamente; sin embargo, mostraron fuerte interacción con quitina y moderada afinidad por el trisacárido de quitina (GlcNAc)<sub>3</sub>; así como actividad anti-fúngica sobre *Alternaria alternata*. Las estructuras cristalográficas de los dominios individuales de HbQTP1 revelaron que esta proteína conserva el mismo plegamiento de las quitinasas activas relacionadas a la familia GH19; además experimentos de acoplamiento molecular, usando un hexasacárido de quitina (GlcNAc)<sub>6</sub>, sugieren la participación de algunos residuos altamente conservados involucrados en la unión del azúcar. La actividad quitinolítica fue re-establecida al mutar los residuos de A117E y A147E, respectivamente.

### Agradecimientos.

Proyectos DGAPA-UNAM (IN207613) y CONACyT (82947 y 166472) por el financiamiento

Q. F. B. Rocío Patiño-Maya y Q. Eréndida García-Ríos del Instituto de Química, UNAM por su asistencia técnica.

Campo experimental "El Palmar", Tezonapa, Ver. por el látex y hojas del árbol del hule *H. brasiliensis*

### Referencias

1. Riordain, G. O., Radauer, C., Adhami, F., Peterbauer, C. K., Blanco, C., Scheiner, O., Ebner, C., and Breiteneder, H. (2002) Cloning and molecular characterization of the *Hevea brasiliensis* allergen Hev b 11, a class I chitinase. *Clin Exp All.* 32, 455–462

## Identificación de fases cristalinas del clorhidrato de Metformina de patente y de bajo costo de marcas conocidas en México.

A. Torres<sup>1\*</sup>, I.A. Belío-Reyes<sup>2</sup>, L. Bucio<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Escuela Superior de Medicina IPN

<sup>2</sup>Facultad de Odontología UAS

<sup>3</sup>Instituto de Física UNAM

\* Autor a contactar; e-mail: Cd.americatorres@hotmail.com.

Palabras clave: DRX, clorhidrato de metformina, Espectroscopia Raman, FTIR

### Resumen.

La calidad de los productos farmacéuticos es un factor de suma importancia para asegurar el pronto restablecimiento de la salud humana, bienestar y calidad de vida. En México, como en otros países, se están buscando alternativas para disminuir la carga financiera de los costos de las enfermedades. Una alternativa ha sido la producción de medicamentos genéricos, que en teoría, deben poseer las mismas propiedades que el innovador. Los medicamentos genéricos deben ser intercambiables con los de patente y deben pasar las pruebas establecidas en la Norma Oficial Mexicana NOM-177-SSA1-1998 [1]. Sin embargo existe preocupación por parte de la Secretaría de Salud y de la población en general con relación al uso de los medicamentos genéricos comercializados y los que ofrece el sector salud, ya que hay evidencia empírica de que existen diferencias terapéuticas entre estos medicamentos y los medicamentos de marca, es decir, se considera que no cumplen con la cantidad especificada en el marbete y por lo tanto no ejercen su acción terapéutica en el tiempo requerido [2]. Es por esto importante identificar las fases cristalinas polimórficas del Clorhidrato de Metformina de patente y de bajo costo de marcas conocidas en México. La Metformina es un agente hipoglucemiante que mejora la tolerancia a la glucosa en pacientes con diabetes tipo 2, disminuyendo tanto la glucosa basal como la postprandial. Su mecanismo de acción es diferente al de otros agentes hipoglucemiantes orales. La Metformina disminuye la absorción intestinal y la producción hepática de glucosa, además mejora la sensibilidad a la insulina por incremento de la captación y utilización de la glucosa periférica [2]. En México la población aproximada de personas con diabetes asciende entre 6.5 y 10 millones de personas (prevalencia nacional de 10.7% en personas entre 20 y 69 años) según datos de la Federación Mexicana de Diabetes (FMD) [3].

El estudio incluyó Metformina de patente, genéricos intercambiables, similares y de primer nivel para establecer las diferencias en composición, propiedades físicas y químicas identificando las fases cristalinas de este fármaco. Para lo anterior, se estudió el API (principio activo puro) del clorhidrato de Metformina obtenida de la FEUM (Farmacopea de los Estados Unidos Mexicanos), así como 4 marcas conocidas en México de patente, GI, similar y primer nivel. La identificación de las fases cristalinas de este fármaco se realizó por las técnicas de difracción de rayos X, espectroscopia infrarroja y Raman. Se identificaron las fases cristalinas del API y de cada Metformina de marcas conocidas en México, así como sus excipientes.

**Agradecimientos.** Se agradece el apoyo de J. Ocotlán Flores, C. Zorrilla, al CCADET-LUCE, al Laboratorio de DRX del IFUNAM; Laboratorio de Espectroscopia Raman del IFUNAM.

### Referencias

1. Martínez T., Ma. Esther; Camacho M., Ivonne A.; Gracia V., Yolanda A.; Gracia V., Sandra L. Evaluación in-vitro e doce marcas de comprimidos de ciprofloxacino que se comercializan en el mercado mexicano. Revista Mexicana de ciencias Farmacéuticas, 41 (2010) 43-49.
2. Sandra Leticia Gracia Vásquez, María Aurora Hernández Benítez, Blanca Nájera Martínez\* Comparación de la calidad de tabletas de patente, genéricas y elaboradas para el sector salud para control de diabetes. Ciencia UANL, 7 (2004) 184-189.
3. Federación Mexicana de Diabetes, A.C. [www.fmdiabetes.org](http://www.fmdiabetes.org)

## Transformación estructural del succinato de cobre al deshidratarse

J. Balmaseda\*, J.R. Álvarez, J. Rodríguez, L.F. del Castillo, B. Torruco, P. Vera-Cruz

Departamento de Polímeros, Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, México, D.F. C.P. 04510.

\* Autor a contactar; e-mail: balmaseda@comunidad.unam.mx

Palabras clave: estructura cristalina, cobre, succinato, gases reticulares

Resumen. En algunos polímeros de coordinación ocurren transformaciones estructurales inducidas por fluidos. Los fluidos pueden ser los solventes utilizados en la síntesis o gases y vapores con los que se pongan en contacto los compuestos desolvatados. Tal comportamiento irregular abre el camino a nuevas aplicaciones en retención, separación y detección de fluidos.

El succinato de cobre con fórmula molecular  $\text{Cu}_2(\text{H}_2\text{O})_2(\text{C}_4\text{H}_4\text{O}_4)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  cristaliza en el grupo espacial  $PT$  con parámetros de celda:  $a = 6.4314(7)$ ,  $b = 7.6008(8)$ ,  $c = 8.0445(9)$  Å,  $\alpha = 76.149(2)$ ,  $\beta = 73.504(2)$ ,  $\gamma = 81.614(2)^\circ$ [1]. En el enrejado, unidades diatómicas de cobre se ensamblan a través de aniones succinato para formar polímeros de coordinación unidimensionales, los cuales se unen por puentes de hidrógeno para formar estructuras bidimensionales. En este trabajo se encontró que el proceso de deshidratación induce una transformación estructural reversible en la que el volumen de la celda se reduce un 27%. El grupo espacial de la estructura anhidra es  $PT$  con parámetros de celda:  $a = 5.1441(1)$ ,  $b = 6.6064(2)$ ,  $c = 8.3716(2)$  Å,  $\alpha = 73.269(2)$ ,  $\beta = 90.637(3)$ ,  $\gamma = 80.517(3)^\circ$ . Al desorberse las moléculas de agua coordinadas al cobre, los polímeros unidimensionales se reacomodan de manera que uno de los oxígenos de los carboxilatos del polímero vecino complete la esfera de coordinación del cobre (Figura 1). Estos cambios se reflejan en el cálculo de la función de distribución radial con la disminución de la distancia entre los átomos de cobre de las unidades diatómicas y la aparición de una nueva distancia entre átomos de cobre correspondientes a polímeros vecinos.

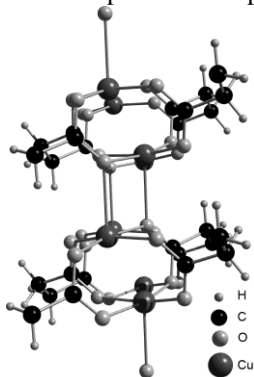


Figura 1. Parte de la estructura del succinato de cobre anhidro. Se muestran dos polímeros de coordinación unidimensionales con los cobres coordinados a oxígenos de los carboxilatos del polímero vecino.

La isoterma de adsorción de vapor de agua muestra un gran lazo de histéresis a consecuencia del efecto de apertura de compuerta asociado a la transformación estructural antes descrita. Se desarrolló una nueva isoterma de adsorción en base al modelo de gases reticulares en un ensemble osmótico que describe adecuadamente el comportamiento del sistema vapor de agua-succinato de cobre. En base a este modelo fue posible estimar las energías de interacción entre las moléculas de agua y las unidades diatómicas de cobre así como entre las moléculas de agua.

En este trabajo se reporta por primera vez la estructura cristalina del compuesto deshidratado y se determinan con precisión las condiciones en que ocurre el efecto de apertura de compuerta inducido por el agua, esencial para extender este análisis a otros fluidos y utilizar este compuesto como sensor de los mismos.

Agradecimientos. A CONACyT por la beca asignada 266051, a los proyectos CONACyT 154626 y CONACyT-CNPq 174247 por el financiamiento parcial. A la Q.F.B. Damaris Cabrero Palomino, el Q. Miguel Ángel Canseco Martínez y la M. en C. Adriana Tejeda Cruz por el soporte técnico.

## Referencias

- Ang, S.G., B.W. Sun, and S. Gao, *Inorganic Chemistry Communications*, 2004. 7(6): p. 795-798.



## Diversidad Estructural en Polímeros de Coordinación

P. Vera-Cruz, J. Rodríguez Hernández\*, B. Torruco, L.F. del Castillo, Rubén A. Toscano, J. Balmaseda

Departamento de Polímeros, Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, México, D.F. C.P. 04510.

\* Autor a contactar; e-mail: [joelis\\_r\\_h@yahoo.com](mailto:joelis_r_h@yahoo.com) ó [joelis.rh@gmail.com](mailto:joelis.rh@gmail.com)

Palabras clave: Resolución y refinamiento estructural, Análisis estructural, polímeros de coordinación

Resumen. Desde principios de los 1990s, el interés científico y tecnológico de los polímeros de coordinación se ha incrementado enormemente. Estos compuestos, formados a partir de la unión de cationes metálicos con ligantes orgánicos, presentan una amplia variedad de arquitecturas y topologías [1-3]; permitiendo aplicaciones en diversos campos de vanguardia [4]. Las unidades orgánicas e inorgánicas que componen a los polímeros de coordinación permiten un inmenso número de combinaciones, muchas de las cuales no han sido exploradas aún.

El estudio de estos compuestos, así como la búsqueda de nuevas estructuras tiene como beneficio el desarrollo de materiales con propiedades que podrían resultar esenciales para aplicaciones como catálisis, almacenamiento y separación de fluidos, y el desarrollo de dispositivos ópticos, electrónicos y magnéticos. Sin embargo, para el estudio de sus propiedades físicas y químicas y de sus posibles aplicaciones, es fundamental el conocimiento de su arreglo atómico.

En este trabajo se exploran y estudian a un nivel atómico los sólidos cristalinos formados a partir del ensamblaje de los ligantes orgánicos: succinato ( $C_4H_4O_4^{2-}$ ), adipato ( $C_6H_8O_4^{2-}$ ) y tartrato ( $C_4H_4O_6^{2-}$ ) y los metales de transición cobre, cinc y cadmio. Con la finalidad de entender el efecto de la variación del ligante y el metal conector en la formación de enrejados con distintas características estructurales.

Se resolvieron y refinaron por primera vez cuatro estructuras cristalinas:  $Cu(C_4H_4O_4)$ ,  $Zn_2(OH)_2(C_4H_4O_4)$ ,  $Cu_2(OH)_2(C_6H_8O_4)$ ,  $Zn(C_6H_8O_4)$ , a partir de su patrones de difracción de rayos X en polvos usando simulated annealing y métodos directos en la fase de determinación estructural y refinadas por el método de Rietveld. Además, se resolvieron y refinaron las estructuras cristalinas de los compuestos de fórmula molecular:  $Cd_3(H_2O)(C_4H_4O_6)_3 \cdot H_2O$ ,  $Cd_3(H_2O)_2(C_4H_4O_6)_3 \cdot 6.5H_2O$  y  $Cd_2(H_2O)(C_4H_4O_6)_2 \cdot 3H_2O$  a partir de datos de monocristales.

Estos resultados fueron complementados por espectroscopia en el infrarrojo, análisis térmico y picnometría. Todos los materiales objetos de estudio, presentaron características estructurales diferentes, jugando un papel importante tanto el ligante orgánico como el metal ensamblador.

**Agradecimientos.** A los proyectos CONACyT 154626 y CONACYT-CNPq 174247 por el financiamiento parcial. A la Q.F.B. Damaris Cabrero Palomino, el Q. Miguel Ángel Canseco Martínez, y la M. en C. Adriana Tejeda Cruz por el soporte técnico.

### Referencias

1. J. Lu, H.-T. Liu, D.-Q. Wang, M.-J. Niu and S.-N. Wang, *J. Chem. Crystallogr.*, 2011, 41, 641–648.
2. K. C. Kam, K. L. M. Young and A. K. Cheetham, *Cryst. Growth Des.*, 2007, 7, 1522-1532.
3. Y. Wang, G.-X. Liu, Y.-C. Chen, K.-B. Wang and S.-G. Meng, *Inorg. Chim. Acta*, 2010, 363, 2668-2672.
4. P. Anthony, C. Delaney, S. Varughese, L. Wang and S. M. Draper, *CrystEngComm*, 2011, 13, 6706

# **Carteles**

## **Sesión I**

## Dos métodos diferentes para encontrar parámetros dieléctricos en datos experimentales ITC

B. Misael Moreno C.<sup>1\*</sup>, Alain Pérez Rodríguez<sup>1</sup>, Raúl Pérez Salas<sup>1</sup>, T. M. Pitters<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Investigación en Física, Universidad de Sonora, Hermosillo Sonora, México, 83000.

Autor a contactar: [icaphermosillo@hotmail.com](mailto:icaphermosillo@hotmail.com)

**Palabras claves:** Polarización eléctrica, Parámetros dieléctricos, Métodos de Análisis.

**Resumen.** Es bien conocido que las curvas experimentales ITC dan información acerca de las propiedades dieléctricas de los halogenuros alcalinos, polímeros, películas delgadas, etc. Estas propiedades son conocidas por medio de dos parámetros, la energía de activación  $E$  y el tiempo de relajación característico  $\tau_0$ . Por lo tanto, es muy importante obtener los valores aproximados de estos parámetros. En este trabajo se evaluaron dos métodos para determinar dichos valores con el propósito de comparar las aproximaciones entre ellos. Fueron usadas cinco curvas ITC experimentales de  $\text{KCl:Eu}^{2+}$ ,  $\text{KCl:Sr}^{2+}$ ,  $\text{KBr:Eu}^{2+}$  (0.1%),  $\text{KBr:Eu}^{2+}$  (0.15%), and  $\text{KCl}_{50}\text{KBr}_{25}\text{RbCl}_{25}\text{:Eu}^{2+}$ . Las diferencias entre los resultados de los dos métodos son discutidos utilizando un tercer método que ajusta la curva total con los valores obtenidos por los dos métodos estudiados.

**Agradecimientos:** A la Universidad de Sonora, al Posgrado de Investigación en Física, al Laboratorio de Estado Sólido y a Conacyt.

### Referencias

1. C. Bucci and R. Fieschi, Phys. Rev. Lett., **12**, 16 (1964).
2. C. Bucci, R. Fieschi and G. Guidi, Physical Review, **148**, 816 (1966).
3. J. Hernández, H. Murrieta, F. Jaque and J. Rubio, Solid State Communications, **39**, 1061 (1981).

## Síntesis y caracterización de selenuro de estroncio (SrSe) mediante baño químico

A. H.A.Pineda-Leon<sup>1,2\*</sup>, B. R.Godoy-Rosas<sup>1,2</sup>, C. E.Fernández-Díaz<sup>1,3</sup>, D. M.A.Santana - Rojas<sup>1,3</sup>, E. T.Mendivil-Reynoso<sup>1,4</sup>, F. O.Arellano-Tanori<sup>3</sup>, R.Ochoa-Landín<sup>4</sup>, S.J. Castillo<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Investigación en Física, Universidad de Sonora, Apdo. Postal 5-088 CP 83000, Hermosillo, Sonora, México.

<sup>2</sup>Departamento de Matemáticas, Universidad de Sonora, CP 83000, Hermosillo, Sonora, México

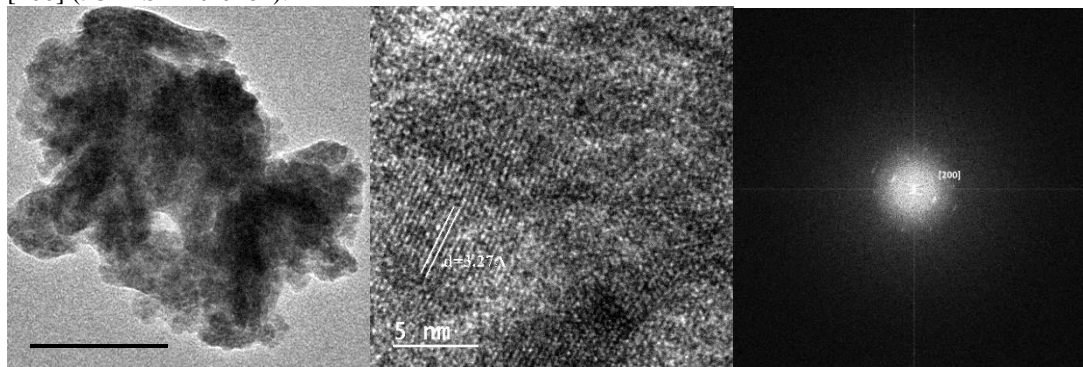
<sup>3</sup>Instituto Tecnológico de Hermosillo, Av. Tecnológico s/n Col. Sahuaro, CP 83170, Hermosillo, Sonora, México.

<sup>4</sup>Departamento de Física, Universidad de Sonora, Luis Donaldo Colosio y Rosales S/N CP 83000, Hermosillo, Sonora, México.. Autor a contactar: horanpile@hotmail.com

Palabras clave: Selenuro de Cobre, rongalita, semiconductores, bandgap, absorción óptica.

Resumen. SrSe se obtiene usando un método de reacción química por intercambio iónico, en el cual se usan precursores con estroncio y selenio. La caracterización de absorción óptica reportada en este trabajo, es similar a la obtenida en un modelo matemático previamente reportado, se encontró tanto el bandgap directo que fue de 2.9 eV y el bandgap indirecto que fue de 4.5eV.La espectroscopia FTIR que muestra esta investigación para el selenuro de estroncio, coincide con datos previamente reportados, lo que valida la obtención del SrSe, en el espectro de infrarrojo, aparecen las mismas bandas correspondientes en 3446 y 1600  $\text{cm}^{-1}$  para el selenuro metálico, y éstas corresponden a la vibración O-H y a una vibración de flexión H-O-H, respectivamente

Al utilizar la espectroscopia RAMAN para analizar SrSe, se identificaron las frecuencias que lo caracterizan, se observo el pico correspondiente a 192  $\text{cm}^{-1}$  que es del  $\text{SrSe}_2$ . Se realizó también estudios de TEM a la muestra de selenuro de estroncio con el propósito, de conocer su morfología , se observan arreglos no definidos, partículas aglomeradas obteniendo una sola distancia interplanar para este compuesto, lo cual se puede concluir que corresponde a un arreglo cúbico, la distancia interplanar de este compuesto es  $d = 3.27 \text{ \AA}$ , que corresponde al plano [200] (JCPDS # 10-0182).



**Agradecimientos.** O. Arellano-Tanori , Judith Celin Tanori,,Ramon Iniguez,, Roberto Mora,CONACYT ,UNISON, ITH.

### Referencias

1. Zhu, X., Zhang, H., Cheng, X. (2011). Theoretical study of the band gap of SrSe and SrTe in GW approximation. *Modern Physics Letters B*. 25 (23), 1905-1914.
2. Jenila, M., Rajasekaran, T. R., Charles, B. (2012). Growth and characterisation of pure and strontium added  $(\text{NH}_4)_3\text{Sb}_2\text{F}_9$  single crystals. *Archives of Applied Science Research*. 4(4), 1850-1856.
3. Greena, J., Karupphasamy, K., Antony, R., Shajan, X., Kumaresan, S. (2013). Effect of magnesium doping on the physicochemical properties of strontium formate dehydrate crystals. *Chem. Sci. Trans*. 2(1), 141-146.
4. Klopogge, J., Ruan, H., Duong, L., Frost, R. (2001). FT-IR and Raman microscopic study at 293 K and 77 K of Celestine  $\text{SrSO}_4$ , from the middle Triassic limestone (Muschelkalk) in Winterswijk. The Netherlands. *Netherlands Journal of Geosciences*. 80(2), 41-47.
5. Chen, J., Shen, W. Z. (2006). Raman study of phonon modes and disorder effects in  $\text{Pb}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Se}$  alloys grown by molecular beam epitaxy. *Journal of Applied Physics*. 99.

## **Luminiscencia de polvos de $\text{BaTiO}_3:\text{Eu}^{3+}@\text{SiO}_2$ en función de la estructura cristalina obtenidos por los métodos solvotermal/sol-gel.**

J. Reyes Miranda<sup>1,\*</sup>, F. de J. Carrillo Romo<sup>1</sup>, A. García Murillo<sup>1</sup>, A. de J. Morales Ramírez<sup>1</sup>, J. A. Torres Rodríguez<sup>1</sup>, M. Guadarrama Rendon<sup>1</sup>.

<sup>1</sup> Instituto Politécnico Nacional, CIITEC IPN, Cerrada CECATI S/N Col. Sta. Catarina, Del. Azcapotzalco, México D.F. 02250, México.

\* Autor a contactar: [joremi@live.com.mx](mailto:joremi@live.com.mx)

Palabras clave: vitrocerámicos, solvotermal, sol-gel, matriz vítrea, nanocristalino.

Resumen. En años recientes, el titanato de bario nanocristalino dopado con elementos lantánidos ha sido ampliamente investigado debido a sus propiedades ópticas interesantes, mismo que lo hace candidato prometedor en diferentes campos tecnológicos, tales como fósforos para pantallas de televisión, amplificadores ópticos y aplicaciones electrocerámicas. Recientemente hay un interés por producir materiales nanoestructurados tipo perovskita como el titanato de bario dopado con iones de tierras raras mediante rutas de química suave. La incorporación de una parte vítrea sobre el sistema cerámico ha mejorado las propiedades luminiscentes en matrices cristalinas similares como  $\text{Y}_2\text{O}_3:\text{Eu}^{3+}$ . En este contexto, la ruta solvotermal fue seleccionada para preparar polvos de  $\text{BaTiO}_3:\text{Eu}^{3+}$  mientras que el método sol-gel fue elegido para elaborar la matriz de  $\text{SiO}_2$ , ya que con estos dos métodos se obtiene alta pureza y homogeneidad en los materiales sintetizados. En este trabajo, para la síntesis de polvos cerámicos de  $\text{BaTiO}_3:\text{Eu}^{3+}$  los precursores fueron, cloruro de bario ( $\text{BaCl}_2$ , 99.9%, Aldrich), nitrato de europio penta hidratado ( $\text{Eu}(\text{NO}_3)_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ , 99.9% Aldrich), butóxido de titanio ( $\text{Ti}[\text{O}(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3]_4$ , 97%, Fluka), como solvente se usó metanol anhidro, ( $\text{CH}_4\text{O}$ , 99.8%, Sigma Aldrich) y potasio metálico (K, 98%, Aldrich). Para la preparación del sol vítreo de  $\text{SiO}_2$  los precursores fueron, tetraetil ortosilicato ( $\text{CH}_8\text{H}_2\text{OO}_4\text{Si}$ , 98%, Aldrich), alcohol etílico ( $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ , 99.9%, Fermont), ácido clorhídrico (HCl, Fermont) y agua destilada. Con el objeto de mejorar las propiedades luminiscentes de los polvos de  $\text{BaTiO}_3:\text{Eu}^{3+}$ , la síntesis de polvos vitrocerámicos  $\text{BaTiO}_3:\text{Eu}^{3+}@\text{SiO}_2$  fue propuesta en diferentes relaciones molares Ba:Si. Se llevaron a cabo análisis químicos, estructurales, morfológicos y ópticos de las partículas sintetizadas mediante espectroscopia de infrarrojo por transformada de Fourier (FT-IR), difracción de rayos X (DRX), microscopia electrónica de barrido (MEB), microscopia electrónica de alta resolución (MET-AR) y fotoluminiscencia (FL), para conocer el efecto del  $\text{SiO}_2$  sobre las propiedades luminiscentes de  $\text{BaTiO}_3:\text{Eu}^{3+}$ . De acuerdo a los análisis realizados por DRX se observó que la estructura cristalina cúbica del  $\text{BaTiO}_3$  mejora las propiedades luminiscentes del vitrocerámico.

## **Refinamiento Rietveld de polvos de $ZrO_2@SiO_2$ dopados con Er obtenidos por el método sol-gel.**

A. García Murillo<sup>1,\*</sup>, F. de J. Carrillo Romo, J. Reyes Miranda, M. Guadarrama Rendón, J. Alberto Torres Rodríguez, A. de J. Morales Ramírez

<sup>1</sup>Instituto Politécnico Nacional, CIITEC IPN, Cerrada CECATI S/N Col. Sta. Catarina, Del. Azcapotzalco, México D.F. 02250, México.

\* Autor a contactar: [antonieta\\_gmurillo@hotmail.com](mailto:antonieta_gmurillo@hotmail.com)

Palabras clave:  $ZrO_2$ , sol-gel, erbio, vitrocerámico,  $SiO_2$ .

Resumen. Se prepararon polvos vitrocerámicos de  $ZrO_2@SiO_2$  dopados con Er (0.5 % mol) por la vía sol-gel usando tetraetil ortosilicato (TEOS) y propóxido de zirconio a diferentes relaciones molares  $SiO_2:ZrO_2$  (75:25, 50:50, 25:75). Los sistemas vitrocerámicos fueron tratados térmicamente desde 200 °C a 1200 °C por 30 minutos y caracterizados por espectroscopia de infrarrojo. Se realizaron análisis de difracción de rayos X para comprobar la formación de las fases cristalinas. Además, análisis de rayos X revelaron que la temperatura de cristalización de la estructura tetragonal de  $ZrO_2$  disminuye con el incremento de la concentración de  $SiO_2$ . Se utilizó microscopia electrónica de barrido y de transmisión para la caracterización de los polvos vitrocerámicos después del tratamiento térmico a 1200 °C a fin de evaluar el efecto en las relaciones molares Zr:Si sobre la microestructura, siendo predominante la estructura tetragonal de la zirconia en relaciones molares 75:25, tetragonal y cúbica en relaciones 50:50 y cúbica en relaciones molares 25:75. Finalmente, se utilizó el método de Rietveld para refinar la estructura de todas las fases presentes en los polvos después del tratamiento térmico a 1200 °C.

## Relaciones de Simetría entre Grupos Espaciales en Nuevas Estructuras Laminares: Modelos para Estructuras Cristalinas

L. Bucio\*, N. Flores-Sánchez, I. Rosales, E. Orozco

Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México

\*Autor a contactar; e-mail: bucio@fisica.unam.mx

Palabras clave: DRX, clorhidrato de metformina, Espectroscopia Raman, FTIR

Resumen. Los modelos estructurales de los pirogermanatos laminares  $\text{ScFeGe}_2\text{O}_7$ ,  $\text{ScInGe}_2\text{O}_7$  y  $\text{FeYGe}_2\text{O}_7$  fueron analizados dentro del marco de las relaciones de simetría entre grupos espaciales. Estas estructuras están relacionadas con el tipo estructural presentado por el mineral thortveitita, que cristaliza en el sistema monoclinico, y su simetría está descrita por el tipo de grupo espacial  $C2/m$ . Otras estructuras laminares tipo thortveitita cristalizan en el sistema monoclinico, como los casos de  $\text{InFeGe}_2\text{O}_7$  (PDF 01-070-8447, ICSD - 94487), grupo espacial  $C2/m$  (No. 12);  $\text{TbInGe}_2\text{O}_7$  (PDF 01-072-6515, ICSD - 96360), grupo espacial  $C2/c$  (No. 15); y  $\text{FeYGe}_2\text{O}_7$  (PDF 01-072-6099, ICSD - 95935), grupo espacial  $P2_1/m$  (No. 11). Los grupos espaciales de las estructuras anteriores están relacionados por simetría. Por lo anterior, y mediante un análisis de parámetros cristaloquímicos relevantes (radio iónico, estado de oxidación, estimación de átomos por unidad de volumen, etc.) se llevó a cabo un análisis a través de examinar las relaciones de simetría entre los grupos espaciales para proponer un modelo de estructura cristalina para los tres compuestos  $\text{ScFeGe}_2\text{O}_7$ ,  $\text{ScInGe}_2\text{O}_7$  y  $\text{FeYGe}_2\text{O}_7$ . Los dos primeros no están reportados en la literatura, y el último (enlistado anteriormente) fue sometido a la presión de impacto de un proyectil (con una presión máxima aplicada de aproximadamente 6 GPa). El modelo estructural para  $\text{ScFeGe}_2\text{O}_7$  fue propuesto por el hallazgo de un compuesto isoestructural ( $\text{InFeGe}_2\text{O}_7$ ) citado anteriormente. Los datos estructurales de este compuesto fueron obtenidos por el método convencional de refinamiento Rietveld de los datos de difracción de polvos de rayos X, usando el programa GSAS y su interfase EXPGUI [1,2]. Para el compuesto  $\text{ScFeGe}_2\text{O}_7$ , el camino para proponer un modelo estructural fue el examen de la existencia de compuestos isoestructurales, sin algún resultado. Se examinaron los difractogramas (simulados) de compuestos relacionados por simetría con el tipo estructural de thortveitita.

El cambio de simetría a través de la selección de un grupo espacial relacionado por simetría condujo a la aparición de reflexiones de Bragg que permitieron indexar el difractograma de  $\text{ScFeGe}_2\text{O}_7$ . Las posiciones atómicas de inicio se establecieron a través del conocimiento de las relaciones de simetría entre los grupos espaciales  $C2/m$  (de la thortveitita), y el grupo espacial  $P1$  (en el sistema triclinico) para el nuevo compuesto  $\text{ScFeGe}_2\text{O}_7$ . El refinamiento Rietveld mediante GSAS se realizó utilizando este modelo obteniéndose los siguientes resultados: sistema cristalino triclinico, grupo espacial  $P1$  (No. 1), parámetros de red  $a = 5.3434(8)$ ,  $b = 5.3145(8)$ ,  $c = 4.8732(7)$  Å,  $\alpha = 99.468(2)$ ,  $\beta = 97.257(2)$ ,  $\gamma = 104.609(2)^\circ$ ,  $V = 130.03(5)$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 1$ ; wRP = 0.047, Rp = 0.04 y menor  $\chi^2$  fue 2.176 para 64 variables.

**Agradecimientos.** Se agradece el apoyo de A. Morales, y del Laboratorio de DRX del IFUNAM; Este estudio fue patrocinado por el proyecto CONACyT 167624.

### Referencias

1. A.C. Larson and R.B. Von Dreele. General Structure Analysis System (GSAS). Los Alamos National Laboratory Report LAUR 86-748 (2000).
2. B. H. Toby. EXPGUI, a graphical user interface for GSAS. J. Appl. Cryst. 34 (2001) 210-213.

## Estructura cristalina de la solución sólida $\text{Li}_{3x}\text{Zn}_{7-4x}\text{Sb}_{2+x}\text{O}_{12}$ por el método de Rietveld

J.A. Marin-Romero<sup>1\*</sup>, C. Tabasco<sup>1</sup>, P. Quintana<sup>1</sup>, L. E. Fuentes-Cobas<sup>2</sup>, C. Mena<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del Instituto Politecnico Nacional Unidad Mérida.

<sup>2</sup> Centro de Investigación en Materiales Avanzados, Miguel de Cervantes 120, Chihuahua 31109, México.

<sup>3</sup> Estudiante de doctorado en la Universidad de York, UK

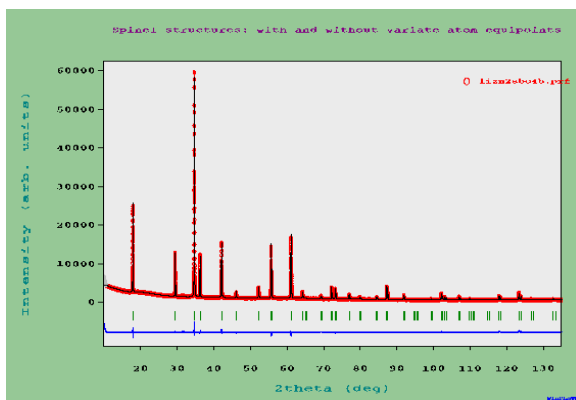
\* Autor a contactar; jamkraft@gmail.com.

Palabras clave: Rietveld,  $\text{Zn}_7\text{Sb}_2\text{O}_{12}$  dopado con Li, soluciones sólidas.

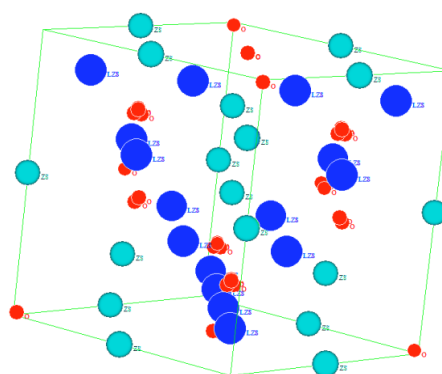
Resumen. Los varistores son materiales cerámicos resistores sensibles al voltaje usados para proteger circuitos eléctricos de aumentos repentinos de voltaje [1-3]. Estudios recientes demuestran la relación entre los óxidos  $\text{ZnO}$  y  $\text{Sb}_2\text{O}_3$  obteniendo fases secundarias como la espinela  $\text{Zn}_7\text{Sb}_2\text{O}_{12}$ . Otros trabajos han analizado el efecto dopante de elementos transicionales en la estructura cristalina y su estabilidad en  $\alpha$   $\text{Zn}_7\text{Sb}_2\text{O}_{12}$  [4-6] observando que el litio actúa como inhibidor en el crecimiento de grano, sin embargo, el litio fue añadido en pequeñas cantidades como una solución acuosa de  $\text{Li}_2\text{CO}_3$  a varistores comerciales y no a la fase aislada de  $\text{Zn}_7\text{Sb}_2\text{O}_{12}$  [7].

En el presente trabajo se prepararon diferentes composiciones en el sistema  $\text{Li}_2\text{O-Sb}_2\text{O}_5\text{-ZnO}$ , por el método cerámico a diferentes temperaturas hasta obtener el equilibrio. Se determinó la estructura cristalina y los parámetros de red de materiales novedosos en el sistema  $\text{Li}_2\text{O-Sb}_2\text{O}_5\text{-ZnO}$  mediante el método Rietveld usando el programa Fullprof, siendo que el tamaño de la celda unitaria cúbica se contrae conforme la concentración de Li aumenta y el catión Li ocupa la posición 16c en una estructura espinela.

x	a	b	c	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$
0.5	8.573747	8.573747	8.573747	90.00	90.00	90.00
0.6	8.569280	8.569280	8.569280	90.00	90.00	90.00
0.7	8.564717	8.564717	8.564717	90.00	90.00	90.00



Refinamiento en Fullprof



Estructura espinela

**Agradecimientos.** Las mediciones por DRX fueron realizadas en LANNBIO Cinvestav Mérida, con el apoyo de los proyectos FOMIX-Yucatán 2008 (No. 108160) y CONACYT LAB-2009-01 (No. 123913) y CB-2012 (No. 178947). Agradezco el apoyo técnico a MC Daniel Aguilar.

### Referencias

1. D.R. Clarke. J. Am. Ceram. Soc. 82 485-502 (1999).
2. M. Peiteado, J.F. Fernández, A.C. Bol. Soc. Esp. Ceram. 41, 92-97 (2002).
3. G.D. Mahan, L.M. Levinson, Philipp H.R. J. Appl. Phys. 50, 2799-2812 (1979).
4. R. Harrington, G.C. Miles, A.R. West. J. Eur. Ceram. Soc. 26, 2307-2311 (2006).
5. R. Harrington, G.C. Miles, A.R. West. Mat. Res. Bull. 43, 1949-1956 (2008).
6. R. Harrington, G.C. Miles, A.R. West. 181, 334-339 (2008).
7. M. Houabes, R. Metz. Ceram. Int. 1385-1389 (2009)



## Formación de soluciones sólidas en la unión $\text{LiZnSbO}_4\text{-Z}_7\text{Sb}_2\text{O}_6$

C. Tabasco<sup>1\*</sup>, P. Quintana<sup>1</sup>, C. Mena-Duran<sup>2</sup>, C. Manzanero<sup>3</sup>, G. Rodriguez<sup>1</sup>

<sup>1</sup>CINVESTAV-Unidad Mérida Departamento de Física Aplicada, Mérida, Yuc., México, C. P. 97310.

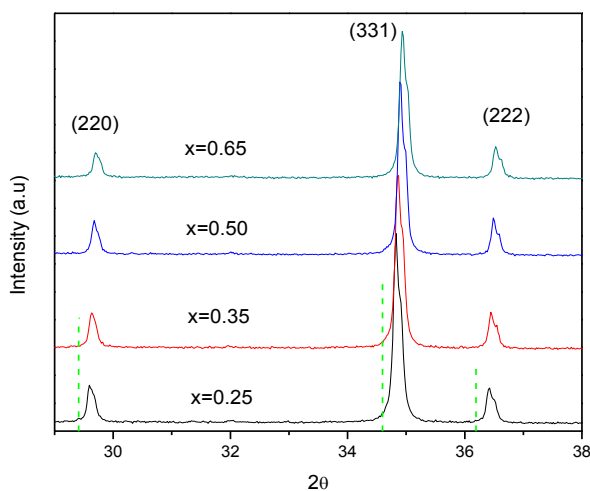
<sup>2</sup>The University of York, York, United Kingdom.

<sup>3</sup>Instituto Tecnológico de Mérida, Mérida, Yuc., México, C. P. 97118.

\* Autor a contactar: [carolinatabasco@gmail.com](mailto:carolinatabasco@gmail.com)

Palabras clave: **Zincatos de litio antimonio. XRD, TGA, XPS**

**Resumen:** Los varistores de ZnO son compuestos cerámicos usados para la estabilización de voltaje y la supresión de la sobrecarga en sistemas de poder eléctrico y circuitos electrónico. La característica principal de los varistores de ZnO es su alta-no linealidad en su voltaje-corriente característico. Entre los constituyentes microscópicos de estos cerámicos multicomponentes se encuentra la espinela  $\text{Zn}_7\text{Sb}_2\text{O}_{12}$ . El material espinela controla el crecimiento del grano del ZnO en el sinterizado del cerámico, mejorando las propiedades eléctricas de los varistores. Por esta razón se estudia el efecto de la adición de  $\text{Li}_2\text{O}$  a los compuestos de espinela. Un estudio sistemático hecho en el sistema ternario  $\text{Li}_2\text{O-ZnO-Sb}_2\text{O}_5$  permitió encontrar una solución sólida en la unión  $\text{LiZnSbO}_4\text{-Zn}_7\text{Sb}_2\text{O}_{12}$  la cual fue investigada por medio de difracción de rayos X (DRX), análisis termogravimétrico (TGA) y espectroscopia de fotoelectrón de rayos X (XPS).



Patrón de difracción de rayos-x para las soluciones solidas  $\text{Li}_{3x}\text{Zn}_{7-4x}\text{Sb}_{2+x}\text{O}_{12}$  para  $x=0.25, 0.35, 0.5$  y  $0.65$ , la cual es isoestructural a  $\alpha\text{-Zn}_7\text{Sb}_2\text{O}_6$  (PDF 15-0687).

**Agradecimientos:** Las mediciones fueron realizadas en LANNBIO Cinvestav Mérida, con el apoyo de los proyectos FOMIX-Yucatán 2008 (No. 108160) y CONACYT LAB-2009-01 (No. 123913) y CB-2012 (No. 178947). Agradezco el apoyo técnico a MC Daniel Aguilar, Ing W Cauich y Dra. L Vilca.

### Referencias

- 1.- S. Ezhilvalavan, T. R. N. Kutty. Mat. Chem. Phys. 49 (1987) 258-259.
- 2.- L.-T Mei et al. Jornal of Alloyds and Compounds 558 (2013) 84-90.
- 3.- Z. BranKovic et al. Ceramics International 27 (2001) 115-122.
- 4.- T. Asokan, R. Freer. J. Mater. Sci. 25 (5) (1990) 2447-2453.
- 5.- C. Mena. (2001) MSC Thesis. CINVESTAV.

## Estudio de la obtención del compuesto MgO mediante molienda mecánica.

Fernando-Marquez C.<sup>1\*</sup>, Tehuacanero-Núñez S.<sup>2</sup>, Reyes-Gasga J.<sup>2</sup>, Juárez-Arellano E. A.<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Licenciatura en Ciencias Químicas, Universidad del Papaloapan, Campus Tuxtepec, Circuito central 200, Col. Parque Industrial, C.P. 68301, Tuxtepec, Oax., México. olbertiko@live.com.mx\*

<sup>2</sup> Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, circuito de la Investigación S/N, Cd. Universitaria Coyoacán, C.P. 04510 México, D.F. México.

<sup>3</sup> Instituto de Química Aplicada, Universidad del Papaloapan, Campus Tuxtepec, Circuito central 200, Col. Parque Industrial, C.P. 68301, Tuxtepec, Oax., México.

Autor a contactar: eajuarez@unpa.edu.mx

Palabras clave: Molienda mecánica, óxidos metálicos, magnesio.

### Resumen.

En este trabajo se estudia la síntesis del sistema MgO por molienda mecánica de alta energía. La caracterización se realizó por las técnicas de difracción de rayos X y Microscopio electrónica de transmisión (MET). La aleación mecánica o molienda de polvos es un método muy versátil y potente para la obtención de tamaño nanocristalino o estructuras de granos ultrafinos con propiedades mejoradas.

Para resaltar su potencialidad se ha aplicado al estudio de polvos de Magnesio. En este trabajo se presenta un análisis cuyo sistema se encuentra en condiciones controladas de síntesis. La síntesis fue realizada en un molino de bolas durante 5, 10, 20, 40, 80, 160, 320 y 640 minutos de molienda.

Por DRX se analizó el reactivo inicial, se observó que era una mezcla de Mg metálico y Mg(OH)<sub>2</sub> (Fig. 1).

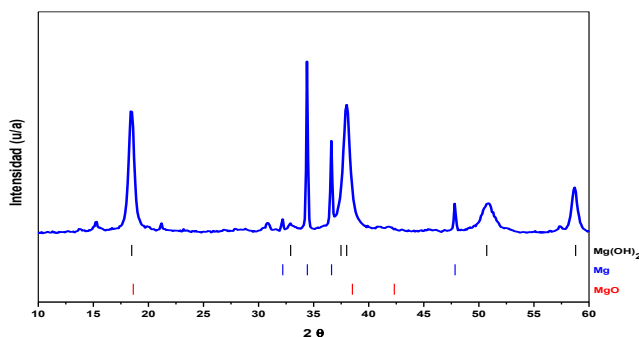


Figura 1. Difractograma del reactivo utilizado en este estudio.

A diferentes tiempos de molienda, la difracción de rayos X mostró que las fases de partida transformaron a MgO a partir de los 320 min de molienda. Por MET se pudo observar la cristalinidad de las partículas así como su cristalografía.

Se puede concluir que la morfología, microestructura y estabilidad de varias fases de Mg es afectado de manera distinta durante la molienda mecánica y que la fase más estable es el óxido de magnesio.

### Agradecimientos.

Samuel Tehuacanero Cuapa, Antonio Morales Espino, Diego A. Quiterio Vargas, Jaqueline Cañetas Ortega, Orlando Hernández Cristóbal, Pedro Mexia Hernández, Alfredo Martínez García, Diana Agüero Valdez y Margarita López Medina. También se agradece el financiamiento otorgado por CONACyT (CB-2009-01-129934).

### Referencias

1. I. Dinga Gustov, Hydrogen: *The ultimate fuel and energy carrier*. International Journal of Hydrogen Energy, Vol. 14, Issue 11, p. 777-784, 1989.
2. G. Alefeld and J. Völkl (Ed.) *Hydrogen in Metals I and II* (Topics in Applied Physics, vol. 28 and 29), Springer, Berlín, Heidelberg, New York, 1978.

## Efecto de la molienda mecánica de alta energía en la estructura cristalina de la arcilla montmorillonita

M. Valera Zaragoza<sup>2\*</sup>, S. Dehesa Blas<sup>1</sup>, E. A. Juárez-Arellano<sup>2</sup>, C. Velasco Santos<sup>3</sup>, C. Fernando Marquez<sup>4</sup>

<sup>1</sup> División de Estudios de Posgrado, Universidad del Papaloapan, Campus Tuxtepec, Circuito central 200, Col. Parque Industrial, Tuxtepec, Oax. C.P. 68301, México.

<sup>2</sup>Instituto de Química Aplicada, Universidad del Papaloapan, Campus Tuxtepec, Circuito central 200, Col. Parque Industrial, Tuxtepec, Oax. C.P. 68301, México. [mario\\_valzar@hotmail.com](mailto:mario_valzar@hotmail.com), [eradjuar@hotmail.com](mailto:eradjuar@hotmail.com)

<sup>3</sup>Facultad de ingeniería de materiales, Instituto Tecnológico de Querétaro, Av. Tecnológico s/n esq. Mariano Escobedo Col. Centro, Querétaro, Qro. C.P. 76000, México.

<sup>4</sup> Licenciatura en Ciencias Químicas, Universidad del Papaloapan, Campus Tuxtepec, Circuito central 200, Col. Parque Industrial, C.P. 68301, Tuxtepec, Oax., México.

**Palabras claves:** Montmorillonita, Microscopia electrónica de Transmisión, Difracción de rayos-X, BET.

### Resumen

La montmorillonita, perteneciente al grupo de las arcillas esmectitas, es uno de las arcillas más comúnmente utilizadas en la síntesis de nanocompuestos poliméricos. Las láminas que forman sus partículas tienen una estructura tipo “sándwich” con una capa central formada por átomos de aluminio coordinados octaédricamente e intercalada entre dos capas compuestas por átomos de sílice coordinados tetraédricamente. Por otro lado, tradicionalmente los polímeros han sido modificados con cargas minerales y/o refuerzos con el objetivo de mejorar algunas de sus propiedades, principalmente sus propiedades mecánicas. En este sentido, son muchos los estudios que describen la incorporación y modificación de silicatos<sup>1</sup>. Sin embargo, se ha observado que el tamaño de partícula, la separación entre capas, y la superficie de la arcilla tienen una gran influencia en las propiedades finales del polímero. Por lo tanto, en la presente investigación, se muestran resultados de la molienda mecánica de la arcilla montmorillonita en un molino planetario de bolas de alta energía modelo Pulverisette 7 marca Fritsch. Se estudió el efecto de molienda a los tiempos de 1, 3, 6, 9, 12, 15, 18, 21, 24, 48, 96, minutos, manteniendo constante la velocidad de molienda a 600 rpm. Los productos de molienda fueron caracterizados por microscopía electrónica de transmisión (TEM), difracción de rayos-X (DRX), BET, espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier (FTIR) y análisis térmico (TGA).

Se observaron por DRX cambios importantes en la estructura de la arcilla desde los 12 minutos de molienda. La disminución en intensidad de las señales del difractograma es un indicio de delaminación y daño estructural de la arcilla por los choques y la alta energía generada durante la molienda, además por BET se observó un aumento en el área superficial en función del tiempo de molienda hasta los 24 minutos. Posteriormente, el valor de área superficial disminuyó con el tiempo de molienda, lo cual puede indicar una posible aglomeración entre las láminas por exceso en el número de choques y/o en la generación de un mayores defectos en la superficie de la arcilla. Por TEM se comprobó el efecto de la delaminación de la arcilla. Los espectros de FTIR mostraron una disminución en la intensidad de los picos de absorción característicos de las vibraciones moleculares de la montmorillonita. Las curvas por análisis térmico presentan una pérdida de peso mayor a mayores tiempos de molienda.

### Agradecimientos

A CONACyT por el apoyo económico brindado, al Tecnológico de Querétaro y al CFATA- UNAM- por el apoyo ofrecido con los equipos.

### Referencias

1. Camila A. Rezende, Fabio C. Bragança, Telma R. Doi, Lay-Theng Lee, Fernando Galembeck, François Boué (2010). *Polymer* 51: 3644-3652

## Caracterización cristalográfica de nuevas soluciones sólidas de $\text{KNbO}_3$ co-dopado con $\text{Fe}^{3+}$ , $\text{Cr}^{3+}$ , $\text{Mn}^{3+}$ , $\text{La}^{3+}$ y $\text{Eu}^{3+}$

Jesús A. Peña\*, Ma. Elena Villafuerte Castrejón (Instituto de Investigaciones de Materiales, UNAM, México),

Autor a contactar: jesusalejandropea@gmail.com

La búsqueda de nuevos compuestos piezoeléctricos, como el niobato de potasio, es de gran interés actualmente <sup>(I-IV)</sup>. El efecto de dopar el  $\text{KNbO}_3$  con tierras raras y metales de transición provocan alteraciones estructurales y químicas, esas alteraciones hacen que este material modifique sus propiedades ópticas, magnéticas y eléctricas.

En el presente trabajo el compuesto  $\text{KNbO}_3$  es co-dopado con  $\text{Fe}^{3+}$ ,  $\text{Mn}^{3+}$ ,  $\text{Cr}^{3+}$  en el sitio B de la estructura perovskita, mientras con  $\text{La}^{3+}$  y  $\text{Eu}^{3+}$  en el sitio A. Las soluciones sólidas se sintetizaron por un nuevo proceso llamado “método de horneado” (número de patente MX/a/2011/012552), este método ha sido probado con buenos resultados para la síntesis de  $\text{KNbO}_3$ ,  $\text{KTaO}_3$ ,  $\text{NaNbO}_3$  y  $\text{NaTaO}_3$ . Se utilizan como reactivos óxidos metálicos e hidróxidos ( $\text{KOH}$  o  $\text{NaOH}$ ), lo que lo hace un método sencillo y barato.

Las soluciones sólidas sintetizadas se caracterizaron por Difracción de Rayos X, Microscopía Electrónica de Barrido al igual que la determinación de sus densidades por el método de Arquímedes. Las variaciones en los parámetros de red son medidas por Refinamiento Rietveld.

### Bibliografía

1. René T. Wegh, Andries Meijerink, Ralf-Johan Lamminmäki, Jorma Hölsa, *Journal of Luminescence*, **2000**, pp. 1002 – 1004.
2. Te-Hua Fang, Yu-Jen Hsiao, Yee-Shin Chang, Yen-Hwei Chang, *Materials Chemistry and Physics*, vol. 100, **2006**, pp. 418 – 422.
3. Reenamoni Saikia Chaliha, K. Annpurna, Anal Tarafder, V. S. Tiwari, P. K. Gupta, Basudeb Karmakar, *Optical Materials*, vol. 32, **2010**, pp. 1202 – 1209.
4. Cheng-Hung Wen, Sheng-Yuan Chu, Yan-Yu Shin, Ching-Ting Lee, Yung-Der Juang, *Journal of Alloys and Compounds*, vol. 459, **2008**, pp. 107 – 112.
5. Jesús Alejandro Peña Jiménez. Thesis. Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, México D.F, 2010.

## Los MOFS como materiales almacenadores de metano

Erick Adrián Juárez Arellano<sup>1</sup>, Jade A. Galicia<sup>2\*</sup>

<sup>1</sup>Universidad del Papaloapan Campus Tuxtepec. Av. Circuito Central No.200. Tuxtepec, OAX. C.P 68301. Tel. 287 87 5 92 40.

Autor a contactar: jeder\_22@hotmail.com

Palabras clave: Materiales metal-orgánicos (MOF), adsorción, metano, afinidad, porosidad, Cristalografía.

Resumen. La necesidad de combustibles alternativos es mayor ahora que nunca. Por lo cual el metano es una fuente considerable por su disponibilidad y bajo factor de contaminación, este gas es una elección natural como sustituto del petróleo en los automóviles y otras aplicaciones móviles. Sin embargo, debido a la falta de métodos de almacenamiento eficientes todavía se carecen de implementar la aplicación de metano en la industria automotriz. Actualmente se analizan materiales porosos avanzadas, como son armazones organometálicos los cuales han recibido considerable atención en aplicaciones de almacenamiento de adsorbentes debido a sus áreas de superficies excepcionalmente altas y las estructuras químicamente sintonizables.<sup>1</sup> A la par se han reportado estudios de materiales adsorbentes con propiedades texturales mejoradas los cuales han cobrado gran interés en los últimos años debido al potencial que presentan para el almacenamiento de hidrógeno y otros gases con interés energético y/o medioambiental como lo es el metano. En este sentido, dentro de los materiales estudiados se encuentran los MOF (“Metal-Organic Framework”) los cuales han supuesto un salto cualitativo en síntesis racional y control de las propiedades fisicoquímicas con respecto a los materiales adsorbentes convencionales debido a su enorme versatilidad química y estructural.<sup>2</sup> De estas propiedades se pueden mencionar que están formados por unidades metálicas (átomos aislados o clústeres) que se unen entre sí mediante ligandos orgánicos al menos dicoordinados, formando redes (esquemas de repetición del motivo) infinitas, que se caracterizan por poseer enlaces metal-ligando fuertes (Enlace covalente coordinado) que proporcionan estabilidad mecánica y térmica, y una estructura con geometría bien definida de naturaleza cristalina.<sup>3</sup> La versatilidad estructural y de composición antes mencionadas de los MOF abre una nueva posibilidad de controlar las propiedades químicas de los grupos funcionales así como la geometría y dimensiones de los poros, canales y ventanas de la estructura, convirtiéndolos en una alternativa interesante para la adsorción específica de gases.<sup>4</sup> En esta revisión crítica se proporciona un resumen de la situación actual de la aplicación de los MOF porosos avanzados en el almacenamiento de metano.

Agradecimientos.

### Referencias

1. Trevor A. Makal, Jian-Rong Li, Weigang Lu and Hong-Cai Zhou., 2012, Methane storage in advanced porous materials.
2. Yang Peng, Vaiva Krungleviciute, Ibrahim Eryazici, Joseph T. Hupp, Omar K. Farha and Taner Yildirim., 2013, Methane Storage in Metal-Organic Frameworks: Current Records, Surprise Findings and Challenges.
3. H. Furukawa, N. Ko, Y. Go, N. Aratani, S. Choi, E. Choi, A. Yazaydin, R. Snurr, M. O’Keeffe, J. Kim, O. Yaghi, Science 2010, 329, 424-428.
4. M. Gisela Orcajo, Juan A. Botas, Guillermo Calleja, Manuel Sanchez- Sanchez., 2012, Materiales MOF para el almacenamiento de hidrogeno.

## **Estructura cristalina y propiedades eléctricas de la solución sólida $\text{K}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{NbO}_3$ , dopada con $\text{Eu}^{3+}$**

Rodrigo Vivar Ocampo<sup>1\*</sup>, Ma. Elena Villafuerte Castrejón<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM, México.

Autor a contactar: ocampovivar@gmail.com

Palabras clave: Solución sólida, estructura cristalina, KNN

Actualmente en la búsqueda de materiales piezoeléctricos libres de plomo, se ha estudiado el  $\text{K}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{NbO}_3$  (KNN), que es uno de los materiales que presentan las mejores propiedades piezoeléctricas. En el presente trabajo se estudió la estructura cristalina de las soluciones solidas de KNN dopadas con europio al 5, 8 y 10% mol, con el fin de relacionar los cambios estructurales que ocasiona el europio al entrar en la red cristalina de la matriz de KNN en las propiedades eléctricas de la solución sólida. Para esto, utilizamos el refinamiento Rietveld, que nos permitió calcular los parámetros cristalográficos de las soluciones sólidas. Asimismo, se realizó la medición de permitividad en función de la temperatura, con lo que se pudo comprobar cambios tanto en las temperaturas de transición de fase como en el intervalo de temperaturas en que la fase cristalina tetragonal permanece estable. Se observó un incremento en la tangente de pérdidas eléctricas. Se compararon las propiedades piezoeléctricas, entre las soluciones sólidas y el material sin dopar.

### **Referencias:**

1. Bell, Andrew J; Ferroelectrics: The role of ceramic science and engineering Journal of the European Ceramic Society, 28, (2008), 1307-1317.
2. Hewat, A. W., Cubic-tetragonal-orthorombic-rhomboedral ferroelectric transitions in perovskite potassium niobate : neutrón poder profile refinement of the structures. J. Phys. Solid State Phys., Vol. 6 1973.
3. Pardo L., Jiménez B., Hungria T., Moure A., Castro A., Sodium-lithium niobate piezoceramics prepared by mechanochemical activation assisted methods. Bol. Soc. Esp. Ceram. V., 43 [1] 30-34 (2004)

## Síntesis de polvos de óxido de magnesio porosos por molienda mecánica con posible aplicación como material almacenador de hidrógeno

A. Martínez-García<sup>1</sup>, S. C. Altamirano-Perez<sup>1</sup>, C. Fernando-Marquez<sup>2</sup>, M. Ávalos-Borja<sup>3</sup>, E. A. Juárez-Arellano<sup>4</sup>.

<sup>1</sup> División de Estudios de Posgrado, Universidad del Papaloapan, Campus Tuxtepec, Circuito central 200, Col. Parque Industrial, C.P. 68301, Tuxtepec, Oax. México.

<sup>2</sup> Licenciatura en Ciencias Químicas, Universidad del Papaloapan, Campus Tuxtepec, Circuito central 200, Col. Parque Industrial, C.P. 68301, Tuxtepec, Oax. México.

<sup>3</sup> Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, Camino a la Presa San José, Col. Lomas, sección 4, C.P. 78216, San Luis Potosí, S.L.P, México.

<sup>4</sup> Instituto de Química Aplicada, Universidad del Papaloapan, Campus Tuxtepec, Circuito central 200, Col. Parque Industrial, C.P. 68301, Tuxtepec, Oax. México

**Palabras clave:** óxidos de magnesio, molienda mecánica, almacenadores de hidrógeno.

### Resumen.

El uso de materiales porosos para el almacenamiento de hidrógeno es obstaculizado por la débil interacción superficie-gas que existe entre ellos [1]. Sin embargo, los óxidos metálicos siguen atrayendo la atención en la adsorción debido a su amplia aplicación en catálisis [2], almacenamiento de hidrógeno [3] y sensores [4]. Se ha reportado que los polvos de óxido de magnesio presentan una gran área superficial por unidad de volumen lo que facilitaría la interacción gas-superficie del material. En este trabajo se realizó un análisis del efecto de la molienda mecánica en la síntesis de polvos de óxido de magnesio partiendo de una mezcla de Mg y Mg(OH)<sub>2</sub>. Los reactivos fueron sometidos a un tratamiento mecánico en un molino planetario de bolas modelo *pulverisette 7* con las siguientes condiciones: 200, 400 y 600 rpm durante un periodo de tiempo de 5-640 min, utilizando nitruro de silicio, acero endurecido y carburo de tungsteno como materiales de molienda en una atmosfera de aire. Los productos de molienda fueron analizados por DRX, ATG, CDB y MEB. Los productos de molienda demostraron que usando nitruro de silicio como material de molienda no se observó la formación de MgO en las condiciones exploradas. Usando acero endurecido y carburo de tungsteno, se observó la formación de MgO a partir de los 640 y 320 min de molienda a 400 rpm, respectivamente.

### Agradecimientos.

Agradezco a la Universidad del Papaloapan por el apoyo para realizar las síntesis de los materiales y la caracterización por DRX, ATG y CDB, además de la colaboración del Instituto Potosino de Investigación Científica Y Tecnológica (IPICYT) por la caracterización por MEB.

### Referencias.

- (1) Li, Y.; Zhao, D. L.; Wang, Y. T.; Xue, R. S.; Shen, Z. M.; Li, X. G. 2007, Int. J. Hydrogen Energ. 32, 2513.
- (2) Hu, Y. H.; Ruckenstein, E. 2004. Ad V. Catal, 48, 297.
- (3) Dai, X. D.; Liu, X. M.; Xing, W.; Qian, L.; Qiao, K.; Yan, Z. F. 2009. J. Porous Mater, 16, 27.
- (4) Lari, A.; Khodadadi, A.; Mortazavi, Y. 2009. Sens. Actuators, B, 139, 361

## Caracterización por DRX de los productos de molienda mecánica de arcilla montmorillonita-TiO<sub>2</sub>

López-Medina M.<sup>1,2</sup>, Gochi-Ponce Y.<sup>1</sup>, Valera-Zaragoza M.<sup>2</sup> Juárez-Arellano E.A.<sup>2,\*</sup>

<sup>1</sup>Instituto Tecnológico de Oaxaca, Departamento de Ingeniería Química y Bioquímica, Av. Ing. Víctor Bravo Ahuja 125 esq. Calz. Tecnológico, Oaxaca de Juárez, Oaxaca, 68030, MÉXICO.

<sup>2</sup>Instituto de Química Aplicada, Universidad del Papaloapan, Circuito Central 200, Col. Parque industrial, Tuxtepec, Oaxaca, 68301, MÉXICO.

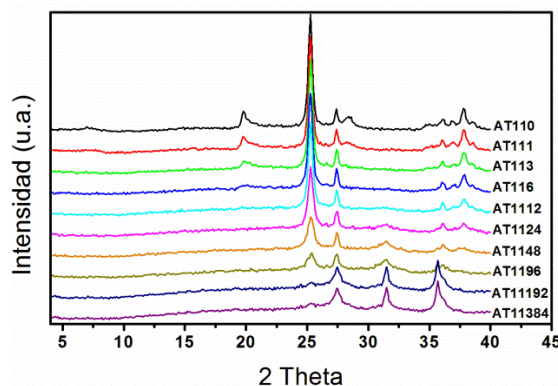
Autor a contactar: eajuarez@unpa.edu.mx

Palabras clave: Molienda mecánica, dióxido de titanio, arcilla montmorillonita, difracción de rayos-X.

Resumen. El dióxido de titanio (TiO<sub>2</sub>) es un material apto para una gran variedad de aplicaciones, debido a que posee importantes propiedades fisicoquímicas. Entre las aplicaciones más destacadas están: fotocatalisis, pinturas, pigmentos, producción de electrodos para electroquímica, capacitores y celdas solares [1,2]. El TiO<sub>2</sub> está formado por partículas nanométricas, pero debido a la adhesión interfacial entre las partículas forma aglomerados de dimensiones micrométricas o milimétricas. Paralelamente, en años recientes se han obtenido nanocompuestos poliméricos utilizando arcillas como reforzante, donde la arcilla es dispersada en placas nanométricas a lo largo de todo el volumen del polímero, favoreciendo las propiedades fisicoquímicas y mecánicas del compuesto. Un estudio sobre dispersión de arcilla-TiO<sub>2</sub> en hule natural mostró que nanopartículas de TiO<sub>2</sub> pueden depositarse sobre la superficie de la arcilla [3]. De acuerdo a estos resultados, se cree que las nanopartículas de TiO<sub>2</sub> preferentemente interactúan con algún tipo de sitios activos de la arcilla, posiblemente defectos en el ordenamiento estructural de la misma. Con base en lo anterior, en el presente trabajo se estudió el efecto que tiene la molienda mecánica sobre el sistema arcilla montmorillonita-TiO<sub>2</sub> a diferentes relaciones y tiempos de molienda. Los patrones de difracción mostraron cambios en el comportamiento cristalino de la arcilla, delaminación y aumento de la fase rutilo del TiO<sub>2</sub> (Figura 1).

**Figura 1.** Difractogramas de la relación 1:1 de arcilla-TiO<sub>2</sub> a diferentes tiempos de molienda mecánica.

Agradecimientos. Se agradece a CONACYT a través del proyecto CB-2009-01-129934 por el apoyo económico para el desarrollo de este trabajo.



### Referencias

1. Kleiman A., Vera M. L., Márquez A., Litter M. Estudio de la actividad fotocatalítica de películas de dióxido de titanio en fase anatasa. Suplemento de la Revista Latinoamericana de Metalurgia y Materiales. 2009. S1 (3): 1017-1021
2. Galvis J.A., Ramirez H., Montes J., Sanchez L. Beltran C., J., Barrero C.A., Morales A. L., Gómez J. F., Tirado-Mejía L., Osorio J. Crecimiento y caracterización de películas delgadas de TiO<sub>2</sub> y Ti<sub>1-x</sub>Fe<sub>x</sub>O<sub>2</sub>. Suplemento de la Revista Latinoamericana de Metalurgia y Materiales. 2009. S1 (3): 975-983
3. Yescas Yescas Asunción. Estudio de la dispersión de nanoarcillas organomodificadas y de dióxido de titanio (TiO<sub>2</sub>) en hule natural. Tesis de Licenciatura en Ciencias Químicas. Universidad del Papaloapan (UNPA). Junio 2012.



## **Rietveld-refinement of rutheno-Cuprate superconductor $\text{RuSr}_2\text{GdCu}_2\text{O}_{8\pm z}$ annealed for different times in oxygen flux**

Mohamed Abatal<sup>1</sup>, Gonzalo Gonzalez<sup>2</sup>, Cristóbal Patiño<sup>1</sup>, Sergio Martínez<sup>1</sup> and Elizabeth Chavira<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Fac. Ing. Universidad Autónoma del Carmen, C.P. 24180, Cd del Carmen, Campeche, México

<sup>2</sup>Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM, C.P. 4510, Distrito Federal, México

### Abstract:

In this study, our aim is to investigate the effect of annealing time in flowing oxygen on structural properties of the rutheno-cuprate  $\text{RuSr}_2\text{GdCu}_2\text{O}_{8\pm z}$  (Ru-1212). By means of solid-state reaction at ambient pressure, Ru-1212 was prepared at temperature between 960 °C to 1060 °C in air. Powder x-ray diffraction indicates the formation of a pure phase. Oxygen treatment was carried out at 1060 °C for, 48, 72, and 96 hours. After each treatment, the structure of the samples was investigated by Rietveld refinement. The results indicate that the parameters cell  $a$  and  $c$  as well as bond lengths Cu-O(1), Ru-O(1), Ru-O(3) and Cu-O(2) are affected with the time of flowing oxygen. The structural parameters at each treatment were compared with the superconducting and semiconducting phase in order to prove that the structural and electric properties of the Ru-1212 compound are strongly related.

## Elaboración de películas delgadas con erbio usando el método de spinning-coating.

E. Chávez-Mendiola<sup>1,2,\*</sup>, M. Acosta-Enriquez<sup>1,b</sup>, A. Carrillo-Castillo<sup>4,c</sup>, R. Godoy-Rosas<sup>1,3,d</sup>, S.J. Castillo<sup>1,e</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Investigación en Física, Universidad de Sonora, Apdo. Postal 5-088 CP 83000, Hermosillo, Sonora, México.

<sup>2</sup>Instituto Tecnológico de Hermosillo, Av. Tecnológico s/n Col. Sahuaro, CP 83170, Hermosillo, Sonora, México.

<sup>3</sup>Departamento de Matemáticas, Universidad de Sonora, Luis Donaldo Colosio y Rosales CP 83000, Hermosillo, Sonora, México.

<sup>4</sup>Instituto de Ingeniería y Tecnología, Universidad Autónoma de Ciudad Juárez, Ciudad Juárez, Chihuahua, México.

Autores a Contactar: \*echavez@hotmail.com, <sup>b</sup>milka.acosta@gmail.com, <sup>c</sup>amanda.carrillo@uacj.mx,

<sup>b</sup>rodolfogodoyrosas@hotmail.com, <sup>e</sup>semiconductores@difus.uson.mx

Palabras clave: erbio, spinning-coating,

Resumen. En este trabajo se informa el resultado del recubrimiento de películas delgadas con erbio; usando el método de spinning coating. El proceso se elaboró con precursores de nitrato de erbio y tetraetilortosilicato (TEOS). Se reportan caracterizaciones de UV vis, FTIR y otros; donde se discuten los resultados obtenidos. Este trabajo de investigación aporta una composición innovadora, para obtener películas delgadas de erbio, existen otros reportes de investigación donde se obtienen este tipo de películas usando el mismo método de spinning-coating, pero no con la misma composición que el utilizado en esta investigación. Los iones de erbio irradian luz aproximadamente a una longitud de onda de 1550nm. Los cristales o vidrios dopados con erbio, regularmente tienen aplicaciones ópticas. También el erbio se utiliza algunas veces como colorante de vidrios y esmaltes, ya que la tonalidad rosa que les proporciona es conveniente.

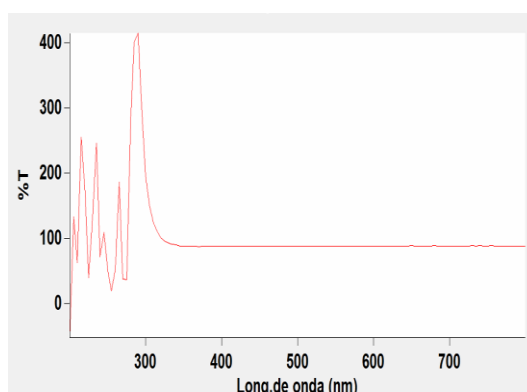
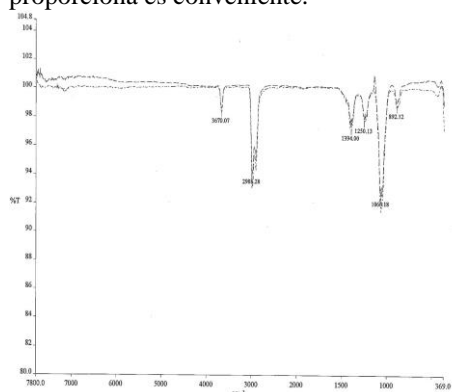


Fig.1 Espectro FTIR de película delgada de erbio. Fig.2 Espectro Uv vis de película delgada de erbio.

Agradecimientos. Al Dr. S.J Castillo, Dra. Milka Acosta y Dra. Amanda Carrillo por su colaboración y ayuda; al CONACYT y la Universidad de Sonora por su apoyo para la divulgación científica e investigación; a mis compañeros Rodolfo Godoy, Horacio Pineda y Temistocles Mendevil, por su ayuda.

### Referencias

1. Effect of Er doping on optical band gap energy of TiO<sub>2</sub> thin films prepared by spin coating  
Por: Lee, Deuk Yong; Kim, Jin-Tae; Park, Ju-Hyun; et ál.  
CURRENT APPLIED PHYSICS Volumen: 13 Número: 7 Páginas: 1301-1305 Fecha de publicación: SEP 2013  
Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy  
Por: Echabaane, M.; Rouis, A.; Bonnamour, I.; et ál.
2. Non-stabilized europium-doped lanthanum oxyfluoride and fluoride nanoparticles well dispersed in thin silica films  
Por: Rodrigues, Emille M.; Souza, Ernesto R.; Monteiro, Jorge H. S. K.; et ál.  
JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY Volumen: 22 Número: 45 Páginas: 24109-24123 Fecha de publicación: DEC 7 2012

## Estudio cristalográfico de los compuestos reducidos $\text{Sr}_3\text{Ru}_2\text{O}_{7-\delta}$ .

O. Martínez<sup>1,\*</sup>, L. Bucio<sup>2</sup> G. Tavizón<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Física y Química Teórica, Facultad de Química, UNAM.

<sup>2</sup>Departamento de Estado Sólido, Instituto de Física, UNAM.

Autor a contactar: oliverio5@comunidad.unam.mx.

Palabras clave: Cristalografía, Refinamiento estructural, Ruddlesden-Popper, perovskitas laminares.

Resumen. Los compuestos que adoptan la estructura tipo Ruddlesden-Popper han generado gran interés debido a la gran variedad de propiedades que pueden presentar<sup>1</sup>. La Figura 1 representa la celda unitaria para una fase RP ( $n = 2$ ), la cual se puede describir como  $n$  capas perovskitas apiladas a lo largo del eje  $c$  seguidas de una capa tipo sal de roca e inmediatamente después  $n$  capas perovskitas desplazadas con respecto al apilamiento previo. Entre estos compuestos, se puede mencionar a la familia de los rutenatos  $\text{Sr}_{n+1}\text{Ru}_n\text{O}_{3n+1}$ , los cuales presentan propiedades eléctricas magnéticas muy interesantes. El compuesto  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  ( $n = 1$ ), fue el primer superconductor libre de cobre y con estructura laminar que presentó superconductividad<sup>2</sup>. Con relación al compuesto  $\text{Sr}_3\text{Ru}_2\text{O}_7$  ( $n = 2$ ), entre las propiedades que presenta se pueden mencionar un punto crítico cuántico y características de conducción altamente anisotrópicas. Adicionalmente, para este compuesto existen reportes en los que se observa un comportamiento ferromagnético, antiferromagnético e incluso un comportamiento paramagnético<sup>3</sup>.

En este trabajo se presenta la síntesis del compuesto  $\text{Sr}_3\text{Ru}_2\text{O}_7$  mediante la técnica convencional de estado sólido y su posterior reducción bajo atmósfera de hidrógeno.

Para los compuestos reducidos  $\text{Sr}_3\text{Ru}_2\text{O}_{7-\delta}$  se realizó el análisis estructural mediante el refinamiento de Rietveld utilizando las paqueterías GSAS con interfaz gráfica EXPGUI<sup>4</sup>. Este análisis muestra que los oxígenos axialmente coordinados al átomo de rutenio son los que se pierden durante el proceso de reducción. Por otra parte, se observó que el parámetro de red  $a$  aumenta mientras que el parámetro de red  $c$  disminuye al aumentar la cantidad de vacancias de oxígeno.

Adicionalmente se realizó un análisis de suma de enlace de valencia (BVS, Bond Valence Sum)<sup>5</sup> para determinar el grado de distorsión en cada uno de los enlaces presentes y se encontró que conforme aumentan las vacancias de oxígeno el parámetro de distorsión global  $G$  se incrementa.

Se realizaron cálculos atomísticos para determinar la energía asociada a la generación de vacancias para cada uno de los distintos oxígenos cristalográficos y se encontró que el oxígeno axial es el que requiere de una menor energía para la generación de vacancias.

Agradecimientos. Este trabajo cuenta con el apoyo económico del proyecto PAPIIT IN-214313. Agradecemos la colaboración de la Q. I. Cecilia Salcedo para la obtención de los patrones de difracción de los compuestos estudiados.

### Referencias

1. Lee, K. H.; Kim, S. W.; Ohta, H.; Koumoto, K. *J. Appl. Phys.* **2006**, *100*, 063717.
2. Lichtenberg, F. *Prog. Solid State Chem.* **2002**, *30*, 103–131.
3. Ikeda, S.-I.; Shirakawa, N.; Yanagisawa, T.; Yoshida, Y.; Koikegami, S.; Koike, S.; Kosaka, M.; Uwatoko, Y. *J. Phys. Soc. Japan* **2004**, *73*, 1322–1325.
4. Larson, A. C.; Von Dreele, R. B. *General Structure Analysis System (GSAS)*; Los Alamos National Laboratory Report LAUR 86-748: Los Alamos, 1994.
5. Brown, I. D. *Chem. Rev.* **2009**, *109*, 6858–6919.

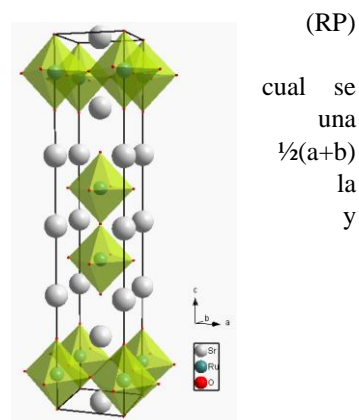


Figura 1. Estructura  $\text{Sr}_3\text{Ru}_2\text{O}_7$  con GE. técnica  $I4/mmm$ .

## Síntesis mecanoquímica y caracterización de ReC

Mizraim Guillermo Granados Fitch<sup>1,\*</sup>, Erick A. Juárez-Arellano<sup>2</sup>, Miguel Ávalos Borja<sup>1,3</sup>.

<sup>1</sup> Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica. División de Materiales Avanzados. Camino a la Presa San José 2055, Lomas 4ta sec., C.P. 78216, San Luis Potosí, S.L.P. México.

<sup>2</sup> Instituto de Química Aplicada, Universidad del Papaloapan, campus Tuxtepec, Circuito Central 200, Parque Industrial, Tuxtepec, 68301, México.

<sup>3</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnología, UNAM, Apdo. Postal 2681, C.P. 22800, Ensenada, B.C., México

Autor a contactar: [mizraim.granados@ipicyt.edu.mx](mailto:mizraim.granados@ipicyt.edu.mx).

**Palabras clave:** Mecanoquímica, Renio, Carburo, Síntesis, Caracterización.

**Resumen.** La investigación en el área de síntesis de materiales se ha enfocado en los últimos tiempos hacia la mejora de las propiedades mecánicas, químicas y físicas de los materiales. La mecanoquímica es una rama de la química que relaciona los cambios químicos y fisicoquímicos de sustancias en todos los estados de agregación por efecto de la energía mecánica [1]. En 1971, Popova y Boiko [2] reportaron la síntesis de carburo de renio (ReC) a partir de renio metálico y grafito en condiciones de moderada presión (6 GPa) y alta temperatura (800 °C). En 2009, Juárez-Arellano *et al.* [3] reportaron la síntesis de carburo de renio con estequiometría  $\text{Re}_2\text{C}$  utilizando la técnica de calentamiento laser en celdas de diamante en condiciones de alta presión (10-70 GPa) y alta temperatura (1000-3727 °C). En 2010, Zhao *et al.* [4] reportaron la síntesis de  $\text{Re}_2\text{C}$  pero en condiciones de presión moderada (2-6 GPa) y alta temperatura (600-1600 °C). En 2011, Soto *et al.* [5] obtuvieron películas de Re + C por el método de deposición laser pulsada, aunque no mostraron evidencias que confirmara la formación de carburo de renio ( $\text{ReC}_x$ ). Se ha encontrado escasa información bibliográfica con respecto a la síntesis de carburo de renio y no hay hasta el momento reportes de la síntesis de este material en condiciones de baja temperatura y presión atmosférica. En este trabajo experimental se reporta por primera vez (hasta donde sabemos) la síntesis de polvos de ReC en condiciones ambientales por molienda mecánica en un tiempo de 10.6 h utilizando un molino de bolas planetario. La síntesis se realizó partiendo de elementos puros y carburo de tungsteno como material de molienda. Los productos se caracterizaron por difracción de rayos-X (XRD), análisis termogravimétrico (TGA), microscopía electrónica de barrido (SEM), espectroscopía por dispersión de energía (EDS), y microscopía electrónica de transmisión (TEM).

**Agradecimientos.** Agradecemos al CONACYT por la beca a MGGF y el apoyo a través del proyecto CB-2010-01151551. De la misma forma también al Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica (IPICYT) y a la Universidad del Papaloapan, campus Tuxtepec, por el acceso a sus instalaciones para la síntesis y caracterización de los materiales.

### Referencias

1. Heinicke, G., *Tribochemistry* (Akademie-Verlag: Berlin).
2. Popova, S., Boiko, L., 1971, *H.T.H.P.*, **3**, 237.
3. Juárez-Arellano, E.A., Winkler, B., Friedrich, A., Bayarjargal, L., Milman, V., Yan, J., Clark, S., 2009, *J. Alloy Compd.*, **481**, 577.
4. Zhao, Z., Cui, L., Wang, L., Xu, B., Liu, Z., Yu, D., He, J., Zhou, X., Wang, H., Tian, Y., 2010, *Cryst. Growth Des.*, **10**, 5024.
5. Soto, G., Tiznado, H., Diaz, J., Samano, J., Reyes, A., 2011, *Thin Solid Films*, **519**, 3236.

## Procesado óptimo de cerámicas tipo bctz ( $\text{Ba}_{0.9}\text{Ca}_{0.1}\text{Ti}_{0.9}\text{Zr}_{0.1}\text{O}_3$ )

A. Reyes-Montero<sup>1\*</sup>, R. López<sup>2</sup>, M.P.Cruz<sup>3</sup>, L. Pardo<sup>4</sup>, A. M. González<sup>5</sup>, M.E.Villafuerte-Castrejón<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito Exterior S/N, A.P. 70-360, México D.F., México.

<sup>2</sup>Centro de Ciencias Aplicadas y Desarrollo Tecnológico, Universidad Nacional Autónoma de México, A.P. 70-186, Coyoacán, México D.F., México.

<sup>3</sup> Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, Km. 107, Carretera Tijuana-Ensenada, C.P. 22800, Ensenada, B. C. México.

<sup>4</sup>Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (ICMM-CSIC), c/ Sor Juana Inés de la Cruz 3, Cantoblanco, 28049-Madrid, España.

<sup>5</sup>Escuela Universitaria de Ingenieros Técnicos de Telecomunicación (EUITT), Universidad Politécnica de Madrid (UPM), 28031 Madrid, España.

Autor a contactar: ingaremo@gmail.com

**Palabras clave:** Ferroeléctrico, Piezoelectrico, Método de Pechini, Estado Sólido, DRX.

**Resumen.** En los últimos años los materiales piezoelectricos libres de plomo [1-2] se han sintetizados a través de diferentes métodos. Con el método cerámico, uno de los más usados, se ha logrado obtener un tamaño de grano homogéneo, dando por resultado parámetros piezoelectricos y ferroelectricos aceptables en comparación a los reportados de  $\text{BaTiO}_3$  [3]. Sin embargo, este procesos involucra el uso de elevadas temperaturas (>1400°C) y largos periodos de molienda (>12 h) [4-5]; condiciones de costos muy elevados para la industria.

En este trabajo las cerámicas tipo BCTZ ( $\text{Ba}_{0.9}\text{Ca}_{0.1}\text{Ti}_{0.9}\text{Zr}_{0.1}\text{O}_3$ ) se sintetizaron por el método de Pechini y se sinterizaron a diferentes temperaturas. La caracterización por DRX de los polvos obtenidos a 700°C durante 1h mostró una estructura tipo perovskita correspondiente a la fase  $\text{BaTiO}_3$ . Así mismo, se reporta el efecto que tiene el tamaño de grano y las condiciones de sinterización sobre los parámetros piezoelectricos y ferroelectricos en las cerámicas densas. Las muestras sinterizadas a 1350°C (2h) mostraron:  $d_{33}=315$  pC/N,  $-d_{31}=137$  pC/N,  $k_p=50\%$ ,  $2P_r=22.56$   $\mu\text{C}/\text{cm}^2$  and  $2E_c=3.38$  kV/cm, mientras que las sinterizadas a 1275°C (5h) exhibieron:  $d_{33}=390$  pC/N,  $-d_{31}=143$  pC/N,  $k_p=50\%$ ,  $2P_r=23.30$   $\mu\text{C}/\text{cm}^2$  and  $2E_c=4.07$  kV/cm; ambas muestras con un tamaño de grano aproximado de  $\approx 15\mu\text{m}$ . La elevada respuesta piezoelectrica obtenida para estos materiales tipo BCTZ se debe al elevado grado de polarización que se tiene en un nivel local promovido por el incremento en el tamaño de grano.

**Agradecimientos.** Los autores agradecen al proyecto CONACYT (CB-2001-01; 166108) y PAPIT-DGAPA UNAM (IN116610-3) por el apoyo económico. L. Pardo agradece el apoyo del proyecto CSIC-PIE 201060E069.

### Referencias

1. Saito Y, Takao H, Tani T, Nonoyama T, Takatori K, Homma T, et al. Lead free piezoceramics. *Nature* 2004;432:84–7.
2. J. Rödel, W. Jo, K.T.P. Seifert, E.M. Anton, T. Granzow and D. Damjanovic. Perspective on the development of lead-free piezoceramics *J. Am. Ceram. Soc.*, 92 (2009) 1153.
3. S.F. Shao, J. L. Zhang, Z. Zhang, P. Zheng, M. L. Zhao, J. C. Li and C. L. Wang. High piezoelectric properties and domain configuration in  $\text{BaTiO}_3$  ceramics obtained through solid-state reaction route. *J. Phys. D: Appl. Phys.* 41, 125408 (2008)
4. Y. Cui, X. Liu, M. Jiang, X. Zhao, X. Shan, W. Li, C. Yuan, C. Zhou Lead-free ( $\text{Ba}_{0.85}\text{Ca}_{0.15}$ )( $\text{Ti}_{0.9}\text{Zr}_{0.1}$ ) $\text{O}_3$ - $\text{CeO}_2$  ceramics with high piezoelectric coefficient obtained by low-temperature sintering. *Ceram. Intl.* 38 (2012) 4761–4764.
5. Pan Whang, Yongxiang Li, Yiqing Lu. Enhanced piezoelectric properties of ( $\text{Ba}_{0.85}\text{Ca}_{0.15}$ ) ( $\text{Ti}_{0.9}\text{Zr}_{0.1}$ ) $\text{O}_3$  lead-free ceramics by optimizing calcinations and sintering temperature. *J Eur. Ceram. Soc.* 2011;31: 2005-12.

## Propiedades ópticas de la solución sólida $\text{Sr}_{1-1.5(x+y)}\text{Pr}_y\text{Yb}_x\text{TiO}_3$ .

G. López-Pacheco<sup>1</sup>, R. López-Juárez<sup>2</sup>, E. Barrera-Calva<sup>3</sup>, M. E. Villafuerte-Castrejón<sup>1</sup>, E. González<sup>3,\*</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito Exterior S/N, A.P. 70-360, México D.F., Mexico

<sup>2</sup> Centro de Ciencias Aplicadas y Desarrollo Tecnológico, Universidad Nacional Autónoma de México, A.P. 70-186, Coyoacán, México D.F., México.

<sup>3</sup> Departamento de Ingeniería de Procesos e Hidráulica, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, A.P. 55-534, 09340 México D.F., México.

\* Autor a contactar; e-mail: fgg@xanum.uam.mx.

Palabras clave:  $\text{SrTiO}_3$ , lantánidos trivalentes, conversión descendente, luminiscencia, difracción de rayos X.

Resumen. Las soluciones sólidas de compuestos con estructura perovskita con iones lantánidos trivalentes dan lugar a una amplia gama de aplicaciones tecnológicas relacionadas con catálisis, propiedades ópticas, magnéticas y eléctricas. En particular, sus propiedades ópticas se deben a que en forma trivalente, estos iones presentan diagramas de energía muy ricos en niveles. Una de sus posibles aplicaciones es la conversión de luz de cierta longitud de onda a otra que resulte de interés, por ejemplo en celdas solares fotovoltaicas <sup>[1]</sup>. Para ello, se requieren materiales que absorban los fotones de la parte más energética de dicho espectro y que los dividan en dos de menor energía, para así alcanzar el óptimo aprovechamiento de la energía. Para investigar materiales con las características descritas, en este trabajo se prepararon soluciones sólidas de  $\text{SrTiO}_3$  (STO) con los iones lantánidos  $\text{Pr}^{3+}$  e  $\text{Yb}^{3+}$  para diferentes composiciones mediante el método de Pechini, se caracterizaron por difracción de rayos X y se resolvió la estructura por el método de Rietveld. A partir de espectros de absorción se pudo determinar un valor de la banda prohibida del STO de aproximadamente 3.3 eV lo cual lo hace un importante candidato para absorber fotones de la región más energética del espectro solar. Se presentan los resultados del análisis de los espectros de luminiscencia (emisión y excitación). La transferencia de energía del STO y el  $\text{Pr}^{3+}$  al  $\text{Yb}^{3+}$  está presente. A partir de estos resultados se puede decir que el STO podría, eventualmente, aprovechar una región extendida del espectro solar que redundaría en un aumento de la eficiencia de celdas fotovoltaicas.

**Agradecimientos.** Los autores agradecen al CONACyT por el apoyo brindado a través de los proyectos CB-2010-01 154962, CB-2011-1 No.166108 e INFR-2011-1-163250. Un agradecimiento especial al LDRX (T-128) UAM-I por las mediciones de DRX.

### Referencias

1. Trupke, T., Green, M.A., & Würfel, P., 2002, *J. Appl. Phys.*, 92, 1668.

## Síntesis y caracterización del superconductor $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$

Cecilia Rodríguez Hinojosa, Eligio Miguel Ruiz Abrego, Rosa Ma. Estrada Martínez Juan Pablo Salina Estevane, Ricardo Obregón Guerra\*

Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas, Universidad Autónoma de Nuevo León, Nuevo León, México.

Autor a contactar: e-mail: ricardo.obregonr@uanl.edu.mx.

Palabras clave: Superconductividad, Difracción de rayos X, refinamiento.

El interés tecnológico del óxido cerámico superconductor  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  es su explotación comercial, por ejemplo en forma de cintas superconductoras para el transporte de corriente eléctrica, donde es capaz de transportar altas densidades de corriente. En este trabajo se realizó la síntesis de la fase de superconductor  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  Partiendo de óxido de Itrio, óxido de Bario y óxido de cobre, como precursores químicos. Se utilizó el método de reacción de estado sólido. El producto se caracterizó por difracción de rayos X por el método de polvo. El difractograma fue refinado mediante el método Rietveld utilizando el programa TOPAS.

Los resultados de la Difracción de Rayos X y la observación del efecto Meissner-Ochsenfeld confirma la obtención de la fase cristalina superconductor. Se realizaron pruebas de conducción eléctrica utilizando el método de las cuatro puntas, midiendo la resistencia eléctrica del material  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  a diferentes temperaturas.

### Referencias

1. J. González G, Ana M Osorio A., Ángel Bustamante D., Manuel Béjar R., Rev. Soc. Química, Peú 77 (4) 2011.
2. M. Cyrot, and D. Pavuna. Introduction to Superconductivity and High-Tc Materials. Singapore: World Scientific Publishing Co, 1992.
3. M. K. Wu, J. R. Ashburn, and C. J. Torng. «Superconductivity at 93 K in a New Mixed-Phase Y-Ba-Cu-O Compound System at Ambient Pressure.» PHYSICAL REVIEW LETTERS, 1987: 908-910.
4. Tinkham, Michael. Introduction to superconductivity. New York: McGraw-Hill Book Co., 1996.

## Efecto del pH en la pre-nucleación de zeolitas, un estudio DFT

Landi Anahí Gallegos Jiménez<sup>1,\*</sup>, J. Miguel Mora Fonz<sup>2</sup>

<sup>1\*</sup> Universidad Juárez Autónoma de Tabasco

<sup>2</sup> Universidad Juárez Autónoma de Tabasco.

Autor a contactar: gelianny6@hotmail.com

Palabras clave: Zeolita, pH, prenucleación, DFT, simulación.

Resumen. Se realiza un estudio teórico del mecanismo de pre-nucleación en el proceso de síntesis de zeolitas, empleando la Teoría de los Funcionales de la Densidad (DFT). Se emplea el código NWChem, utilizando el método B3LYP/6-31G(d), para realizar cálculos de estructura electrónica y obtener la energía para la polimerización por condensación de dímeros, trímeros, tetrámeros y anillos a partir de los monómeros Si(OH)<sub>4</sub> y Al(OH)<sub>4</sub> en fase gaseosa y solución. El objetivo de este trabajo es analizar el efecto del pH y buscar los posibles estados de equilibrio durante la pre-nucleación.

Agradecimientos. A mi asesor J. Miguel Mora Fonz, por la dedicación, atención y paciencia así como por las pertinentes sugerencias debida a su experiencia, a mis compañeros de química por su tiempo para ayudarme en este campo de investigación nuevo para mí, a mi familia y amigos por apoyarme siempre, a Dios por poner en mi camino a todas estas personas y ayudarme en cada reto presentado.

### Referencias

1. C. S. Cundy and P. A. Cox, "The Hydrothermal Synthesis of Zeolites: History and Development from the Earliest Days to the Present Time," 2003.
2. C. S. Cundy and P. A. Cox, "The hydrothermal synthesis of zeolites: Precursors, intermediates and reaction mechanism," vol. 82, pp. 1–78, 2005.
3. M. N. Rojas, E. M. González y J. C. Ceresuela, "Síntesis de Monocristales Milimétricos de.pdf." vol. 9, 2008 .
4. M. Navarro and E. Mateo, "Factores que Influyen en la Síntesis de Monocristales Milimétricos de Silicalita-1," revista de la sociedad española de mineralogía, pp. 167–168, 2010.
5. K. Barquist and S. C. Larsen, "Microporous and Mesoporous Materials Chromate adsorption on bifunctional, magnetic zeolite composites," Microporous Mesoporous Mater., vol. 130, no. 1–3, pp. 197–202, 2010.
6. J. Gu, Y. Wu, Y. Jin, and J. Wang, "Hydrothermal incorporation of Ce(La) ions into the framework of ZSM-5 by a multiple pH-adjusting co-hydrolysis," J. Porous Mater., vol. 20, no. 1, pp. 7–13, Feb. 2012.
7. Q. Hou, W. G. Lin, F. Wei, J. Y. Yang, and J. H. Zhu, "Utilizing acid immersion to elevate the performance of zeolite in liquid adsorption of N'-nitrosornicotine (NNN)," Solid State Sci., vol. 16, pp. 143–151, Feb. 2013.
8. E. A. Khan, E. Hu, and Z. Lai, "Microporous and Mesoporous Materials Preparation of metal oxide / zeolite core – shell nanostructures," Microporous Mesoporous Mater., vol. 118, no. 1–3, pp. 210–217, 2009.
9. M. Khatamian, M. S. Oskoui, and M. Darbandi, "Microporous and Mesoporous Materials Synthesis and characterization of aluminium-free ZSM-5 type chromosilicates in different alkaline systems and investigation of their pore structures," Microporous Mesoporous Mater., vol. 182, pp. 50–61, 2013.
10. S. F. Mousavi, M. Jafari, M. Kazemimoghadam, and T. Mohammadi, "Template free crystallization of zeolite Rho via Hydrothermal synthesis: Effects of synthesis time, synthesis temperature, water content and alkalinity," Ceram. Int., vol. 39, no. 6, pp. 7149–7158, 2013.



## Estudio de los estados de transición en la pre-nucleación de zeolitas

David Álvarez Torres<sup>1</sup>, José Miguel Mora Fonz<sup>\* 2</sup>

<sup>1</sup>Universidad Juárez Autónoma de Tabasco

<sup>2</sup> Universidad Juárez Autónoma de Tabasco

Autor a contactar: e-mail: jmiguel.mora@ujat.mx

Palabras clave: Zeolitas, pre-nucleación, modelación molecular.

Resumen. En este trabajo presentamos un estudio de los estados de transición en reacciones durante la pre-nucleación de zeolitas. Para dicho objetivo utilizaremos: técnicas de química computacional, basados en la teoría del funcional de la densidad (DFT). Se utilizará NWChem para la realización de cálculos de estructura electrónica y así obtener las energías de condensación de los precursores de zeolitas, Si(OH)<sub>4</sub> y Al(OH)<sub>4</sub>, en solución. Para así tener una idea de los posibles mecanismos, que involucran a dichos precursores, en la síntesis de zeolitas.

La importancia de este trabajo, es tener un mejor entendimiento, por tanto, mayor control en la síntesis de zeolitas. Como consecuencias, se pueden tener propiedades mejoradas de estos materiales, por ejemplo: intercambio iónico y tamizado molecular. Permitiendo este último, la obtención de nuevos procesos de separación selectiva.

**Agradecimientos.** Agradezco a las personas que me han apoyado para la realización de este trabajo.

### Referencias

1. Auerbach, S. M., Ford, M. H., & Monson, P. a. (2005). New insights into zeolite formation from molecular modeling. *Current Opinion in Colloid & Interface Science*, 10(5-6), 220–225. doi:10.1016/j.cocis.2005.09.012.
2. Cundy, C. S., & Cox, P. a. (2005). The hydrothermal synthesis of zeolites: Precursors, intermediates and reaction mechanism. *Microporous and Mesoporous Materials*, 82(1-2), 1–78. doi:10.1016/j.micromeso.2005.02.016.
3. Lim, I. H., Schrader, W., & Schüth, F. (2013). The formation of zeolites from solution – Analysis by mass spectrometry. *Microporous and Mesoporous Materials*, 166, 20–36. doi:10.1016/j.micromeso.2012.04.059.

## **Síntesis y propiedades estructurales del sistema $Ce_{1-x}Sm_xO_{2-\delta}$ depositado por rocío pirolítico ultrasónico, para celdas de combustible de óxidos sólidos.**

R. Martínez-Bautista\*, J. de D. Castro-Robles, C. Flores-Morales y J. A. Chávez-Carvayar.  
Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM. Ciudad Universitaria, 04510, México, D.F.

Palabras claves: SOFC, películas delgadas, rocío pirolítico ultrasónico.

Autor a contactar: rmb\_82\_40@hotmail.com

En este trabajo se presenta la síntesis y caracterización estructural de películas delgadas de ceria dopadas con samario,  $Ce_{1-x}Sm_xO_{2-\delta}$ ,  $x = 0, 0.10, 0.15, 0.20, 0.25$  y  $0.30$  mol. La obtención de las películas delgadas se llevó a cabo por la técnica de rocío pirolítico ultrasónico sobre sustratos de vidrio. Para la caracterización estructural y morfológica de los compuestos obtenidos se utilizaron las técnicas de difracción de rayos X (DRX), microscopía electrónica de barrido (MEB) y microscopía de fuerza atómica (MFA). Resultados obtenidos por DRX indicaron la presencia de fases únicas con estructura de la fluorita, con celdas unitarias en el intervalo de 5.39 a 5.46 nm. Con las micrografías obtenidas por MEB se observó una superficie homogénea de las películas delgadas de con tamaños de partícula de 62 hasta 100 nm. Con esta técnica, mediante cortes transversales de las muestras, se midieron los grosores de las películas que van de 100 a 1200 nm. A partir de MFA se obtuvo una rugosidad superficial en el intervalo de 8 a 100 nm.

## Síntesis asistida por microondas para la elaboración de electrolitos basados en $\text{Ce}_{1-x}\text{Re}_x\text{O}_{2-\delta}$ (Re=Sm, Gd) para Celdas de Combustible de Óxidos Sólidos de Temperatura Intermedia

P. Ramos-Alvarez<sup>1\*</sup>, R. López<sup>1</sup>, J.A. Chávez-Carvayar<sup>1</sup>.

1. Instituto de Investigaciones en Materiales UNAM

Autor a contactar ; e-mail: paomx99@yahoo.com.

Palabras clave: SOFC-IT, Síntesis Microondas, Electrolitos, Espectroscopía de Impedancia.

Resumen. Las Celdas de Combustible de Óxidos Sólidos, SOFC, tienen un gran potencial debido a que cuentan con una tecnología versátil, limpia y eficiente para la conversión de energía química en energía eléctrica <sup>[1]</sup>. El costo actual de los sistemas SOFC tiene un efecto restrictivo para un amplio rango de aplicaciones comerciales. Para ser económicamente competitivas, es necesario reducir considerablemente el costo de los materiales y la fabricación de los componentes utilizados en las mismas <sup>[2]</sup>. El óxido de cerio (ceria) y los óxidos de ceria dopados (ceria dopada) son óxidos de tierras raras que han sido ampliamente utilizados en aplicaciones de SOFC <sup>[3]</sup>. Diversos métodos han sido ampliamente utilizados para la preparación de ceria dopada de tamaño nanométrico como lo es la combustión, el sol-gel, la síntesis hidrotermal convencional y la síntesis hidrotermal asistida por microondas, la microemulsión y la precipitación. Las microondas van en aumento al ser utilizadas como una nueva ruta de síntesis en la Química del estado Sólido <sup>[4]</sup>. La síntesis por microondas nos da la oportunidad de completar síntesis en minutos y cuenta con diversas aplicaciones en el campo tanto académico como industrial. En este trabajo se ha logrado exitosamente la preparación de las cerámicas a base de ceria dopada con Samario y Gadolinio de tamaño nanométrico por medio de la síntesis por microondas. La caracterización estructural, morfológica y eléctrica, por medio de la Difracción de Rayos-X, la microscopía de barrido (SEM), microscopía de fuerza atómica (AFM) y microscopía electrónica de transmisión de alta resolución (HRTEM), así como del uso de la técnica de espectroscopía de impedancias (IES) han sido utilizadas en este trabajo, logrando observar una mejora en tiempo y por tanto en coste en la producción de los compuestos.

**Agradecimientos.** Agradecemos a la Dra. Ma. Elena Villafuerte por las facilidades otorgadas para la realización de las mediciones eléctricas, al Técnico Carlos Flores por el apoyo en Microscopía de Fuerza Atómica, al Dr. Omar Novelo por las micrografías de SEM y al Fis. Rafael Villaurrutia por las imágenes de HRTEM utilizadas en este trabajo.

### Referencias

1. Steele BCH, Heinzl A. 2001, Materials for fuel-cell technologies. Nature 414, p. 345–352.
2. Junichiro Otomo, Junya Oishi, Teruo Mitsumori, Hiroshi Iwasaki, Koichi Yamada. 2013, *International Journal of Hydrogen Energy*, Volume 38, Issue 33, , p. 14337-14347.
3. R.O. Fuentes, R.T. Baker, 2008, *International Journal of Hydrogen Energy*, Volume 33, Issue 13, J, p. 3480-3484.
4. Prado-Gonjal, J.; Morán, 2011, *E. An. Quím.*, 107(2), pp.129–136.

## Óptica de cristales líquidos birrefringentes

I. Ricardez Vargas<sup>1,\*</sup>, J. A. Carbajal Domínguez<sup>1</sup>, J. A. Bernal Arroyo, J. G. Segovia López

<sup>1</sup>División Académica de Ciencias Básicas, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco  
Carret. Cunduacán-Jalpa Km. 1, Col. La Esmeralda, C.P. 86690, Cunduacán, Tabasco

Autor a contactar: [ibis.ricardez@ujat.mx](mailto:ibis.ricardez@ujat.mx)

Palabras clave: Cristales líquidos, birrefringencia, polarización óptica, momento angular, campos ópticos.

Resumen. Los cristales líquidos han sido estudiados por largo tiempo debido a sus múltiples aplicaciones tecnológicas. Estos están usualmente compuestos de moléculas en forma de barras alargadas que fluyen como líquidos ordinarios, pero exhiben un gran rango de orden orientacional similar a los cristales sólidos [1]. Poseen propiedades ópticas de gran interés como son la birrefringencia y la anisotropía, lo que las hace particularmente ser objetos de estudio en el campo de la micromanipulación óptica, donde son atrapadas, rotadas y manipuladas a voluntad en un sistema experimental óptico [2]. En este trabajo se presenta de forma analítica, la física de la interacción entre micropartículas esféricas de cristal líquido nemático y campos ópticos polarizados, en un sistema estándar de trampas ópticas. Se obtienen interesantes resultados que describen la dinámica del sistema, en términos de los parámetros ópticos del campo y de las gotas birrefringentes.

Agradecimientos. Queremos agradecer al PROMEP por el financiamiento al proyecto UJAT-PTC-149, dentro del cual, el presente trabajo es uno de los resultados. También agradecemos a la Dra. Karen Volke, responsable del laboratorio de pinzas ópticas del Instituto de Física de la UNAM, por la facilitación de las muestras de cristal líquido empleadas en los experimentos.

### Referencias

- [1]. Y. Yang, P. D. Brimicombe, N. W. Roberts, M. R. Dickinson, M. Osipov, and H. F. Gleeson, "Continuously rotating chiral liquid crystal droplets in a linearly polarized laser trap," *Opt. Express* **16**, 6877-6882 (2008).
- [2]. G. Cipparrone, I. Ricardez-Vargas, P. Pagliusi, C. Provenzano, "Polarization gradient: exploring an original route for optical trapping and manipulation", *Opt. Express* **18** (6), 6008-6013 (2010).

## Síntesis y caracterización de electrolitos basados en ceria para su utilización en celdas de combustible de óxidos sólidos de temperatura intermedia.

P. Ramos-Alvarez<sup>1\*</sup>, J.A. Chávez-Carvayar<sup>1</sup>.

<sup>1</sup> Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México. Circuito Exterior, Ciudad Universitaria, Coyoacán, 04510, México, D. F.

\* Autor a contactar: paomx99@yahoo.com.

Palabras clave: SOFC-IT, Sol-Gel, Ceria dopada,

Resumen. La necesidad de una conversión de energía limpia y eficiente es un reto económico y tecnológicamente crítico. Las celdas de combustible son un camino promisorio de generación de energía eléctrica a partir de una variedad de combustibles de bajo impacto ambiental y alta eficiencia <sup>[1]</sup>, lo cual juega un rol importante a futuro en la generación de energía limpia. La alta temperatura de operación (~1000°C) en una Celda de Combustible de Óxidos Sólidos, SOFC, provee retos en cuanto a los materiales utilizados en ellas, los cuales deben cumplir con ciertos requerimientos en lo que se refiere a cuestiones mecánicas, de expansión térmica y de confiabilidad en cada uno de sus componentes, teniendo así la necesidad de crear nuevos materiales a la medida de éstas necesidades. Actualmente se apuesta por nuevos diseños para la realización de SOFC de Temperatura Intermedia (500-800°C) <sup>[2]</sup> incorporando electrolitos de CeO<sub>2</sub> dopados los cuales exhiben una conductividad iónica superior a la mostrada por el óxido de zirconio dopado con óxido de itrio (YSZ), material más utilizado en este tipo de celdas <sup>[3]</sup>. En este trabajo hemos sintetizado polvos nanométricos de las soluciones sólidas correspondientes a Ce<sub>1-x</sub>Ln<sub>x</sub>O<sub>2-δ</sub> (Ln = Sm, Gd) con  $x = 0, 0.05, 0.1, 0.15, 0.20, 0.25, 0.3$ , determinando sus distintas propiedades: Estructurales (Técnica de Difracción de Rayos-X), Morfológicas, de homogeneidad y pureza (Microscopía de Barrido, Análisis elemental por discriminación de energía, Microscopía de Transmisión, Microscopía de Fuerza Atómica) y de Transporte (Espectroscopía de Impedancias), obteniendo mejoras en conducción y estabilidad en los compuestos, lo cual los hace buenos candidatos para su posterior funcionamiento en una Celda de Combustible de Temperatura Intermedia.

Agradecimientos. Agradecemos a la Dra. Ma. Elena Villafuerte y al Dr. Rigoberto López por las facilidades otorgadas para la realización de las mediciones eléctricas y al Técnico Carlos Flores por el apoyo en Microscopía de Fuerza Atómica.

### Referencias

1. Haile SM. 2003, *Fuel cell materials and components*. *Acta Mater* 51, p. 5981–6000.
2. O'Hayre, Cha Colella, Prinz; 2006, *Fuel Cell Fundamentals* (Jhon Willey & Sons), Ch 8.6.
3. Pérez-Coll, D.; Núñez, P.; Frade, J.R.; Abrantes, 2003, *J.C.C.; Electrochim. Acta*, 48, p. 1551-7.

## Estudio sobre la estructura cristalina y propiedades eléctricas de la solución sólida $Gd_{3-x}Y_xTaO_7$

J. Francisco Gómez-García<sup>1,\*</sup>, G. Tavizón<sup>1</sup>, L. Bucio<sup>2</sup>, A. Durán<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Depto. de Física y Química Teórica, Facultad de Química, UNAM.

<sup>2</sup> Depto. de Estado Sólido, Instituto de Física, UNAM.

<sup>3</sup> Depto. de Materiales Avanzados, Centro de Nanociencias y Nanotecnología, UNAM

\* Autor a contactar: gogf840526@gmail.com

Palabras clave: weberita, ferroeléctrico, estructura cristalina, solución sólida, momento dipolar

Resumen. La estructura tipo weberita, con fórmula general  $Ln_3BO_7$  (con B como un catión pentavalente y Ln trivalente), puede adoptar una estructura no centrosimétrica misma que podría mostrar propiedades ferroeléctricas<sup>1</sup>. Se ha reportado que estas propiedades se deben a la distorsión que presentan los poliedros dentro de la celda unitaria y que la magnitud de esta distorsión se refleja directamente en la temperatura de transición<sup>2</sup>. En este trabajo mostramos las propiedades eléctricas de una solución sólida cuyos extremos de composición presentan una estructura tipo weberita, con el fin de correlacionar el efecto de la distorsión de la estructura con las propiedades eléctricas que presentan. Se realizó la síntesis de la solución sólida  $Gd_{3-x}Y_xTaO_7$  con  $0 \leq x \leq 3$ , por el método de estado sólido convencional. Se partió de los óxidos correspondientes a cada metal ( $Y_2O_3$ ,  $Gd_2O_3$  y  $Ta_2O_5$ , 99.9% Sigma-Aldrich) y la mezcla estequiométrica se calcinó en crisoles de alúmina a una temperatura de 1400°C por 48 h con dos moliendas intermedias, al final las muestras se sinterizaron a 1600°C por 8 h. La caracterización, por medio de difracción de rayos X de los polvos obtenidos, mostró la existencia de una única fase cristalina perteneciente a un sistema cristalino ortorrómbico con grupo espacial  $C22_2$ , reportado previamente para la estructura tipo weberita<sup>3</sup>. El análisis estructural por el método de Rietveld, realizado con el software GSAS<sup>4,5</sup>, reveló que los parámetros de red de los compuestos sintetizados poseen una dependencia lineal con la composición de itrio, lo que permite inferir que dichos compuestos forman parte de una solución sólida. Las mediciones de la resistencia eléctrica de los compuestos mostraron que la conductividad en altas temperaturas (400 a 600°C) es consecuencia de la migración de iones oxígeno, la cual se lleva a cabo de manera predominante en el interior de grano, sin embargo la concentración de portadores de carga en el material es tan baja que macroscópicamente se comporta como un dieléctrico. Los datos de capacitancia así como los de pérdida dieléctrica revelaron que algunos compuestos presentan un comportamiento asociado a una transición de fase ferroeléctrica-paraeléctrica alrededor de la temperatura ambiente. Dicha temperatura de transición no se comporta de manera lineal con la composición química por lo que se realizaron cálculos sobre el momento dipolar que pudiesen existir dentro de la celda unitaria de cada compuesto y así asociar éste con la temperatura de transición.

Agradecimientos. Este trabajo fue realizado gracias al apoyo financiero otorgado por el proyecto PAPIIT (UNAM) IN-214313 y la beca de estudios de doctorado número 223355 asignada por el CONACYT México. También agradecemos a la Q. I. Cecilia Salcedo Luna por su ayuda en la obtención de los patrones de difracción.

### Referencias

1. Halasyamani, P. S. & Poeppelmeier, K. R. Noncentrosymmetric Oxides. *Chem. Mater.* **10**, 2753–2769 (1998).
2. Cai, L. & Nino, J. C. Complex ceramic structures. I. Weberites. *Acta Crystallogr. B.* **65**, 269–90 (2009).
3. Wakeshima, M., Nishimine, H. & Hinatsu, Y. Crystal structures and magnetic properties of rare earth tantalates  $RE_3TaO_7$  (RE = rare earths). *J. Phys. Condens. Matter* **16**, 4103–4120 (2004).
4. Larson, A. C. and Von Dreele, R. B. *General Structure Analysis System (GSAS)*. Los Alamos National Laboratory Report LAUR 86-748. (1994).
5. Toby, B. H. EXPGUI, a graphical user interface for GSAS. *J. Appl. Crystallogr.* **34**, 210–213 (2001).

# **Carteles**

## **Sesión II**

## Segunda forma monoclinica de la chalcona: (*E*)-3-(4-fluorofenil)-1-fenilprop-2-en-1-ona

S. N. Arias-Ruiz<sup>1,\*</sup>, J. E. Antonio-Arias<sup>1</sup>, N. Romero-Ceronio<sup>1</sup>, C. E. Lobato-García<sup>1</sup>, L. F. Roa<sup>1</sup>, A. Gómez<sup>1</sup>, A. Mendoza<sup>2</sup>

<sup>1</sup> División Académica de Ciencias Básicas, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, AP 24, 86690 Cunduacán, Tab., México

<sup>2</sup> Centro de Química, Instituto de Ciencias, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, 72570 Puebla, Pue., México

\* Autor a contactar: [sairanallely\\_arias@hotmail.com](mailto:sairanallely_arias@hotmail.com)

Palabras clave: Catálisis ácida, Chalcona, Condensación de Claisen-Schmidt, Cristalografía, Polimorfo.

Resumen. El polimorfismo es la capacidad de un material sólido de existir en más de una forma o estructura cristalina, todas ellas con la misma composición de elementos químicos. La estructura cristalina del compuesto del título (figura 1), C<sub>15</sub>H<sub>11</sub>FO, se ha reportado anteriormente en 93 K [Jing, 2009]. Sin embargo, aquí se presenta la estructura de un segundo polimorfo monoclinico, que se explicará a 293 K [Arias, 2013]. El nuevo polimorfo cristaliza en el grupo espacial *P*2<sub>1</sub>/*c*, que es diferente del grupo de espacio anterior, *C**c*. Los parámetros de la celda del polimorfo monoclinico varían significativamente de la forma anterior [*a* = 24.926, *b* = 5.6940, *c* = 7.749 Å y β = 94.747°]. Además, anteriormente fueron reportadas dos más halo-chalconas: la 4-bromochalcona [Li et al., 1992; con parámetros de celda unitaria: *a* = 29.027, *b* = 7.26, *c* = 5.917 Å y β = 101.38°] y 4-chlorochalcone [Li & Su., 1994; con parámetros de celda unitaria: *a* = 8.211, *b* = 5.869, *c* = 25.291 Å y β = 99.18°]. Ambos compuestos muestran parámetros de celda similares a los polimorfos actuales de la chalcona-F, sin embargo, el grupo espacial es *P*2<sub>1</sub>/*c* para el derivado de Cl y *C**c* en la Br-chalcona, ambos caracterizados a temperatura ambiente.


	<b>Datos del Cristal</b>	<b>Recolección de datos</b>	<b>Refinamiento</b>
	C <sub>15</sub> H <sub>11</sub> O	T <sub>min</sub> = 0.993, T <sub>max</sub> = 0.999	R[F <sup>2</sup> > 2σ(F <sup>2</sup> )] = 0.045
	Mr = 226.24	22101 reflexiones medidas	wR(F <sup>2</sup> ) = 0.131
	Monoclinico, <i>P</i> 2 <sub>1</sub> / <i>c</i>	2276 reflexiones independientes	S = 1.01
	<i>a</i> = 8.6925 (4) Å	1471 reflexiones con I > 2σ(I)	2276 reflexiones
	<i>b</i> = 5.9266 (2) Å	R <sub>int</sub> = 0.044	155 parámetros
	<i>c</i> = 22.6456 (9) Å		Átomos de H parámetros restringidos
	β = 95.423 (4) °		Δρ <sub>max</sub> = 0.11 e Å <sup>-3</sup>
	V = 1161.41 (8) Å <sup>3</sup>		Δρ <sub>min</sub> = -0.11 e Å <sup>-3</sup>
	Z = 4		
Mo Kα radiación			
μ = 0.009 mm <sup>-1</sup>			
T = 293 K			
0.59x0.15x0.07 mm			

Figura 1. Cristales del compuesto y datos generales del cristal

El compuesto del título muestra una configuración *E* en el enlace C=C con el grupo *p*-fluorofenil opuesta al grupo 1-fenilcetona (figura 2). El ángulo de torsión del grupo *p*-fluorofenil al grupo 1-fenilcetona es 10.53°. El cristal de embalaje presenta dos interacciones intermoleculares de los enlaces de hidrógeno (tabla 1), C5-H5...O1<sup>i</sup> y C13-H13...F1<sup>ii</sup> con los códigos de simetría (i) -*x*+1, -*y*, -*z* y (ii) *x*+1, -*y*+3/2, *z*+1/2, respectivamente.

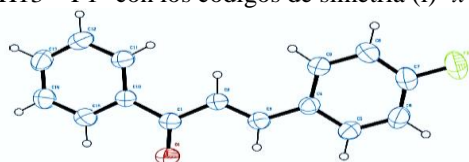


Figura 2. Rayos X del compuesto.

Tabla 1. Geometría de enlaces de hidrogeno (Å, °)

<i>D</i> -H... <i>A</i>	<i>D</i> -H	H... <i>A</i>	<i>D</i> ... <i>A</i>	<i>D</i> -H... <i>A</i>
C5-H5...O1 <sup>i</sup>	0.93	2.49	3.244 (2)	138
C13-H13...F1 <sup>ii</sup>	0.93	2.68	3.465 (2)	142

**Agradecimientos.** Los autores desean agradecer CONAcYT-Gobierno del Estado de Tabasco y la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco por el apoyo financiero a través de los proyectos TAB-2009-C18-122141 y UJAT-2011-C07-22, respectivamente.

### Referencias

- Jing, L.-H. (2009). Acta Cryst. E65, o2515.
- Arias-Ruiz, S., Romero, N., Lobato, C., Gómez, A., Mendoza, A. (2013). Acta Cryst. E69, o1694–o1695.
- Li, Z., Pa, F. & Su, G. (1992). Acta Cryst. C48, 712–714.
- Li, Z. & Su, G. (1994). Acta Cryst. C50, 126–127.



## Síntesis, caracterización estructural y análisis de los enlaces de hidrógeno de dos polioxovanadatos orgánicos.

Eduardo Sánchez-Lara, Aarón Pérez-Benítez, Irma Sánchez –Lombardo, Ángel Mendoza, Enrique González Vergara\*

Benemérita Universidad Autónoma de Puebla. 14 Sur y C.U. San Manuel. C. P. 72570. Puebla, Pue. México

Autor a contactar: [enrique.gonzalez@correo.buap.mx](mailto:enrique.gonzalez@correo.buap.mx)

**Resumen.** La química de los polioxometalatos representa un área de continuo interés sobre la cual se han desarrollado avances en diferentes campos de la ciencia. Gran parte de esta atención se ha enfocado a la ingeniería de materiales, nanotecnología, catálisis, materiales supramoleculares, ciencia de superficies, magnetoquímica, bioquímica y medicina<sup>[1,2]</sup>. En este trabajo se presenta la síntesis y la caracterización por difracción de monocristal de un nuevo compuesto de vanadio formulado como  $[(CH_3)_2NC_5H_4NH]_6[V_{10}O_{28}] \cdot 16H_2O$  en donde la estructura de difracción de rayos-X de monocristal permitió la localización de un nuevo ordenamiento de alto nivel supramolecular de moléculas de agua. El compuesto cristaliza en el grupo espacial P-1 del sistema triclinico con parámetros de celda de:  $a = 11.2785(3) \text{ \AA}$ ,  $b = 11.7777(3) \text{ \AA}$ ,  $c = 15.0569(3) \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 93.409(2)^\circ$ ,  $\beta = 102.469(2)^\circ$ ,  $\gamma = 100.691(2)^\circ$  y un factor-R= 3.15. La unidad asimétrica del compuesto está formada por la mitad del anión decavanadato, tres cationes orgánicos de las moléculas de 4-(N,N-dimetilamino)piridina, y 8 moléculas de agua de cristalización.

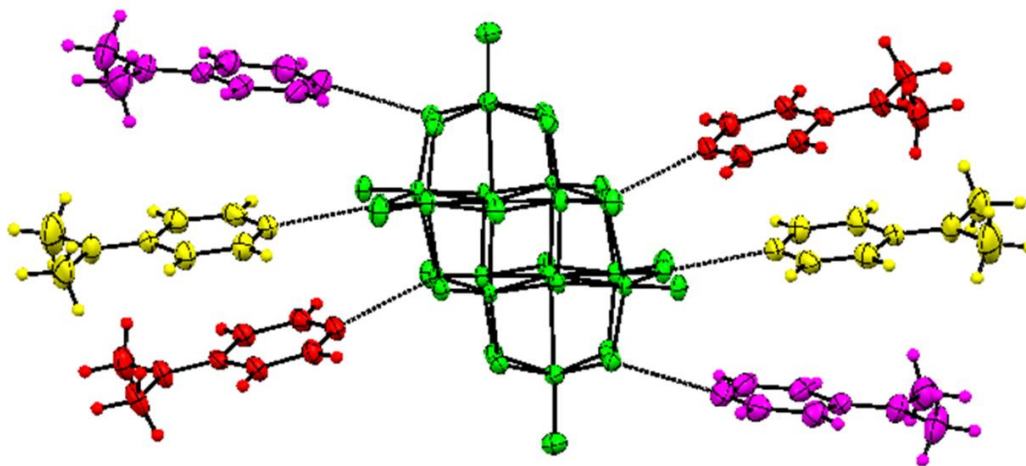


Figura 1. Arreglo de los cationes de 4-(N,N-dimetilamino)piridinio alrededor al anión decavanadato

**Agradecimientos:** Los autores agradecen al CONACYT, Vicerrectoría de Investigación y Posgrado (VIEP) y CUVyTT de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, por el apoyo financiero de este proyecto de investigación.

### Referencias

1. C. C. McLauchlan and D. C. Crans. Dalton Trans. 2013, 42, 11744.
2. D. Rehder. Dalton Trans. 2013, 42, 11749.

## Síntesis y caracterización de compuestos de coordinación de (1-metil-5-nitro-1H-imidazol-2-il)metil-carbamato con iones metálicos de transición. Arreglos supramoleculares en 2D

Ortiz Pastrana N.,\* Barba Behrens N.

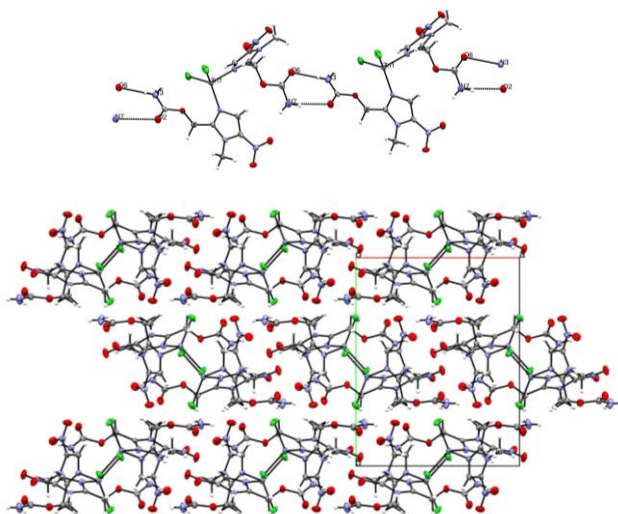
Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México

Autor a contactar: nay\_37@hotmail.com

Palabras clave: Difracción de rayos X de monocristal, Metales de transición, Compuestos con geometría tetraédrica y octaédrica, Monodentados y bidentados

### Resumen.

Se sintetizaron compuestos de coordinación con ronidazol (1-metil-5-nitro-1H-imidazol-2-il)metil-carbamato). Los metales empleados fueron sales de cobalto(II), níquel(II), cobre(II), zinc(II), cadmio(II) y mercurio(II) con cloruros, bromuros, nitratos y acetatos. Los cristales obtenidos se caracterizaron mediante técnicas espectroscópicas y espectrométricas: infrarrojo, análisis elemental, espectroscopía de UV y difracción de rayos X de monocristal. Se encontró que el ronidazol se coordina al átomo metálico tanto monodentado como bidentado, a través del nitrógeno imidazólico y por el oxígeno del grupo carbamato en el segundo caso. Los sistemas en los cuales cristalizaron todos los compuestos fueron monoclinicos y las geometrías adoptadas por los metales fueron tetraédricas, octaédricas y pirámide de base cuadrada. El análisis supramolecular permitió determinar que existen interacciones inter e intramoleculares en 2D.



[Zn(ron).Cl]: Interacciones

**Agradecimientos.** Al Dr. Rubén Alfredo Toscano por su ayuda con la resolución de estructuras de rayos X. Se agradece al CONACYT por la beca otorgada para los estudios de maestría y al financiamiento otorgado al proyecto CB-178851.

### Referencias

- 1: Alfaro I., López H., Mijangos E., Duarte A., Rodríguez G., Bernal M., Contreras R., Flores A., Barba N., *Polyhedron*, **67** (2014) 373-380.
- 2: Castro R., 2014, “*Química de coordinación de Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II), Cd(II), y Hg(II) con tinidazol, derivado de nitroimidazol con actividad biológica.*” Tesis de licenciatura, Universidad Nacional Autónoma de México, 2014.
- 3: Barrera V., Ramírez R., Rodríguez E., Barba N., *Journal of the Mexican Chemical Society*, **56**, (2012) 51-57.
- 4: Esparza A., Peña A., Téllez F., Vieto R., Esquivel R., Ramos I., Contreras R., Barba N., Flores A., *Journal of Molecular Structure*, **984** (2010) 409-415.

## Estudio Estructural de Difracción por Monocristal para $\text{Fe}(\text{NH}_4)_2(\text{SO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$

M. en C. Margarita Chávez Martínez<sup>1,\*</sup>, Q. I. M. Cecilia Salcedo Luna<sup>2</sup>, Est. Ernesto Quintero Rivera<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Universidad Autónoma Metropolitana Azcapotzalco, Área de Química

<sup>2</sup>USAI, Laboratorio de Rayos-X, Facultad de Química

Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria

<sup>3</sup>Estudiante de la carrera de Química, Facultad de Química

UNAM, Ciudad Universitaria, México, D. F.

Autor a contactar: cmm@correo.azc.uam.mx.

**Palabras clave:** Estudio, Estructural, Difracción, Monocristal,  $\text{Fe}(\text{NH}_4)_2(\text{SO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$

### Resumen

En el presente trabajo se realizó la síntesis<sup>[2,3]</sup> y estudio estructural de la sal doble  $\text{Fe}(\text{NH}_4)_2(\text{SO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  realizado por Difracción de Rayos – X de monocristal. Se logró determinar que, cada hierro (II) está unido a seis moléculas de agua. Cada  $\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_6$  se encuentra en los vértices de una celda monoclinica (Fig. 1) de grupo espacial  $\text{P}2_1/\text{c}$ <sup>[1]</sup>. Las dimensiones de la celda unitaria son:  $a = 6.242 \text{ \AA}$ ,  $b = 12.574 \text{ \AA}$ ,  $c = 9.279 \text{ \AA}$ . Los ángulos  $\alpha = 90^\circ$ ,  $\beta = 106.7^\circ$ ,  $\gamma = 90^\circ$ ;  $Z = 4$ ,  $V = 697.3 \text{ \AA}^3$ . En tanto en  $(\text{NH}_4)^{1+}$  y  $(\text{SO}_4)^{2-}$ , el N está unido a 4 H y el S está enlazado a 4 oxígenos. Así, dentro de la celda monoclinica hay 4 moléculas de  $\text{NH}_4^{1+}$  y 4 moléculas de  $\text{SO}_4^{2-}$  sulfato<sup>[4]</sup> cada una de ellas ocupando posiciones independientes, separadas y alternadas.

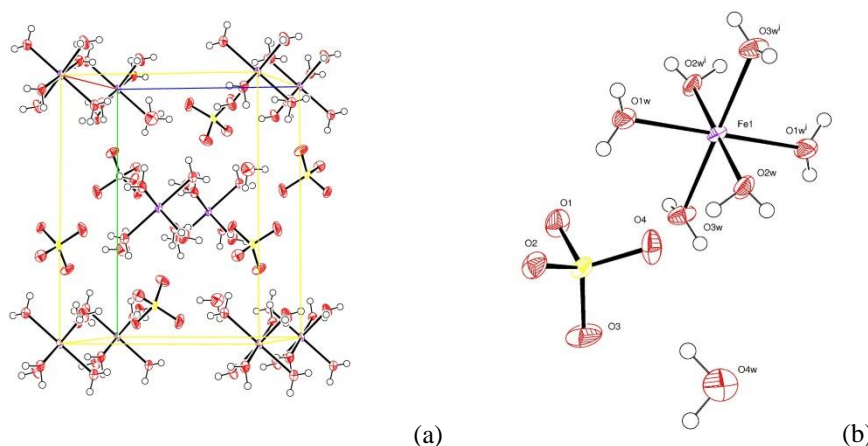


Figura No. 1 (a) la estructura monoclinica de la sal doble  $\text{Fe}(\text{NH}_4)_2(\text{SO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  y (b) las 6 moléculas de agua unidas al hierro, que es el átomo central; así como el azufre en el centro unido a 4 átomos de oxígeno

**Agradecimientos.** Se agradece ampliamente al fomento económico otorgado por UAM Azc. al proyecto de Investigación: “Cristaloquímica de materiales cerámicos”.

### Referencias

1. International Centre for Diffraction Data – Powder Diffraction File (ICDD-PDF), 2004.
2. Villa L., Baduri A. Obtención de monocristales por los métodos de evaporación y sal fundida, (2010) S. A. C. Tas. Perspectiva de la investigación sobre materiales en España en el siglo XXI. Volumen III. Servicio de Publicaciones de la Universidad de Vigo. X Congreso Nacional de Materiales. Vigo.
3. W. Suchanner, M. Molduvia, M. Karinka. Processing and properties of  $\text{Fe}(\text{NH}_4)_2(\text{SO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ , C. (1996), *Analytical*, **17** 1715-1723.
4. A. C. Kas. M. Study of Mohr salt. (2001), *Journ. Americ. Ceram. Soc.* **84** (2) 295-300

## Estudio de la Variedad de Componentes y Diatomeas en Arcilla Lachiguiri, Oaxaca, México

M. en C. Margarita Chávez Martínez<sup>1,\*</sup>, Q. I. M. Cecilia Salcedo Luna<sup>2</sup>, Est. Ernesto Quintero Rivera<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Universidad Autónoma Metropolitana Azcapotzalco, Área de Química

<sup>2</sup>USAI, Laboratorio de Rayos-X, Facultad de Química

Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria

<sup>3</sup>Estudiante de la carrera de Química, Facultad de Química

UNAM, Ciudad Universitaria, México, D. F.

Autor a contactar: cmm@correo.azc.uam.mx.

Palabras clave: Diatomeas, arcilla, Lachiguiri, Oaxaca, Montmorillonita.

### Resumen

Este estudio tiene la intención de dar a conocer la variedad de componentes y diatomeas en arcilla procedente del Municipio de Santiago Lachiguiri, Oaxaca, México. Este estudio se realizó mediante difracción de rayos -X y microscopía electrónica de barrido principalmente. La cantidad de preparación de muestras de material arcilloso fueron 50 de 66 estratos. Las muestras fueron separadas por tamaños de partícula. En las fracciones más gruesas se encontró mayor abundancia de Feldespatos, que pueden presentarse como Plagioclasas originadas por erupciones volcánicas, acompañadas de Calcita y Dolomita. En las fracciones de 37 micrómetros se determinó la presencia de Montmorillonita como el material arcilloso más abundante, con diferentes grados de cristalización, lo cual puede inferirse que parte de los minerales se concentran en ella. La cristalinidad de las montmorillonitas también puede asociarse a la edad; baja cristalinidad son más jóvenes y mayor cristalinidad más antiguas. En este depósito de arcilla Lachiguiri, la Montmorillonita más cristalina se encontró a mayor profundidad.

Santiago de Lachiguiri, se encuentra al sureste del Estado de Oaxaca, cerca de Sta. María Asunción Tehuantepec, en la costa del Pacífico. Probablemente este factor de cercanía al acantilado, aunado a factores climáticos provocó cierta concentración de sales ocasionando horizontes de crustáceos. Debido a esto, es como en el presente estudio se demuestra la existencia de fósiles de tamaño microscópico. Los restos de algas encontrados en las muestras del depósito arcilloso Lachiguiri pertenecen a *Cyclotella s.p.*<sup>[2,5,6]</sup> que es una Diatomea de 10 micras de tamaño. En este depósito de sedimentación lacustre se encontró gran variedad de diatomeas en formas diferentes, fósiles microscópicos, restos de algas, ostrácodos, crustáceos, conchas, de 30 a 350 micras. Otro espécimen de diatomea fue *Campilodiscus*<sup>clypeu[3,5,6]</sup> muy abundante en este depósito. En conclusión fue posible determinar los componentes más abundantes, como son los minerales, arcillas y diatomeas ó algas unicelulares cubiertas por estructuras llamadas valvas<sup>[4]</sup>, en el depósito arcilloso Lachiguiri. Los componentes determinados para la arcilla Lachiguiri fueron: dos tipos de Montmorillonita, Ortoclasa, Sulfito de magnesio hidratado, Cuarzo, Calcita, Estellerita, Alunogeno, Andesita, Mica y Hematita<sup>[1]</sup>.

**Agradecimientos.** Se agradece ampliamente al fomento económico otorgado por UAM Azc. al proyecto de Investigación: "Arcilla, caolines, minerales metálicos y no metálicos nacionales y extranjeros".

### Referencias

1. International Centre for Diffraction Data – Powder Diffraction File (ICDD-PDF), 2004.
2. L. Pentrakova and K. Su, M. A review of microbial structural en Clay Minerals, (2013) Clay Minerals **48**, 543-560.
3. Dong H.L., and Zhang G.X. Microbe-clay mineral interactions. (2009), American Mineralogist, **94**, 1505-1519.
4. P. Landais, R. Dohrmann and S. Kaufhold, Overview of the clay mineralogy studies presented at the clays in natural, (2012), Clay Minerals. **48-2**, 149-152.
5. Microscopía electrónica, una visión del microcosmos, M. J. Yacamán y J. R. Gasca, (1998), ed. UNAM.
6. Introducción a la microscopía electrónica aplicada a las ciencias biológicas, G. V. Nin y O. Echeverría, (2000), Fondo de Cultura Económica, UNAM.

## **Análisis cuantitativo de fases en los productos de la reacción de formación de policarboxilatos metálicos.**

E. Sánchez-González\*, K. Toriz, J. Rodríguez, L.F. del Castillo, J. Balmaseda

Departamento de Polímeros, Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad nacional Autónoma de México, México, D.F. C.P. 04510.

\* Autor a contactar: sanchez.gonzalez.eli@gmail.com

Palabras clave: Cristalografía, Polímeros de coordinación, Análisis cuantitativo, Equilibrio químico

Resumen. El equilibrio químico en la síntesis de polímeros de coordinación ha sido un tema poco abordado por la comunidad científica [1]. Sin embargo, profundizar en este aspecto permite orientar la síntesis hacia una composición óptima de productos. En las síntesis del 1,3,5-bencenotricarboxilato de cobre (CuBTC) [2] y en la del 1,4-bencenodicarboxilato de cobalto (CoBDC) [3,4] aparecen fases cuya proporción se requiere modificar. En el caso del CuBTC se obtiene cuprita como impureza [5], mientras que en la preparación del CoBDC aparece una nueva fase que no ha sido identificada. En este trabajo se propone una metodología para minimizar la proporción de cuprita y purificar el compuesto desconocido proponiendo un modelo termodinámico que conduce a la determinación de las constantes de equilibrio de los sistemas objeto de estudio. A partir de los patrones de difracción en polvos, se identificaron las fases conocidas de los productos de reacción y su composición de fases. El análisis cuantitativo no se realizó en las reacciones en que interviene el BDC debido a la presencia de la nueva fase. El análisis de fases permitió determinar la constante de formación del CuBTC. Los espectros en el infrarrojo presentan las bandas correspondientes a las vibraciones de tensión simétrica y asimétrica del carboxilato metálico corroborando la formación del polímero de coordinación. Las curvas termogravimétricas del producto que contiene CuBTC presentan dos eventos térmicos. El primero, fue asignado al proceso de desolvatación y el segundo, a la descomposición. Los por cientos de pérdida corroboran el análisis cuantitativo de fases. Para el caso de los polímeros de BDC, los termogramas muestran tres eventos: el de desolvatación, la descomposición del ligante y la oxidación de cierta cantidad de hidróxidos de cobalto. Este análisis, permitió obtener información complementaria de la composición de fases del producto. El aporte realizado al conocimiento del equilibrio de estas reacciones permite controlar la composición de los productos en ambas reacciones objeto de estudio.

**Agradecimientos.** A CONACyT por la beca asignada 289042, a los proyectos CONACyT 154626 y CONACYT-CNPq 174247 por el financiamiento parcial. A la Q.F.B. Damaris Cabrero Palomino, el Q. Miguel Ángel Canseco Martínez y la M. en C. Adriana Tejeda Cruz por el soporte técnico.

### **Referencias**

1. Hausdorf, S., Wagler, J., Mossig, R., & Mertens, F. O. R. L., 2008, *J. Phys. Chem. A*, **112**, 7567.
2. Stephen, S., & Chui, Y., 1999, *Science*, **283**, 1148.
3. Luo, F., Che, Y., & Zheng, J., 2009, *Crystal Growth & Design*, **9**, 1066.
4. Fu, Y., Ren, J., & Weng Ng, S., 2004, *Acta Crystallographica Section E*, **60**, m1507.
5. Lin, K., Adhikari, A. K., Ku, C., Chiang, C., & Kuo, H., 2012, *International Journal of Hydrogen Energy*, **37**, 13865.

## Decoloración de compuestos orgánicos usados en la industria textil mediante el uso de zeolitas naturales.

Jeannete Ramírez Aparico<sup>1,\*</sup>, Rafael Ramírez Bon<sup>1</sup>, Lizeth Rojas Blanco<sup>3</sup>.

<sup>1</sup>Centro de Investigación y estudios Avanzados del IPN, Libramiento Norponiente #2000, Fracc. Real de Juriquilla. C.P. 76230, Querétaro, México.

<sup>2</sup>Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, Avenida Universidad S/N, Col. Magisterial, Villahermosa, Tabasco 86040, México.

Autor a contactar: rrbon@qro.cinvestav.mx.

Palabras clave: Zeolita, Catálisis, Porosos, Ambientales, Residuales

Resumen. Las zeolitas naturales son minerales micro y meso porosos, con estructura de poro ordenada, compuestas por un grupo de aluminosilicatos hidratados altamente cristalinos, que al deshidratarse desarrollan un cristal ideal de estructura porosa con canales de diámetros de 4 a 14 Å<sup>1,2</sup>. Las zeolitas presentan valiosas propiedades fisicoquímicas, tales como intercambio catiónico, tamizado molecular, catálisis y adsorción<sup>3,4</sup>. El uso de las zeolitas naturales para aplicaciones ambientales está ganando terreno en nuevas investigaciones, principalmente debido a sus propiedades y bajo costo. La aplicación de zeolitas naturales para el tratamiento de aguas residuales se ha realizado y sigue siendo una técnica prometedora en los procesos de limpieza medioambiental. En este trabajo se realizó un estudio con diferentes zeolitas (naturales y sintética) para encontrar cual presenta mayor eficiencia en la decoloración de compuestos orgánicos, así también se establecen condiciones de trabajo que puedan mejorar la tasa de degradación de los colorantes.

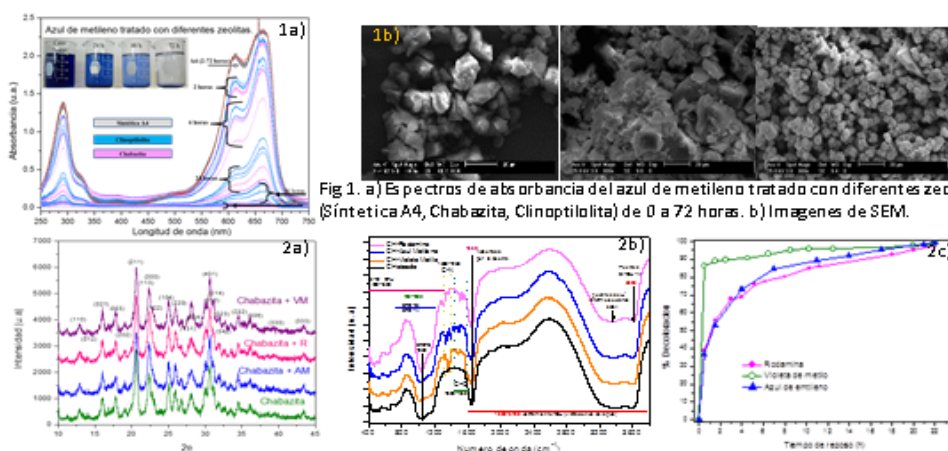


Fig 2. Gráficas de los colorantes violeta de metilo (VM), azul de metileno (AM) y Rodamina (R) tratados con zeolita natural (chabazita) a) DRX, b) Espectros de FT-IR, c) Porcentajes de decoloración.

Agradecimientos. M.C. Reina Araceli Mauricio Sánchez por las mediciones en FT-IR, M.C. Enrique Samaniego Benítez por las mediciones en DRX y SEM, Cinvestav-Qro., por sus laboratorios de Difracción de rayos X, Propiedades de Transporte Térmico, Lab. De Investigación y Desarrollo Tecnológico en Recubrimientos Avanzados. (LIDTRA), etc.

### Referencias

1. Ravikrishna Chatti, Sadhana S. Rayalu, Nidhi Dubey, Nitin Labhsetwar, Sukumar Devotta, 2007, *Solar Energy Materials & Solar Cells*, 91 pp. 180–190.
2. Jiří Čejka, 2012, Gabriele Centi, Joaquin Perez-Parientec, Wieslaw J. Roth, *Catalysis Today* 179, pp. 2–15.
3. Shaobin Wanga, 2010, Yuelian Peng, *Chemical Engineering Journal* 156, pp. 11–24.
4. Satoshi Inagaki, Hiroyuki Imai, Sho Tsujuchi, Hikaru Yakushiji, Toshiyuki Yokoi, Takashi Tatsumi, 2011, *Microporous and Mesoporous Materials* 142, pp. 354–362.

## **Análisis comparativo mediante el método de Rietveld de los difractogramas de Rx de un conjunto de medicamentos (similares y de patente)**

M. Solórzano<sup>1</sup>, R. Falconi<sup>1</sup>

<sup>1</sup>División Académica de Ciencias Básicas, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco. Cunduacan, Tabasco. 86690 A. Postal 24. MÉXICO

Autor a contactar; 092a5020@alumno.ujat.mx

Palabras clave: Medicinas, análisis de fases

Resumen. En este trabajo, se hace un estudio experimental para determinar los patrones de difracción de rayos x de un conjunto de cuatro medicamentos (w, x, y, z) (dos de ellos de precios bajos) en su presentación similares y de patente. Se utiliza un difractómetro D8 Advance Bruker con 35 kV y 20mA de 5 a 90 grados. Para el refinamiento de la estructura se utiliza el software FULPROOF. Se determina el tamaño de grano de cada medicamento mediante la ecuación de Scherrer y a partir de estos datos se hace un análisis comparativo de ambos medicamentos

Agradecimientos. DACB-UJAT

## Efecto Geométrico en la Detección Raman de Adsorbatos Orgánicos sobre Calcita

Salinas-Nolasco, M. F.

Laboratorio de Físicoquímica, Escuela Nacional de Conservación, Restauración y Museografía-INAH, Calle General Anaya 187 Col. San Diego Churubusco 04120 (Coyoacán) México, D.F., México.  
Tel. +52 55 5022 3440, +52 55 5022 3400

Palabras clave: Calcita, Raman, Adsorbato, Monocristal, Ácido Dicarboxílico

Resumen. Las asociaciones entre compuestos orgánicos e inorgánicos en la naturaleza son de suma importancia al momento de interpretar la conformación de diversos materiales biogénicos o biomiméticos [1-2]. La coordinación superficial entre el carbonato de calcio cristalino (calcita) y ciertos ácidos dicarboxílicos [3] ha demostrado una gran estabilidad fisicoquímica como sistema experimental, lo cual permite ser detectado a través de diversas técnicas de análisis. En la presente contribución, se prepararon soluciones acuosas de ácido malónico a diferentes concentraciones, para posteriormente impregnar monocristales de carbonato de calcio y detectar la influencia del sistema asociativo a través de la espectroscopía Raman en el plano (1 0 1 4) de calcita.

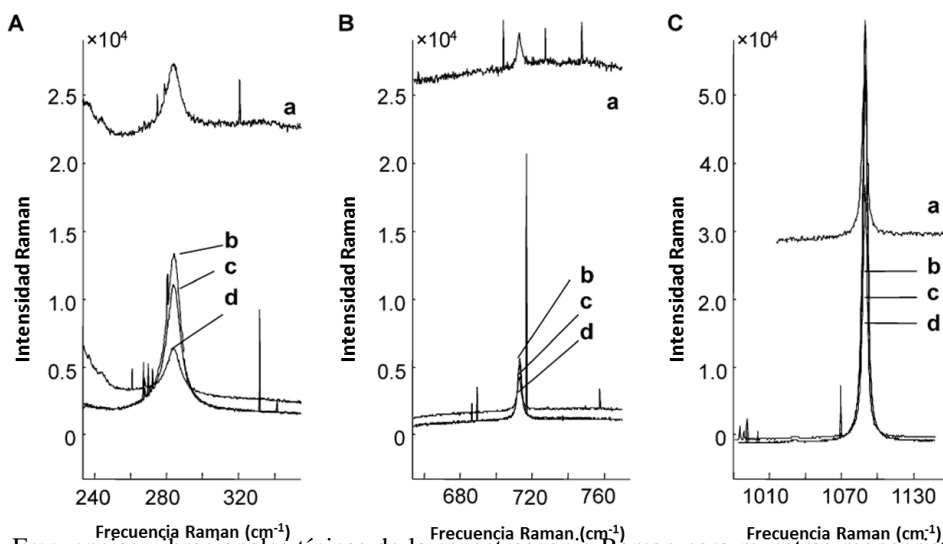


Figura 1. Frecuencias vibracionales típicas de la espectroscopía Raman para muestras monocristalinas de calcita en el plano (1 0 1 4): (A) 282,9 cm<sup>-1</sup>, (B) 714,7 cm<sup>-1</sup> y (C) 1089,2 cm<sup>-1</sup>, para (a) calcita, (b) calcita impregnado muestras con ácido malónico en  $5,0 \times 10^{-4}$  M y pH 6,0.

Por el refinamiento de las bandas vibracionales y los cambios notables de intensidades Raman, existe una relación de contribución estructural entre la adsorción del compuesto orgánico y la distribución cristalina de los átomos del carbonato de calcio. Este fenómeno se interpreta por la correlación entre el grupo puntual del ácido y la distribución geométrica de la estructura cristalina de la calcita.

### Referencias

1. L. Addadi, N. Berkovitch-Yellin, N. Domb, E. Gati, M. Lahav, L. Leiserowitz, Nature 296 (1982) 21.
2. S. Mann, D.D. Archibald, J.M. Didymus, T. Douglas, B.R. Heywood, F.C. Meldrum, N.J. Reeves, Science 261 (1993) 1286.
3. R.G. Compton, K.L. Pritchard, P.R. Unwin, G. Grigg, P. Silvester, M. Lees, W.A. House, J. Chem. Soc. Faraday Trans. 85 (1989) 4335.



## **Análisis cuantitativo de mezclas de fases mineralógicas con alto contenido de material amorfo. El caso de los adobes de la pirámide de Cholula.**

N. A. Pérez<sup>1\*</sup>, L. Bucio<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, México, D.F.

\* Autor a contactar: norari.perez@gmail.com

Palabras clave: Refinamiento Rietveld, Razón de Intensidades de Referencia, Amorfos, Minerales, Adobes, Resumen. Los ladrillos de tierra o adobes son parte del pasado y el presente en la cultura mexicana, desde tiempos inmemoriales han demostrado tener las propiedades y resistencia mecánica adecuados para un buen sistema constructivo. Los adobes se construyen a partir del suelo natural, un material abundante y por lo tanto potencialmente sostenible. El estudio cristalográfico de este tipo de materiales permite aumentar nuestra comprensión de la estructura y propiedades, esto se puede realizar al identificar el papel que juega cada mineral en las propiedades de los adobes integrando conocimientos de mineralogía y ciencia de materiales. Los adobes de la pirámide de Cholula están fabricados con suelos volcánicos y la presencia de materiales semicristalinos, amorfos y de distintos tamaños de gránulos les brinda propiedades especiales útiles para la ingeniería como, baja densidad, alto contenido de materia orgánica, alta porosidad, gran capacidad de retención de agua y límites de Atterberg altos, siendo los últimos muy importantes para un material de construcción dinámico [1-2]. La metodología que se utilizó involucra la identificación de los minerales que componen cada fase granulométrica de los adobes mediante observación por microscopía óptica de los agregados policristalinos, análisis petrográfico y difracción de rayos X (DRX) en un equipo Bruker D8 Advance con radiación Cu K $\alpha$  en un intervalo angular 2 $\theta$  de 6 a 90 grados. En el análisis cuantitativo de fases se determinó el contenido de material amorfo al calcular la relación entre material cristalino estándar y de la muestra de acuerdo al método combinado de refinamiento Rietveld con el de razón de intensidades de referencia (RIR), se utilizó una cantidad definida de óxido de zinc (ZnO) como material estándar cristalino [3-4]. A partir de este estudio cristalográfico fue posible identificar que la presencia de materiales amorfos y semicristalinos en la fase granulométrica más fina puede brindar las propiedades de cohesión necesarias para fabricar un material de construcción como el adobe.

Agradecimientos. Antonio Morales, Eréndira Martínez, Ángel Osornio por el apoyo técnico. Gracias a CONACyT por la beca de doctorado y al proyecto CB-2011/167624.

### **Referencias**

1. Horn, R., Taubner, H., Wuttke, M., Baumgartl, T., 1994, *Soil Till. Res.*, **30**, 187.
2. Prado, B., Duwiga, C., Hidalgo, C., Gómez, D., Yee, H., Prat, C., Esteves, M., Etchevers, J.D., 2007, *Geoderma*, **139**, 300.
3. Gualtieri, A., 2000, *J. Appl. Cryst.*, **33**, 267.
4. Bernasconi, A., Dapiaggi, M., Gualtieri, A., 2013, *J. Appl. Cryst.*, **47**, 136.

## **El desuso de Microquímica en la identificación de pigmentos provenientes de obras del patrimonio cultural de México.**

Víctor Santos Vasquez<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Coordinación Nacional de Conservación del Patrimonio Cultural  
Autor a contactar: lvlvics@gmail.com

Palabras clave: Microquímica, Pigmento, Patrimonio Cultural, Técnicas Analíticas

El empleo de la Microquímica, en el ámbito de estudio de material proveniente de obras del patrimonio cultural, ha ido en desuso debido al constante crecimiento de nuevas técnicas analíticas e instrumentales las cuales han aparecido en los últimos tiempos. El uso de la Microquímica y el empleo de la Microscopia pueden dar un panorama bastante completo del o de los pigmentos a identificar.

La importancia del uso de la Microquímica es el costo de análisis y en algunos casos la pronta identificación de los elementos, mediante la formación de los cristales obtenidos, de las reacciones involucradas.

La Microquímica utilizada en la identificación de pigmentos es una herramienta que sirve de soporte para la correcta selección de técnicas analíticas que ayuden a obtener de forma cuantitativa la composición de los materiales presentes en los pigmentos provenientes de obras del patrimonio cultural.

### **Agradecimientos.**

I.Q. Gerardo Villa, Subdirección de laboratorios de apoyo académico INAH, Coordinación Nacional de Conservación del patrimonio Cultural-INAH.

### **Referencias**

1. Nicholas Eastaugh, 2004, *Pigment Compendium*, British Library Cataloguing in Publication Data.
2. José L. Ojeda Sahagún, 1997, *Métodos de microscopia electrónica de Barrido en Biología*, Universidad de Cantabria
3. Harold Frederic Walton, Jorge Reyes, *Análisis químico e instrumental modern*, 1993, Editorial REVERTE S.A.
4. Daniel C. Harris. *Análisis Químico Cuantitativo*, 2007, Editorial REVERTE

## Generación de Hidroxiapatita por Molienda Mecánica a partir de Fosfato Tricálcico

E. Orozco<sup>2</sup>, L. Bucio<sup>2</sup>, A. Muciño<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup> Posgrado de Arquitectura, Universidad Nacional Autónoma de México. Unidad de Posgrado, Circuito de Posgrados de la UNAM.

<sup>2</sup> Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México. Circuito de la Investigación Científica s/n Ciudad Universitaria, 04510 México D.F., México.

\* Autor a contactar: [arq\\_mucino@hotmail.com](mailto:arq_mucino@hotmail.com)

Palabras clave: Hidroxiapatita, Molienda, Fosfatos de Calcio, Biocompatibilidad, Nanopartículas.

Resumen. La hidroxiapatita (HAp) es el principal elemento mineral en la formación de huesos y dientes de vertebrados. Se ha demostrado científicamente que las nanopartículas de HAp pueden aumentar significativamente la biocompatibilidad y bioactividad de los materiales artificiales. Ese no ha sido el único campo de aplicación de este material, ya que la inclusión de este a cementos dentales ha producido mejores compatibilidades en el ser humano, contribuyendo a la adaptación del cuerpo sin generar efectos secundarios como inflamaciones, ni alergias.

Durante la última década han sido más demandantes las nanopartículas de HAp por lo que se han dedicado grandes esfuerzos para desarrollar rutas de síntesis de este material, con la participación de la ciencia pero tratando que sean sustentables económicamente. A raíz de una investigación relacionada con aplicaciones del fosfato tricálcico (TCP) como aditivo en cementos destinados a la construcción, en este trabajo se reporta que mediante un proceso de molienda del TCP de uso comercial (de origen alimenticio), se puede generar HAp. Las reacciones químicas de los productos obtenidos a las 20 y 24 horas de molienda, se analizaron mediante un análisis cuantitativo por el método de Rietveld.

Partiendo de ésta investigación, se discuten las ventajas económicas que tiene el procedimiento y los posibles mecanismos que dan lugar a la transformación del TCP a HAp.

**Agradecimientos.** Al Dr. Eligio Orozco y al Dr. Lauro Bucio, por su estrecha colaboración y su apoyo para la realización de esta investigación.

### Referencias

1. Sadat-Shojai M, Khorasani M., Dinpanah-Khoshdargi E., Jamshidi A. Synthesis methods for nanosized hydroxyapatite with diverse structures. *Acta Biomaterialia* 2013;9:7591-7621.
2. Yeong K, Wang J, Ng S. Mechanochemical synthesis of nanocrystalline hydroxyapatite from CaO and CaHPO<sub>4</sub>. *Biomaterials* 2001;22:2705-12.
3. Zhou H, Lee J. Nanoscale hydroxyapatite particles for bone tissue engineering. *Acta Biomaterialia* 2011;7:2769-81.
4. Nasiri-Tabrizi B, Honarmandi P, Ebrahimi-Kahrizsangi R. Synthesis of nanosize single-crystal hydroxyapatite via mechanochemical method. *Mater Lett* 2009;63:543-6.
5. Krajewski A, Celotti G, Ravaglioli A, Toriyama M. Spectrometric study of the thermal evolution of mechanochemically prepared hydroxyapatite-based powders. *Cryst Res Technol* 1996;31:637-46.

## Caracterización de una hidroxiapatita carbonatada sintetizada por el método hidrotérmico

Moreno-Vargas Y<sup>1\*</sup>, <sup>1</sup>Vazquez- Hernández F, <sup>2</sup>Luna-Arias J.P. <sup>3</sup>Bucio-Galindo L

<sup>1</sup>Programa de Doctorado en Nanociencias y Nanotecnología, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional, México 07360, D.F., México.

<sup>2</sup>Departamento de Biología Celular, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional, México 07360, D.F., México.

<sup>3</sup>Instituto de Física de la Universidad Nacional Autónoma de México, México 04510, D.F., México.

\*Autor a contactar: [yanovamv20@outlook.com](mailto:yanovamv20@outlook.com)

Palabras clave: Hidroxiapatita, Biocerámicos, Hidroxiapatita carbonatada, Cerámicos, Hueso.

Resumen. La hidroxiapatita (HAp) pura con fórmula  $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$  pertenece a la familia cristalográfica de las apatitas. Este es el fosfato de calcio más utilizado como biomaterial con aplicaciones médicas y odontológicas<sup>i</sup>. La principal característica de la estructura de la hidroxiapatita es la de admitir un gran número de sustituciones y que junto con un tamaño de partícula a escala nanométrica<sup>ii</sup>, resulta en una reabsorbilidad mayor, lo que ayuda a la proliferación osteoblástica y odontoblástica ya que al controlar el grado de cristalinidad es posible asemejar a una hidroxiapatita biológica<sup>iii</sup>, mostrando formación de hueso<sup>iv</sup>. En este estudio se realizó la síntesis y caracterización de una HAp-carbonatada. Se utilizaron una HAp de SIGMA-ALDRICH como control y una HAp sintetizada por medio del método hidrotérmico. Se caracterizaron mediante difracción de rayos X (DRX), microscopía electrónica de transmisión (TEM) e Infrarrojo por transformada de Fourier FT-IR. Mediante los espectros se pudo observar que las muestras presentaban una fase extra a la fase de HAp. Dichos picos se localizan en los ángulos  $2\theta$  29.404, 35.964, 39.399 y 43.143° correspondientes al  $\text{CaCO}_3$ . Al modificar el procedimiento de síntesis de HAp se observó disminución de la fase de  $\text{CaCO}_3$ , así como aumentó en la anchura de los picos de DRX, lo que podría indicar una disminución del tamaño del cristal. Con TEM se observaron partículas cristalinas con un tamaño aproximado de 40 nm. FT-IR arrojó bandas referentes a los modos vibracionales de la HAp. Además de las bandas en 1626, 1421 y 1478  $\text{cm}^{-1}$  asignados a la vibración del  $\text{CO}_3^{2-}$ <sup>16,17</sup>. Se concluyó que gracias a las modificaciones realizadas en el procedimiento de la síntesis de la HAp, se pudo disminuir gradualmente el contenido de la fase de  $\text{CaCO}_3$  sin modificar la forma del cristal.

**Agradecimientos.** A. Morales Espino por los difractogramas realizados, al R. Hernández por su asistencia técnica en TEM y a José O. Flores Flores por el análisis FT-IR.

## Cambios en las fases minerales de cementos dentales tipo MTA a base de cemento Portland

A. Flores Ledesma<sup>1\*</sup>, Y.A. Moreno-Vargas<sup>2</sup>, L. Bucio<sup>3</sup>, F. Barceló Santana<sup>1</sup>,

<sup>1</sup> Doctorado en Ciencias. División de Estudios de Posgrado e Investigación, FOUNAM, Laboratorio de Biomateriales Dentales.

<sup>2</sup> Doctorado en Nanociencias y Nanotecnología, CINVESTAV-IPN

<sup>3</sup> Doctorado en Ciencias, Instituto de Física, UNAM

\* Autor a contactar: dra\_abyfl@hotmail.com

Palabras clave: Cambios estructurales, cementos dentales, MTA, cementos Portland

Resumen. El Mineral Trióxido Agregado (MTA) es un cemento dental compuesto por 80% cemento Portland y 20%  $\text{Bi}_2\text{O}_3$  [1] su principal uso en la reparación de perforaciones a nivel radicular y de furca, y como recubrimiento pulpar directo [2-3]. Al igual que el cemento Portland, el proceso de hidratación es un proceso sumamente complejo, que se caracteriza por una pérdida de cristalinidad [4]. La composición del MTA es silicato tricálcico (C3S), silicato dicálcico (C2S), aluminato tricálcico (C3A) y bismita ( $\text{Bi}_2\text{O}_3$ ). Se analizaron 4 cementos: *MTA Angelus* (cemento comercial), *MTA Exp* (cemento Portland blanco +  $\text{Bi}_2\text{O}_3$ ), *BV10* (MTA exp + 10% en peso de vidrio bioactivo) y *WO20* (MTA exp + 20% en peso de wollastonita). Los porcentajes agregados se basaron en pruebas previas. Cada uno de los cementos se hidrataron con agua desionizada en una relación de 0.33 ml de agua-1g de cemento [5-6]. Se prepararon pastillas de 10 mm de diámetro y 5 mm de espesor, las que fueron almacenadas en agua desionizada durante 7, 14, 21, 45 y 90 días. Después de estos tiempos, las pastillas fueron molidas con acetona en un mortero de ágata para homogenizar el cemento y obtener partículas finas para posteriormente ser evaluarlas por Difracción de Rayos X (DRX). Se usó un Difractómetro Bruker D8 Advance (Radiación  $\text{Cu K}\alpha_1$ ,  $\lambda = 1.5405 \text{ \AA}$ ), con un intervalo  $2\theta$  de 8 a  $70^\circ$ . Con DRX se realizó la identificación de fases minerales consultando los datos contenidos en el *Powder Diffraction File* del *International Centre for Diffraction Data* (ICDD). De igual manera se analizó la composición del Cemento Portland blanco empleado, de la wollastonita y del vidrio bioactivo. El Cemento Portland presentó además yeso dentro de su composición; mientras que la wollastonita presentó cuarzo. Se observó una pérdida de cristalinidad a lo largo del tiempo en los 4 cementos además de la formación de  $\text{CaSO}_4$ , mientras que en el *MTA Exp*, el *BV10* y *WO20* se detectó la presencia de ettringita partir de los 21 días de hidratación, fase que se forma al reaccionar el sulfato de calcio con el aluminato, cuyas reflexiones se ven aumentadas a los 90 días. Igualmente se identificó la presencia de portlandita,  $\text{Ca}(\text{OH})_2$  y bismita,  $\text{Bi}_2\text{O}_3$ . El cambio en la estructura de estos cementos es similar a la de los cementos Portland con la diferencia de la presencia de sillenita un mineral formado por el óxido de silicio y el de bismuto a partir de los 45 días.

**Agradecimientos.** Al Laboratorio de Refinamiento de Estructuras Cristalinas (LAREC) y al Técnico Antonio Morales.

### Referencias

1. Torabinejad M, Hong et al. Physical and chemical properties of a new root end filling material, *J. Endod*, 1995; 21(7):349-53.
2. Torabinejad M, Pitt FT et al. *Use of mineral trioxide aggregate or repair of furcal perforations*, *Oral Surg Oral Med Oral Pathol Oral Radiol Endod*, 1995; 79(6):756-63
3. Seung-Jong Lee, M. Torabinejad, et al. Sealing Ability of a Mineral Trioxide Aggregate for Repair of Lateral Root Perforations, *J. Endod*, 1993; 19(11):541-4
4. Puertas F. Vázquez T. *Hidratación inicial del cemento. Efecto de aditivos superplastificantes*. *Materiales de Construcción*, 2001; 51(262):53.61
5. Fridland M, Rosado R. *Mineral trioxide aggregate (MTA) solubility and porosity with different water-to-powder ratios*. *J Endod*, 2003; 29(12):814-7.
6. Fridland M, Rosado R. *MTA solubility: a long term study*. *J Endod*. 2005; 31(5):376-9

## Caracterización estructural, morfológica y térmica de mezclas biodegradables de polímeros base PET/APL y PET/Quitosano obtenidos por molienda mecánica

D. Palma-Ramírez<sup>1\*</sup>, A. M. Torres-Huerta<sup>2</sup>, M. A. Domínguez Crespo<sup>3\*</sup>

<sup>1</sup>Estudiante del PDTA del CICATA-IPN Altamira, Km. 14.5 Carretera Tampico-Puerto Industrial Altamira, Altamira, Tamps., México.

<sup>2,3</sup> Instituto Politécnico Nacional, CICATA-Altamira, Km. 14.5 Carretera Tampico-Puerto Industrial Altamira, Altamira, Tamps., México

autor a contactar: mdominguezc@ipn.mx

Palabras clave: Polímeros, Molienda mecánica, PET, Quitosano, APL

### Resumen.

Los polímeros degradables surgen como una alternativa para la reducción de los desechos plásticos que se acumulan en el medio ambiente [1]. El polietilentereftalato (PET), el tercer plástico más consumido en el mundo; es un poliéster termoplástico que se utiliza como materia prima para la fabricación de envases alimenticios [2]. Con el fin de reducir los desechos causados por la contaminación del PET, el mezclado de polímeros por el proceso de molienda mecánica es una alternativa a la síntesis química para la inserción cadenas en una macromolécula o bien, para mejorar la compatibilidad entre fases de polímeros antes de su procesamiento por extrusión [3-4]. Por lo cual, en este trabajo se realizó la modificación del PET grado industrial con dos polímeros biodegradables, el ácido poliláctico y Quitosano. Relaciones de PET/APL y Quitosano de 85/15 fueron introducidas en un molino de bolas de 5 cm<sup>3</sup> de capacidad en una relación medios de molienda/mezcla 50:1 a 300 rpm, se obtuvieron muestras de polvos para periodos de 10 horas hasta llegar a 50 horas. Posteriormente, se aumentaron las revoluciones a 800 rpm y se tomaron muestras cada 50 horas hasta llegar a 200 horas. La estructura química y el tamaño de cristal, la morfología y las propiedades térmicas de las mezclas fueron caracterizados por espectroscopia de infrarrojo (FTIR) y difracción de rayos X (DRX), microscopía electrónica de barrido (MEB) y calorimetría diferencial de barrido/termogravimetría (DSC/TGA).

El análisis de los resultados de FTIR sugieren que la energía del sistema no es lo suficientemente capaz de generar nuevos enlaces; por lo tanto, a partir de estos resultados se observa que se obtuvieron mezclas poliméricas con interacciones físicas, principalmente puentes de hidrógeno. La pérdida de la región cristalina acompañada de la disminución del tamaño de cristal se observó a partir de las 10 h de procesamiento. Asimismo, el tiempo de molienda influye en el comportamiento de térmico de las mezclas ya que la temperatura de cristalización se retarda conforme pasa el tiempo de molienda. A partir de microscopía electrónica de barrido (MEB) se logró detectar el efecto de soldadura que se presenta durante la molienda y la fractura provocada a consecuencia de los medios de molienda que conllevan a la reducción del tamaño inicial de las hojuelas.

### Agradecimientos.

Al CONACYT y al IPN por el apoyo otorgado a través de los proyectos CB2009-132660, CB2009-133618 y SIP20140164.

### Referencias

1. S. M. Lomakin, Thermal degradation of biodegradable blends of polyethylene with cellulose and ethylcellulose, *Thermochimica Acta* 521 (2011) 66–73.
2. C. Suryanarayana, *Mechanical alloying and milling*, Pergamon (2001) 18.
3. Luigi Vertuccio, et al., Nano clay reinforced PCL/starch blends obtained by high energy ball milling, *Carbohydrate Polymers*, 75 (2009) 172–179.
4. P. Mangiacapra, G. Gorrasi, A. Sorrentino, V. Vittoria, Biodegradable nanocomposites obtained by ball milling of pectin and montmorillonites, *Carbohydrate Polymers* 64 (4) (2006) 516-523.

## Estudio de envejecimiento acelerado de películas biodegradables de almidón-TiO<sub>2</sub>

D. Agüero-Valdez<sup>1</sup>, A. Aparicio Saguilán<sup>2</sup>, E. A. Juárez-Arellano<sup>3</sup>, J. Reyes Trujeque<sup>4</sup>, C. Fernando Márquez<sup>5, 6</sup>, M. Valera Zaragoza<sup>3\*</sup>

<sup>1</sup>División de Estudios de Posgrado, Universidad del Papaloapan, Circuito Central No. 200, Col. Parque Industrial, Tuxtepec, Oaxaca. C.P. 38301, México.

<sup>2</sup>Instituto de Biotecnología, Universidad del Papaloapan, Circuito Central No. 200, Col. Parque Industrial, Tuxtepec, Oaxaca C.P. 38301, México.

<sup>3</sup>Instituto de Química Aplicada, Universidad del Papaloapan, Circuito Central No. 200, Col. Parque Industrial, Tuxtepec, Oaxaca. C.P. 38301, México..

<sup>4</sup>Centro de Investigación en Corrosión, Universidad Autónoma de Campeche, Avenida Agustín Melgar s/n, Col Buenavista, San Francisco de Campeche, Cam. C.P 24039, México.

<sup>5</sup>Licenciatura en Ciencias Químicas, Universidad del Papaloapan, Campus Tuxtepec, Circuito central 200, Col. Parque Industrial, C.P. 68301, Tuxtepec, Oax., México.

Autor a contactar: [mvalera@unpa.edu.mx](mailto:mvalera@unpa.edu.mx)

Palabras clave: Montmorillonita, molienda mecánica, dióxido de titanio, cámara de envejecimiento.

Resumen. En los últimos años se ha estudiado el reforzamiento a polímeros naturales como el almidón para incrementar su desempeño mecánico [1]. Para ello, se han utilizado nanopartículas ya sea de morfología laminar o esférica. En este trabajo se presenta la caracterización por FT-IR, DRX y SEM de la arcilla montmorillonita (MMT) modificada por molienda mecánica así como la preparación y caracterización de películas de almidón-arcilla y almidón-dióxido de titanio las cuales fueron sometidas a una cámara de envejecimiento. Algunos resultados de la caracterización de la arcilla modificada por molienda mecánica se muestran en la Figura 1, de la misma manera se discuten los resultados de las películas de almidón-TiO<sub>2</sub> sometidas a la cámara de envejecimiento. La molienda mecánica puede generar efectos de separación laminar y rompimiento estructural en la arcilla [2]. Una evolución de la fase rutilo en función del tiempo de envejecimiento fue observada en las películas irradiadas (Figura 2).

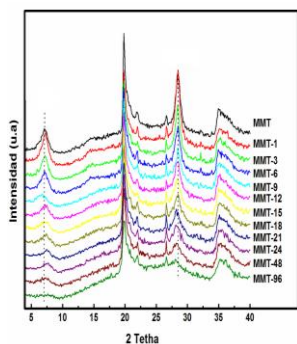


Figura 1. Patrones de DRX de la arcilla MMT a diferentes tiempos de molienda.

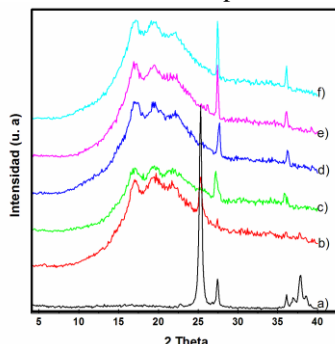


Figura 2. Patrones de DRX de: (a) TiO<sub>2</sub> y (b) películas envejecidas de ATiO<sub>2</sub> desde 1 hasta 8 horas.

**Agradecimientos.** Se agradece al Centro de Investigación en Corrosión de la Universidad Autónoma de Campeche, por todas las atenciones y facilidades prestadas para la realización de las pruebas de envejecimiento acelerado y a CONACYT por la beca otorgada.

### Referencias

1. Sorrentino A., Gorrasi G., Vittoria V. Potential perspectives of bio-nanocomposites for food packaging applications. *Trends in Food Science & Technology* 18, 84-95, 2007.
2. R. Ramadan A., M.K Esawi. A., A. Gawad A. Effect of ball milling on the structure of Na+-montmorillonite and organo-montmorillonite (cloisite 30B). *Applied Clay Science* 47, 196-202, 2010.

## Refinamiento de estructuras cristalinas de hexacianometalatos tratados con ozono

J. Balmaseda<sup>1</sup>, G. E. de la Huerta<sup>1,\*</sup>, M. L. Ríos<sup>1</sup>, J. Rodríguez<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM

<sup>2</sup>Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales, Universidad de la Habana

Autor a contactar: gohele@gmail.com

Palabras clave: Refinamiento estructural, hexacianocobaltato de manganeso, materiales porosos, ozono.

Resumen. Los hexacianometalatos, son materiales porosos pertenecientes a la familia de los análogos al azul de Prusia, dichos materiales han tomado una gran importancia en las últimas décadas debido a sus propiedades: son sólidos cristalinos con poco peso, un volumen libre relativamente alto y con entalpías de adsorción de bajas a intermedias<sup>1</sup>. Estos materiales no contienen centros polares en su estructura, lo que los provee de una alta estabilidad para la adsorción de moléculas a través de interacciones electrostáticas, por ejemplo. Es, a prtir de ellos que estos materiales tienen aplicaciones en magnetos moleculares, tamices moleculares, catalizadores y adsorbentes. Dentro de los hexacianometalatos, los cianocobaltatos de cationes divalentes ( $M_e^{2+}$ ),  $M_{13}[Co(CN)_6]_2 \cdot xH_2O$ , son particularmente atractivos como materiales microporosos<sup>2</sup>

Por otra parte, los procesos de ozonización normalmente se han realizado en fase líquida o gaseosa; los resultados de la ozonización de los análogos al azul de Prusia son interpretados por la presencia de especies activas formadas durante el proceso de ozonización<sup>3</sup>.

En este trabajo, se utiliza el hexacianocobaltato de manganeso como punto de partida, para posteriormente deshidratarlo y realizar la modificación pos-síntesis, consistente en su ozonización. Para cada etapa, el material se caracteriza y se lleva a cabo el refinamiento estructural para detectar cambios en la misma, así como las tensiones estructurales presentes en las muestras.

Para dicho trabajo de caracterización se utilizaron las técnicas de difracción de rayos X (DRX), espectroscopia infrarroja (IR) y análisis termogravimétrico (TGA). Posteriormente para analizar la morfología se utiliza microscopia electrónica de transmisión (TEM) y microscopia electrónica de barrido (SEM).

### Referencias

1. Roque J. et al "Porous hexacyanocobaltates(III): Role of the metal on the framework properties" *Microporous and Mesoporous Materials* 103 (2007) 57–71
2. Rodriguez J., et al "An atypical coordination in hexacyanometallates: Structure and properties of hexagonal zinc phases" *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 68 (2007) 1630–1640
3. Reguera E., Fernández J., Duque J. "On the interactions of ozone with manganous hexacyanoferrate" *Polyhedron* Vol.13 No. 3 pp-479-484 1994



## Effect of ozone treatment in structure and stability of porous cobalticyanides.

M. L. Ríos-Gómez\*, G.H. de la Huerta, J. Rodríguez-Hernández, L.F. del Castillo, J. Balmaseda  
Departamento de Polímeros, Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México,  
México, D.F. C.P. 04510.

\* Autor a contactar; e-mail: laura.rios@ciencias.unam.mx

Palabras clave: crystallography, hexacyanide, transition metal, ozone, thermal stability

Resumen. Most of transition metal hexacyanides with molecular formula  $\text{Me}_3[\text{Mi}(\text{CN})_6]_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$  crystallize in cubic space groups:  $Fm\bar{3}m$  [1,2] and  $Pm\bar{3}m$  [3]. Their crystal structure can be depicted as open frameworks filled with water molecules which can be desorbed at low temperature leaving the framework available for other fluids like hydrogen and methane. The spatial arrangement of atoms is such that the transition metal Me remains with mixed coordination sphere of water molecules and cyanide anions  $[\text{Me}(\text{CN})_x(\text{H}_2\text{O})_{6-x}]$ . After the dehydration, some Me cations remain with incomplete coordination sphere, allowing the post-synthesis modification of their oxidation state using ozone [4,5].

Hydrated and dehydrated samples with  $\text{Me} = \text{Mn}^{2+}, \text{Fe}^{2+}, \text{Co}^{2+}, \text{Ni}^{2+}, \text{Cu}^{2+}$  and  $\text{Mi} = \text{Fe}^{3+}, \text{Co}^{3+}$  were expose to ozone-enriched air flux and then a thermogravimetric and calorimetric analysis was performed to evaluate the effect of the post-synthesis modification of the oxidation states on the samples stability. The degree of transformation as well as the reaction mechanism was studied by vibrational spectroscopies and by quantitative analysis of X-ray powder diffraction patterns.

Accessible volume differences between samples that crystallize in space groups  $Fm\bar{3}m$  and  $Pm\bar{3}m$ , were analyzed by computer simulations in supercells using rigid spheres model. The space group influence in Me oxidation with ozone was experimentally tested.

The post-synthesis modification method proposed is a way to improve the fuel gas retention in porous cobalticyanides.

**Agradecimientos.** A CONACyT por la beca asignada 266051, a los proyectos CONACyT 154626 y CONACYT-CNPq 174247 por el financiamiento parcial. A la Q.F.B. Damaris Cabrero Palomino, el Q. Miguel Ángel Canseco Martínez, Fis. Lázaro Huerta Arcos y la M. en C. Adriana Tejada Cruz por el soporte técnico.

### Referencias

1. Roque, J., E. Reguera, J. Balmaseda, J. Rodríguez-Hernandez, L. Reguera, and L.F. del Castillo, *Microporous and Mesoporous Materials*, 2007. **103**(1-3): p. 57-71.
2. Balmaseda, J., E. Reguera, J. Rodríguez-Hernández, L. Reguera, and M. Autie, *Microporous and Mesoporous Materials*, 2006. 96(1-3): p. 222-236.
3. Reguera, E., J. Rodríguez-Hernandez, A. Champi, J.G. Duque, E. Granado, and C. Rettori, *Zeitschrift Fur Physikalische Chemie-International Journal of Research in Physical Chemistry & Chemical Physics*, 2006. 220(12): p. 1609-1619.
4. Reguera, E. and J. Fernández-Bertrán, *European Journal of Solid State and Inorganic Chemistry*, 1994. **31**: p. 1021-1027.
5. Reguera, E., J. Fernández-Bertrán, and J. Duque, *Polyhedron*, 1994. **13**(3): p. 479-484.

## Videos de Crecimiento de Cristales a partir de Disoluciones

Edilberto Hernández Juárez<sup>1\*</sup>, Dulce María Aguilar Téllez<sup>1</sup>, Isaac Rangel Chávez<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>Instituto de Física, UNAM, Ciudad Universitaria, Delegación Coyoacán 04510 México, D.F.

\* Autor a contactar; e-mail: juarez@fisica.unam.mx

**Palabras clave:** Crecimiento de cristales, vídeos de cristales, azúcar, sulfato de cobre, sulfato de magnesio.

**Resumen.** Se muestran animaciones realizadas en stop motion del crecimiento cristalino de sustancias como: sulfato de cobre, azúcar, sulfato de magnesio, cloruro de sodio, etc. El tiempo de los videos es de minutos, sin embargo, el tiempo de crecimiento de los cristales es de varias horas o días (en promedio 1 min. de video equivale a 15hrs. de crecimiento). Además se realizarán dichos crecimientos durante el congreso y se explicará cómo realizarlos en el aula o en casa.

**Agradecimientos.** A Pedro Zaldívar Sánchez por su apoyo técnico.

### Referencias

1. (IUCr) Cristales-Un manual para profesores de enseñanza primaria y secundaria.
2. Holden, A. y Singer, P., Crystal and Crystal Growing, Doubleday-Anchor, Garden City, NY. USA, 1960.

## Los parámetros de extinción y el factor estático de Debye-Waller para caracterización de microestructura de níquel con textura

T. Kryshab<sup>1,\*</sup>, A. Cadena Arenas<sup>2</sup>, A. Kryvko<sup>3</sup>, J. Palacios Gómez<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Instituto Politécnico Nacional – ESFM, Av. IPN, Ed. 9, U.P.A.L.M., 07738, México D.F., México.

<sup>2</sup>Instituto Politécnico Nacional – ESQIE, Av. IPN, Ed. 8, U.P.A.L.M., 07738, México D.F., México.

<sup>3</sup>Instituto Politécnico Nacional – ESIME, Av. IPN, Ed. Z4, U.P.A.L.M., 07360, México D.F., México.

\* Autor a contactar: kryshab@gmail.com.

Palabras clave: Difracción de rayos X, Extinción, Factor estático, Textura, Microestructura.

Resumen. Mediante el análisis de textura con difracción de rayos X (DRX) se obtiene información de la orientación cristalográfica presente en una cierta fracción de volumen en una muestra. La evaluación de textura implica la medición de figuras de polos (FP) a partir de la intensidad difractada por planos particulares. El fenómeno de extinción [1], que se relaciona con la microestructura de los cristales que constituyen la muestra analizada, se basa en la pérdida de potencia de la intensidad integrada de dispersión cinemática, y resulta a una disminución de las densidades de polos (DP) [2]. El fenómeno de extinción aparece como: la extinción primaria (EP) que se relaciona con el tamaño de dominio cristalino perfecto en la dirección de difracción y de la longitud de extinción  $\Lambda$ , y reduce la intensidad debido a procesos dinámicos [3] y la extinción secundaria (ES) que aparece en un cristal mosaico debido a la reflexión del haz incidente o reflejado en bloques paralelos. Los parámetros que se consideran para el estudio de la microestructura de material con textura son: el coeficiente de la extinción primaria ( $\epsilon$ ) y el coeficiente de la extinción secundaria ( $g$ ).

El factor estático de Debye-Waller es una característica integral de los defectos en cristales introducida en la teoría cinemática de DRX [4] y también usada para la dispersión dinámica [5]. Un cristal con dislocaciones aleatoriamente distribuidas con densidad  $N_D$  menor que una densidad crítica ( $N_{DC}$ ) va a dispersar por una parte con dispersión dinámica y por otra parte con dispersión cinemática, lo cual se relaciona con dislocaciones. En el caso de  $N_D > N_{DC}$  los efectos dinámicos desaparecen y ocurre solo la dispersión cinemática.  $N_{DC}$  depende inversamente de la longitud de extinción  $\Lambda$  [6]. El aumento del orden de reflexión de un cristal con  $N_D$  constante, resulta en la desaparición de dispersión dinámica y a su vez en el fenómeno de extinción. En este trabajo, se determinó la relación entre el coeficiente de extinción primaria  $\epsilon$  y el factor estático de Debye-Waller  $L$ . Para calcular el coeficiente  $\epsilon$ , se utilizó la DP en el máximo de las FP obtenidas para los primeros ordenes de reflexión, 111 y 200, con radiación de  $MoK_{\alpha}$  y el valor máximo de las DP corregidas por extinción en cada reflexión de muestras de níquel con textura usando dos radiaciones de  $Cu K_{\alpha}$  y  $Co K_{\alpha}$ , mediciones para primeros y segundos órdenes de reflexión y sistema de 3 ecuaciones para determinar DP corregida y parámetros de extinción [2]. Para determinar el parámetro  $L$ , se utilizó el valor calculado del coeficiente  $\epsilon$  para cada plano de difracción mencionado.

Se encontró la relación entre el factor estático de Debye-Waller  $L$  y el coeficiente de extinción primaria  $\epsilon$ , en los materiales con textura y se calcularon las densidades de dislocaciones usando el factor estático de Debye-Waller y los parámetros de extinción obtenidos. Los valores de  $N_D$  obtenidos usando las dos características son prácticamente iguales.

### Referencias

1. James, R. W., 1965, *The Optical Principles of the Diffraction of X-Rays*, (London: G. Bell).
2. Kryshab, T., Palacios Gómez, J., Mazin, M., & Gómez Gasga, G., 2004, *Acta Materialia*, **50**, 3027.
3. Pinsker, Z. G., 1978, *Dynamical Scattering of X-Rays in Crystals* (New York: Springer).
4. Kryvoglaz, M. A., *Theory of X-ray and Thermal Neutron Scattering by Real Crystals* (New York: Plenum).
5. Dederichs, P. H., 1971, *Phys. Rev. B – Solid State*, **4**, 1041.
6. Datsenko, L. I., Osinivskii, M. E., Khrupa, V. I., Kryshab, T. G., Skorohod, M. Ya., 1990, *Phys. Metals*, **9**, 285.

## **Ajuste de parámetros instrumentales del equipo Rigaku Miniflex II**

Cecilia Rodríguez Hinojosa, Ricardo Obregón Guerra\*, Eligio Miguel Ruiz Abrego, Martin Guerrero Villa.

Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas, Universidad Autónoma de Nuevo León, Nuevo León, México.

Autor a contactar: ricardo.ogbregongr@uanl.edu.mx.

Palabras clave: Método de Rietveld, Difracción de Rayos X, Efecto de Transparencia

La difracción de rayos x de muestras policristalinas es una técnica ampliamente aplicada en la caracterización de materiales cristalinos. El método de Rietveld es una técnica de refinamiento que tiene la capacidad de determinar con mayor precisión parámetros estructurales de la muestra, a partir de la construcción de un modelo teórico que se ajusta al patrón de difracción experimental, mediante el método de mínimos cuadrados. El método de Rietveld se ha convertido en una herramienta fundamental que consiste en ajustar teóricamente todos los parámetros que descubren un perfil (estructural, microestructural e instrumental) a los datos obtenidos. En éste trabajo se obtuvieron los parámetros instrumentales del equipo, utilizando una muestra estándar de silicio, ajustándola con un refinamiento por medio del método de Rietveld y utilizando el software TOPAS. Se analizaron difractogramas con diferentes parámetros de paso y velocidad. Utilizando una muestra de aluminio, se demostró el efecto de transparencia.

## Caracterización de películas Langmuir-Blodgett de derivados de ferroceno por medio de rayos X.

R. E. Lazo-Jimenez<sup>1</sup>, M.C. Ortega-Alfaro<sup>1</sup>, J.G. López- Cortés<sup>2</sup>, M.L. Lazo<sup>1</sup>, C. Álvarez-Toledano<sup>2</sup>, J.A. Chávez-Carvayar<sup>3</sup>, M.P. Carreón-Castro<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Circuito Exterior, CU, C.P. 04510, Cd. Universitaria. D.F., México.

<sup>2</sup> Instituto de Química, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Circuito Exterior, CU, C.P. 04510, Cd. Universitaria. D.F., México.

<sup>3</sup> Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Circuito Exterior, CU, C.P. 04510, Cd. Universitaria. D.F., México.

\* [pilar@nucleares.unam.mx](mailto:pilar@nucleares.unam.mx), [estela.lazo@nucleares.unam.mx](mailto:estela.lazo@nucleares.unam.mx),

Palabras clave: Películas Langmuir-Blodgett, complejos organometálicos, thin films

Resumen. En el presente trabajo se diseñaron y sintetizaron moléculas organometálicas tipo *Push-Pull*, a partir de las cuales se desarrollaron nuevas películas delgadas con la técnica Langmuir-Blodgett (LB). Esta técnica combina la formación de una película monocapa en la interfase aire-agua con subsecuente transferencia sobre un sustrato sólido, siendo una ruta viable para producir películas delgadas activas con arquitectura controlada. Un precursor de monocapa típica como los usados en este estudio contienen dos distintas regiones en la molécula: un grupo con cabeza hidrofílica (aminocarbeno) el cual es fácilmente soluble en agua, y una larga cadena alquílica la cual provee una cola hidrofóbica. Las estructuras de los precursores fueron caracterizadas por rayos X, luego se adicionó una larga cadena alifática ( $C_{16}H_{33}^-$ ), a la estructura química de estos precursores para ser usados en la técnica Langmuir-Blodgett.

De los cuatro complejos organometálicos estudiados, dos son ferrocenil-aminocarbenos con estructura química  $RC=[M(CO)_5]NH(CH_2)_{15}CH_3$ , donde  $R = Fc$  y  $M = Cr$  o  $W$ , y los otros dos son ferrocenylamidas, con estructura química  $RC=MNH(CH_2)_{15}CH_3$ , donde  $R = Fc$  y  $M = S$  o  $Se$ , respectivamente, los cuales fueron capaces de formar monocapas de Langmuir en la interfase aire/agua; estas nuevas nanoestructuras fueron caracterizadas por isotermas de presión superficial-área ( $\pi$ -A) y Microscopía de Ángulo de Brewster (BAM). Las películas mono y multi-capas de estos compuestos fueron preparadas y transferidas a un sustrato de vidrio mediante el método Langmuir-Blodgett (LB), formando multicapas tipo Z con una relación de transferencia cercano a la unidad. Estas películas fueron caracterizadas por espectroscopia Ultravioleta-Visible (UV-Vis), Microscopía de Fuerza Atómica (AFM) y difractogramas de rayos X.

**Agradecimientos.** Los autores agradecen a Martín Cruz (ICN-UNAM), Adriana Tejeda y Carlos Flores (IIM-UNAM), M. en C. Margarita Romero (F.Q.), Luis Velasco y Javier Pérez (IQ-UNAM) por su asistencia técnica. Agradecemos también a la DGAPA-PAPIIT IN111711 y IB200312 así como al CONACYT por la beca 104243 de R.E. Lazo-Jiménez.

### Referencias

1. Petty, M.C., 1996, *Langmuir-Blodgett films: An introduction*, 1<sup>st</sup> ed. Cambridge University Press, Cambridge; New York, NY, USA,; pp.13-166
2. P. Dynarowicz-Latka, A. Dhanabalan, O.N. Oliveira, 2001, *Adv. Colloid Interface* **91**, 221.
3. López-Cortés, J.G.; Contreras de la Cruz, L.F.; Ortega-Alfaro, M.C.; Toscano, R.A.; Alvarez-Toledano, C.; Rudler, H., 2005, *J. Organomet. Chem.*, **690**, 2229.
4. C. Sandoval-Sánchez *et al.*, 2009, *J. Organomet. Chem.* **694**, 3692
5. A. I. Gutiérrez-Hernández *et al.*, 2012, *J. Med. Chem.* **2**, A-L.
6. Giner-Casares, J.J.; Brezesinski, G., 2012, . In *Current Microscopy Contributions to Advances in Science and Technology*. 2012 edition; Mendez-Vilas, A., Ed.; Formatex Research Center, Badajoz, Spain, 2, 1007-1012.

# **Carteles**

## **Sesión III**

## **Análisis cristalográfico de películas delgadas Fe-Cu crecidas por pulverización catódica.**

V. Mendoza<sup>1,2,\*</sup>, H. Cruz-Manjarrez<sup>2</sup>, R. Hernández<sup>2</sup> y J. Arenas-Alatorre<sup>2\*</sup>

<sup>1</sup> Ingeniería en Nanotecnología, Universidad Politécnica del Valle de México, Av. Mexiquense s/n, esquina Av. Universidad Politécnica, Col. Villa Esmeralda, C.P. 54910, Tultitlán, Estado de México,

<sup>2</sup> Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Circuito Exterior, C. U., 04510, Coyoacán, D. F., México.

\* Autor a contactar: vicktor\_mmp@hotmail.com jarenas@fisica.unam.mx

Palabras clave: Fe-Cu, películas delgadas multicapa, pulverización catódica.

Resumen. En este trabajo se analiza el hábito de crecimiento cristalino de películas delgadas crecidas por la técnica de pulverización catódica (“sputtering”). Durante la síntesis, al menos dos capas ferromagnéticas están separadas por una película ultradelgada de cerca de 10 nanómetros de un metal no ferromagnético (Cu). En algunos sistemas metálicos depositados en multicapas en las que se alternan metales magnéticos y no magnéticos, ha sido posible observar el efecto llamado magnetoresistencia gigante, que varían de acuerdo con el espesor del metal no magnético [1]. La caracterización microestructural de las películas delgadas mencionadas, se caracterizaron por Microscopía Electrónica de Transmisión (TEM), Espectroscopia por Dispersión de Energía de Rayos X (EDS) y Microscopía de Fuerza Atómica (AFM), con ello se determinó el espesor y composición química elemental de cada película. Por medio de microscopía electrónica de transmisión de alta resolución (HRTEM) se realizó la identificación de fases cristalinas. De las imágenes de HRTEM con la ayuda de los EDS se identificaron a través de medidas de distancias interplanares, algunos óxido como CuO y CuFeO<sub>2</sub>.

**Agradecimientos.** Al proyecto PAPIIT IN114214 por el financiamiento de este trabajo. Al Ing. Samuel Tehuacanero Nuñez y Ing. Mario Monroy y Ing. Juan Morales por su apoyo técnico en el AFM respectivamente y al Arq. Diego Quiterio Vargas por su apoyo en la preparación de muestras para su análisis por TEM.

### **Referencias**

- 1 José María Albella Martín, Laminas delgadas y recubrimientos: preparación, propiedades y aplicaciones, CSIC - CSIC Press, 2003.
- 2 One-step aqueous synthesis of stoichiometric Fe-Cu nanoalloy. Morales-Luckie, R.A. , Sanchez-Mendieta, V., Arenas-Alatorre, J.A., López-Castañares, R., Perez-Mazariego, J.L., Marquina-Fabrega, V., Gómez, R.W. *Materials Letters*, 62 (26)(2008) 4195-4197.
- 3 Magnetic properties of nanostructured CuFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>. *J. Phys. Condens. Matter*. **11**(1999)4063-4078.
- 4 Magnetic nanostructures, F.J. Himpsel, J.E. Ortega, G.J Mankey and R.F. Willis. *Advances in Physics* **47**(1998) 511-597.

## Síntesis de un composite de nanopartículas soportadas en grafeno químicamente reducido.

C. Cosío Castañeda<sup>1\*</sup>, R. Martínez-García<sup>2</sup>, L. M. Socolovsky<sup>2</sup>.

<sup>1</sup>Departamento de Física y Química Teórica, Facultad de Química, UNAM, México.

<sup>2</sup>Laboratorio de Sólidos Amorfos, INTECIN, Facultad de Ingeniería, UBA, Argentina.

\* Autor a contactar: carloscosioc@gmail.com.

Palabras clave: Nanopartículas, Composite, Grafeno, Maghemita.

Resumen. El desarrollo y la investigación sobre sistemas híbridos conformados por nanopartículas soportadas en una matriz de grafeno, ha incrementado dado las potenciales aplicaciones tecnológicas que este tipo de composites tiene en las áreas de biosensores, supercapacitores o dispositivos electrónicos en escala nanométrica<sup>1</sup>. Una de las líneas de mayor interés en este tipo de materiales es la búsqueda de magnetoresistencia gigante. Esta propiedad física, puede originarse cuando existe una orientación preferencial de los momentos magnéticos de las nanopartículas (en estado superparamagnético) que se encuentran dispersadas en una matriz conductora<sup>2</sup>.

En este trabajo se presenta la síntesis de un composite conformado por nanopartículas de óxido de hierro (fase maghemita,  $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ ) encapsuladas con un recubrimiento de organosilanos (APTES, 3-amino propil trietoxisilano) que permite su acoplamiento en una matriz de grafeno oxidado; la cual, posterior al ensamblaje, se reduce químicamente para obtener una estructura equivalente con grafeno (rGO). El seguimiento de las cinco etapas requeridas para la formación del composite se realizó utilizando las técnicas de difracción de rayos X (DRX), espectroscopia de infrarrojo, termogravimetría, microscopía electrónica de barrido (SEM) y susceptibilidad magnética como función de la temperatura. La figura 1 presenta, de forma cualitativa, la separación de las nanopartículas recubiertas cuando estas se acoplan con la matriz de grafeno químicamente reducido, permitiendo obtener un sistema híbrido en el que coexisten las propiedades eléctricas del grafeno y las características magnéticas de las nanopartículas de maghemita<sup>3</sup>.

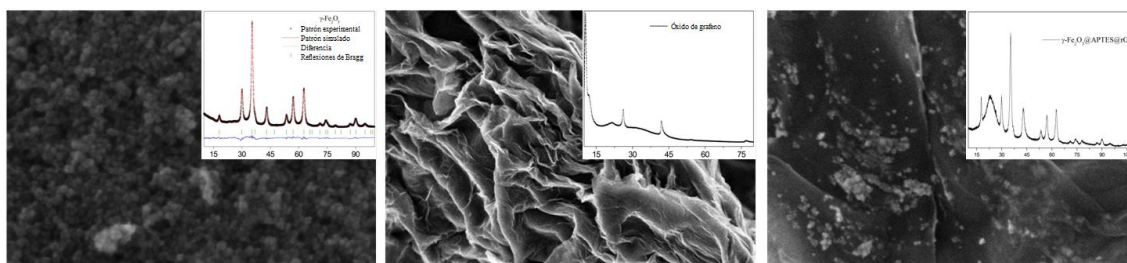


Figura 1. Resultados de SEM y DRX. (Izquierda) Nanopartículas de  $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$  ( $\phi < 15$  nm) encapsuladas con APTES. (Central) Óxido de grafeno. (Derecha) Composite de nanopartículas de maghemita recubiertas y soportadas en grafeno química reducido,  $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3@APTES@rGO$ .

**Agradecimientos.** A la Facultad de Ingeniería de la Universidad de Buenos Aires, Argentina, por el apoyo brindado en el desarrollo de esta investigación.

### Referencias

1. Quandt, A., Ferrari, M., 2008, *Adv. Sci. Technol.*, **51**, 74.
2. Socolovsky, L.M., Denardin, J.C., Brandl, A.L., Knobel, M., 2003, *Mater. Charact.*, **50**, 117.
3. Cosío Castañeda, C., Martínez-García, R., Socolovsky, L.M., 2014, *Solid State Sci.*, **30**, 17.



## Growth and characterization of ZnO thin films deposited by chemical bath and annealed by microwaves (CBD-A $\mu$ W)

J. Díaz-Reyes<sup>1\*</sup>, J. Martínez-Juárez<sup>2</sup>, J. E. Flores Mena<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Centro de Investigación en Biotecnología Aplicada, Instituto Politécnico Nacional. Ex-Hacienda de San Juan Molino Km. 1.5. Tepetitla, Tlaxcala. 90700. México

<sup>2</sup> CIDS-ICUAP, BUAP. CU, Edif. No. 137. Col. San Manuel. Puebla, Pue. 72570. México

<sup>3</sup> FCE-BUAP, CU. . Col. San Manuel. Puebla, Puebla. 72570. México

\* Corresponding author: joel\_diaz\_reyes@hotmail.com

Keywords: ZnO, chemical bath, microwaves, X-ray diffraction, Raman spectroscopy

Abstract. Actually, ZnO has received increasing attention and recognized as a promising candidate for applications related to its optoelectronic possibilities in the UV range. The ZnO is grown by the technique of Chemical Bath Deposition activated by microwaves (MW-CBD). The urea concentration in the growth solution is varied, maintaining constant the zinc nitrate in ratio 1:1, ..., 1:10. By X-rays scattering obtains that it has hexagonal polycrystalline wurtzite type structure. The IR absorption line at 3577 cm<sup>-1</sup> detected at 300 K in bath chemical ZnO is assigned an O–H bond primarily aligned with the c-axis of the crystal and bonding between Zn–O (473cm<sup>-1</sup>, 532 cm<sup>-1</sup>). In the Raman spectra measured at room temperature the main vibrational modes ( $E_2^{high} - E_2^{low}$ ),  $A_1(TO)$ ,  $E_2^{high}$  and  $A_1(LO)$  are identified as the peaks sited at 335, 383, 441 and 580 cm<sup>-1</sup>. The room temperature photoluminescence spectra show three radiative bands associated to vacancies of zinc and oxygen. The 300 K photoluminescence presents a visible radiative band associates to vacancies of zinc and oxygen. In addition was carried out energy dispersive spectroscopy (EDS) measurements on the ZnO films to determine their stoichiometry which allows relating the intensity of radiative bands associated to oxygen and zinc vacancies.

Figure 1 shows the polarized Raman spectra of ZnO layers for five different urea ratios at room temperature and Fig. 2 show polarized Raman spectra of the typical ZnO film measured at room temperature in backscattering configuration, which allows the observation of all active modes and besides some ones are well-resolved for the all deposited films studied in this work.

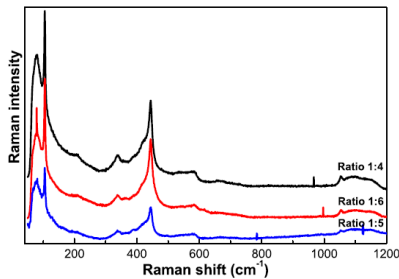


Fig. 5. Raman spectra of ZnO film for molar ratios 1:1, 1:4, 1:5, 1:6 and 1:10.

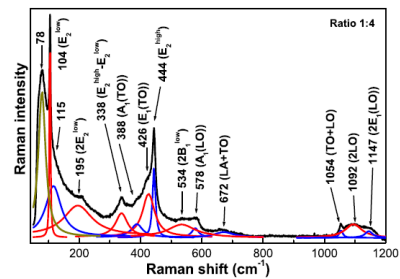


Fig. 6. Curve fitting analysis of the Raman spectrum of ZnO film with ratio 1:4 grown by chemical bath.

Figure 3 shows the SEM images of ZnO films that were homogenized and agglomerated with particles of several sizes dependent of the ratio (nitrate: urea).

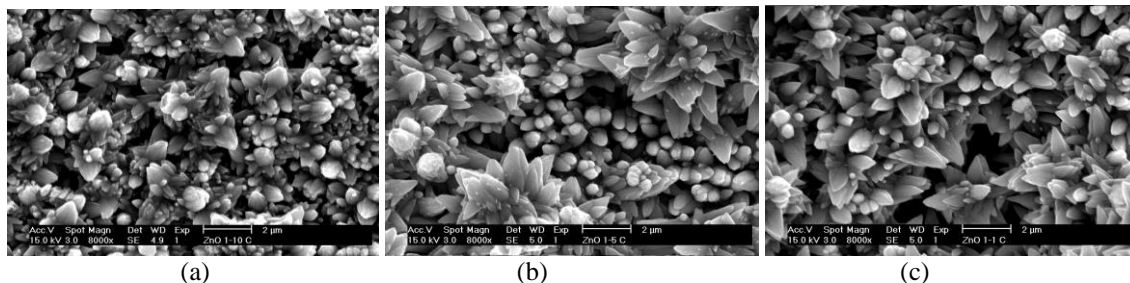


Fig. 1. SEM images of ZnO structures samples with molar ratios; (a) 1:10, (b) 1:5, (c) 1:1.

## **Estudio de la microestructura generada por el proceso ECAP y su influencia sobre la recristalización en la aleación Al-4%Sn.**

I. A. Figueroa, Emanuel López, C. A. Reyes, G. González\*

Instituto de Investigaciones en Materiales, IIM - Universidad Nacional Autónoma de México.

Circuito Exterior S/N, Cd. Universitaria, A.P. 70-360, Coyoacán, C.P. 04360, México

\* Autor a contactar; G. Gonzalez, e-mail joseggr@unam.mx

Palabras clave: ECAP, aluminio, microestructura, recristalización, textura,

### Resumen

Los procesos de deformación plástica severa SPD, son procesos de gran interés científico y tecnológico en aleaciones metálicas, pues con ellos se logra una disminución importante en el tamaño de grano, un aumento considerablemente el límite de cedencia e incluso mejorar la ductilidad del material [1-2]. El proceso de extrusión en canal angular (ECAP) forma parte de los SPD y es considerado como un proceso eficiente y relativamente sencillo de implementar.

En los últimos años, nos hemos interesado en el estudio de la aleación Al-Sn deformada por ECAP [3- 4], pues se trata de una aleación con propiedades tribológicas interesantes y presenta un caso ideal de mezcla física entre dos elementos prácticamente inmiscibles y cuyo proceso de deformación por estos métodos ha sido poco estudiado.

El objetivo principal del presente trabajo es describir los cambios en la textura cristalográfica y la microestructura de una aleación Al-4%Sn extruida por ECAP. Asimismo nos interesa conocer las consecuencias del proceso ECAP sobre la recristalización a dos diferentes temperaturas, ( $T= 150$  y  $330$  °C). Para lograr este objetivo, se caracterizaron las muestras por microscopía electrónica de barrido y transmisión, se analizó la textura cristalográfica por difracción de RX y desde el punto de vista mecánico, se hicieron medidas de dureza sobre muestras escogidas.

A partir de nuestras observaciones, podemos concluir que la textura inicial generada por el proceso ECAP, es parcialmente destruida por el proceso de recristalización. Sin embargo, se observa una textura remanente en la dirección perpendicular a la cara lateral de la pieza. A partir de las figuras inversas de polos, hay evidencia de que un proceso de coalescencia alinea parcialmente los granos recién recristalizados en torno a la textura original. Este hecho es confirmado también por imágenes de microscopía electrónica, en donde se observa la coalescencia de ciertos granos en las muestras tratadas a  $330^{\circ}\text{C}$  y que llegan a tener hasta 2 micras de diámetro equivalente. Desde el punto de vista mecánico, el cambio de dureza observado aumenta con el número de pasos de ECAP y se ve reducida por la presencia de estaño en la muestra.

**Agradecimientos.** Los autores desean agradecer a Carlos Flores y Adriana Tejeda por asistencia técnica en microscopía electrónica y difracción respectivamente y a los proyectos PAPIIT-UNAM IN110014 y CONACYT 166896 por el apoyo financiero otorgado.

### Referencias

1. R. Z. Valiev, T. G. Langdon (2006). Principles of equal-channel angular pressing as a processing tool for grain refinement. *Progress in Materials Science*, 51, 881-981.
2. R.Z. Valiev, Nanostructuring of metals by severe plastic deformation for advanced properties. *Nature Materials*, Vol. 3 (0), 511-516 (2004).
3. G. Gonzalez, C. Braham, J.L. Lebrun, Y. Chastel and W. Seiler. I.A Figueroa. Microstructure and texture of Al-Si<sub>2</sub>-xSn (x=0, 4, 8 wt%) alloys processed by Equal Chanel Angular Pressing. *Materials Transactions*. Vol 53 No 7 pp 1234-1239. (2012) ISSN 1345-9678
4. C. Hernández, I. A. Figueroa, C. Braham, O. Novelo-Peralta, G. A. Lara-Rodriguez and G. Gonzalez Microstructural and mechanical study of the Al-20Sn (mass%) alloy processed by equal-channel angular pressing by route C. *Materials Transactions*, Vol 54, No 6 pp 977-983 (2013), ISSN 1345-9678

## Estudio microestructural de nanopartículas de Fe-Ni sintetizadas por reducción química.

Maria Fernanda Ruiz-Villegas<sup>1\*</sup>, Víctor Sánchez-Mendieta<sup>1</sup>, Jesús A. Arenas-Alatorre<sup>2\*</sup>.

<sup>1</sup>Facultad de Química, Universidad Autónoma del Estado de México. Paseo Colón y Paseo Tollocan s/n. Toluca, México, 50120.

<sup>2</sup> Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México Circuito de la Investigación Científica Ciudad Universitaria CP. 04510 México, D.F.

\*Autores a contactar: [mfruiz@fisica.unam.mx](mailto:mfruiz@fisica.unam.mx) [jarenas@fisica.unam.mx](mailto:jarenas@fisica.unam.mx)

**Palabras clave:** Nanopartículas, Síntesis química, Fe-Ni

Desde mediados del siglo pasado es sabido que un gran número de nanopartículas metálicas poseen una morfología y estructura cristalina bien definidas (determinadas por las redes de Bravais), sin embargo poseen un comportamiento tan propio que no pueden ser relacionados con materiales sólidos cristalinos en su estado volumétrico, aún y cuando las condiciones geométricas permitan tratarlas y analizarlas de manera semejante a los sólidos cristalinos [1]. Entre los resultados novedosos desde el punto de vista de la cristalografía, es que se han reportado a la escala nanométrica, en el caso de la combinación de dos metales, fases cristalinas bimetalicas no reportadas en su estado volumétrico [2,3]. Es en este sentido, el propósito de este trabajo se dirige a la identificación de fases cristalinas de nanopartículas bimetalicas Fe-Ni, sintetizadas por reducción química.

Se realizaron diversos cambios al método de síntesis por reducción química, para optimizar el tamaño y la forma de las partículas, encontrando que con la transferencia de fase se obtuvieron los mejores resultados. Para ello, se adicionaron sales de ambos metales (Ni, Fe) en solución, usando un agente estabilizante que a su vez cumplió la función de agente de transferencia, un agente reductor y posteriormente el incremento de temperatura hasta 180°C para controlar el tamaño de las nanopartículas. Las muestras fueron caracterizados por Microscopia Electrónica de Transmisión de Alta Resolución (HRTEM), Microscopía Electrónica de Barrido (SEM) y análisis químico elemental por Espectroscopia por Dispersión de Energía de Rayos X (EDS). Se identificaron nano-óxidos de Fe-Ni ( $\text{NiFe}_2\text{O}_4$ ) con un tamaño promedio de partícula de 20 nanómetros.

### Agradecimientos

Al proyecto PAPIIT IN114214 por el financiamiento de este trabajo. Al Ing. Samuel Tehuacanero Nuñez y al Fis. Roberto Hernández Reyes por su apoyo técnico en el TEM y al Arq. Diego Quiterio Vargas por su apoyo en la preparación de muestras para su análisis por TEM.

### Referencias

1. Las partículas pequeñas, Flores J. y José Yacamán M. *Ciencia* 31(1980)165-176.
2. Microstructural characterization of bimetallic Ni-Pt catalysts supported on  $\text{SiO}_2$ . J. Arenas Alatorre, M. Avalos Borja and G. Díaz. *Applied Surface Science*, *Applied Surface Science* **189** (2002)7-17
3. Structural properties of nanoclusters: Energetic, thermodynamic and kinetic effects. Francesca Baletto and Riccardo Ferrando, *Reviews of Modern Physics*, **77** (2005) 371-423.

## **Bionanocompositos $\text{CaCO}_3$ /nanopartículas metálicas (Ag y Au): Biosíntesis y caracterización estructural.**

Maria Fernanda Ruiz-Villegas<sup>1\*</sup>, Víctor Sánchez-Mendieta<sup>2</sup>, Víctor Varela-Guerrero<sup>1</sup>, Jesús A. Arenas-Alatorre<sup>3</sup>, Alfredo Rafael Vilchis-Nestor<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable, UAEM-UNAM. Carretera Toluca-Atlacomulco Km 14.5, San Cayetano, Piedras Blancas, Toluca, CP 50200, Estado de México, México. Tel: +52 (722) 276 66 10, Ext.7706.

<sup>2</sup>Facultad de Química, Universidad Autónoma del Estado de México. Paseo Colón y Paseo Tollocan s/n. Toluca, México, 50120.

<sup>3</sup>Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México Circuito de la Investigación Científica Ciudad Universitaria CP. 04510 México, D.F.

E-mail: [mfrui@fisica.unam.mx](mailto:mfrui@fisica.unam.mx), [arvilchisn@uaemex.mx](mailto:arvilchisn@uaemex.mx)

**Palabras clave:** *Bionanocomposito,  $\text{CaCO}_3$ , cascara de huevo, nanopartículas mono y bimetálicas (Ag, Au, Ag-Au)*

Las nanopartículas de metales nobles, han adquirido gran importancia e impacto en los pasados años por sus aplicaciones en la electrónica, óptica, bioquímica e incluso en la medicina [1], así como en catálisis. Para su aplicación en esta última área se ha buscado soportar las nanoestructuras con actividad catalítica en materiales de diferente naturaleza que coadyuven a mejorar la eficiencia del catalizador, mejorando su actividad y especificidad, además de permitir la rápida y completa recuperación del catalizador.

En el presente trabajo se emplea un material inorgánico ( $\text{CaCO}_3$ ) de origen biológico (cascara de huevo), como soporte de nanopartículas mono y bimetálicas de Ag, Au y Ag-Au, respectivamente, las cuales fueron obtenidas en una ruta “verde”, a partir de la reducción de sus sales metálicas, asistida por el extracto acuoso de *Camellia sinensis* (Te verde), como agente reductor.

El cascara de huevo fue lavado y homogenizado en tamaño, posteriormente fue tratado en medio ácido y básico. Las nanopartículas se depositaron por impregnación del soporte con las soluciones precursoras de las sales metálicas respectivas para posteriormente llevar a cabo la reducción con la solución de *Camellia sinensis*. Después de una hora de agitación, el bionanocomposito se seco en estufa a 100°C durante 24 horas. La caracterización de los bionanocompositos consistió en pruebas microscópicas de MEB, STEM (ADF y BF), EDS. Así como difracción de rayos X de polvos y espectroscopia IR. Se evaluó la actividad catalítica de los bionanocompositos en la reducción del p-nitrofenol.

### **Agradecimientos**

Al proyecto de la UAEM (programa para ciencias y tecnología 2013) 3467/2013 CHT; por el financiamiento de este trabajo. A la M. en C. Alejandra Nuñez por su apoyo con la caracterización IR. Así como a la M. en C. Lizbeth Triana del CCIQS UAEM-UNAM.

### **Referencias**

1. Las partículas pequeñas, Flores J. y José Yacamán M. *Ciencia* 31(1980)165-176.
2. Microstructural characterization of bimetallic Ni-Pt catalysts supported on  $\text{SiO}_2$ . J. Arenas Alatorre, M. Avalos Borja and G. Díaz. *Applied Surface Science, Applied Surface Science* **189** (2002)7-17
3. Structural properties of nanoclusters: Energetic, thermodynamic and kinetic effects. Francesca Baletto and Riccardo Ferrando, *Reviews of Modern Physics*, **77** (2005) 371-423.

## Síntesis y Estudio Estructural de Nitroprusiados de Mercurio, $\text{Hg}[\text{Fe}(\text{CN})_5\text{NO}]$ y $\text{Hg}_2[\text{Fe}(\text{CN})_5\text{NO}] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ .

H. Osiry<sup>1\*</sup>, A. Cano<sup>1</sup>, Leslie Regea<sup>2</sup>, A. Lemus<sup>1</sup>, E. Reguera<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada, CICATA – Unidad Legaria, IPN, México, D.F.

<sup>2</sup> Instituto de Materiales y Tecnología, 10400, Universidad de la Habana, Habana, Cuba.

Autor a contactar: ozzy\_tirano@hotmail.com

Palabras clave: Nitroprusiato de mercurio, mercurio pentacianonitrosilferrato, difracción de rayos – X en polvos, estructura cristalina.

Resumen. El anión complejo  $[\text{Fe}(\text{CN})_5\text{NO}]^{2-}$  (comúnmente llamado nitroprusiato) forma sales insolubles con muchos cationes, en particular;  $\text{Mn}^{2+}$ ,  $\text{Fe}^{2+}$ ,  $\text{Co}^{2+}$ ,  $\text{Ni}^{2+}$ ,  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Zn}^{2+}$ ,  $\text{Cd}^{2+}$ , [1-4], dando lugar a arreglos tridimensionales de cadenas que forman los grupos CN entre dos metales de transición (T-N≡C-Fe-C≡N-T). El interés de estos materiales moleculares viene dado por el hecho de que al cambiar el catión externo es posible modificar la topología de la red cristalina por lo que estos materiales pueden adoptar diferentes tipos de enrejados cristalinos y porosos. Esta característica hace que estos compuestos presenten potenciales aplicaciones en el almacenamiento de hidrógeno con fines de nuevas tecnologías energéticas renovables y no contaminantes, evaluándose el papel que juegan los factores estructurales sobre el almacenamiento de hidrógeno [5]. Los nitroprusiados de metales, generalmente son obtenidos como sólidos policristalinos por lo que se recurre a los métodos de difracción de rayos – X en polvos para la determinación estructural, la cual también se encuentra soportada por otras técnicas espectroscópicas y de termogravimetría.

En este trabajo, tal estrategia es discutida e ilustrada con el nitroprusiato de mercurio (II) en su fase anhidra,  $\text{Hg}[\text{Fe}(\text{CN})_5\text{NO}]$  y el nitroprusiato de mercurio (I) dihidratado,  $\text{Hg}_2[\text{Fe}(\text{CN})_5\text{NO}] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ . Las estructuras fueron refinadas aplicando el método de Rietveld. La fase anhidra cristaliza en el sistema ortorrómbico, grupo espacial  $Pbmn$ , con parámetros de celda:  $a = 12.3778$  (6),  $b = 11.2785$  (3),  $c = 6.1973$  (3) Å y  $Z = 4$ , mientras que la fase dihidratada cristalizó en el sistema triclinio con grupo espacial  $P-1$  y parámetros de celda:  $a = 10.1203(15)$  Å,  $b = 10.0998(16)$  Å,  $c = 7.4704(11)$  Å,  $\alpha = 110.663(13)^\circ$ ,  $\beta = 110.115(12)^\circ$ ,  $\gamma = 104.724(97)^\circ$  y  $Z = 2$ . En ambas estructuras, el átomo de Fe es coordinado por cinco ligandos ciano (CN) y un grupo nitrosil (NO), mientras que el átomo de Hg es enlazado únicamente a cuatro grupos ciano ecuatoriales por parte del átomo de N. Sin embargo la geometría de coordinación en torno al átomo de Hg para cada estructura es diferente. Los compuestos fueron caracterizados por IR, EDS y análisis termogravimétrico.

**Agradecimientos.** Dr. Julio Duque y al proyecto CONACyT

### Referencias

1. D.F. Mullica, E.L. Sappenfield, D.B. Tipping and D.H. Leschnitzer ; *Inorg. Chem.*, 164 (1989) 99.
2. D.F. Mullica, D.B. Tipping and E.L. Sappenfield; *Inorg. Chem.*, 174 (1990) 129.
3. D.F. Mullica, D.B. Tipping and E.L. Sappenfield; *J. Coord. Chem.* 1991 Vol. 24.
4. A. Gómez, J. Rodríguez-Hernández, E. Reguera, *J. Chem. Cryst.* 34 (2004) 893.
5. E. Reguera, A. Dago, A. Gómez, J. F. Bertrán; *Polyhedron* 15 (1996) 3139.

## Efecto de la adición de Cr y relajación estructural en las propiedades mecánicas de aleaciones vítreas base Fe

J. A. Verduzco<sup>1,\*</sup>, T. P. Bucio<sup>2</sup>, C. E. Borja<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Investigación en Metalurgia y Materiales (UMSNH), Fco. J. Mújica S/N, Col. Felicitas del Río, Morelia, Mich., C.P. 58030, MÉXICO

<sup>2</sup> Escuela Preparatoria Pascual Ortíz Rubio (UMSNH), Plan de Ayala No. 156, Col. Centro, Morelia, Mich., C.P. 58000, MÉXICO

\* Autor a contactar; e-mail: verduzco@umich.mx.

Palabras clave: Vidrios Metálicos, Propiedades Mecánicas, Relajación Estructural.

Resumen. Las aleaciones vítreas se caracterizan por tener resistencias mecánicas muy elevadas, especialmente las aleaciones base Fe, en forma de cinta [1] y en volumen [2,3]. A diferencia de los materiales metálicos cristalinos, las aleaciones amorfas manifiestan un proceso de deformación plástica muy localizada en el cual la cedencia procede de la nucleación y propagación de bandas discretas [4]; por instancia, en pruebas de tensión, las muestras fallan simultáneamente con la cedencia. Debido a que los vidrios metálicos no se endurecen por trabajado, el esfuerzo de cedencia es una medida intrínseca del material [5]. Por otro lado, muchas aleaciones vítreas base hierro se fragilizan después de un recocido por debajo de las temperaturas de cristalización [6], causando un detrimento en las propiedades mecánicas. En este trabajo se presenta el efecto de la sustitución de Cr por Fe, así como varios tratamientos térmicos en las propiedades mecánicas de las aleaciones  $Fe_{78-x}Cr_xSi_{10}B_{12}$  y  $Fe_{77.5-x}Cr_xSi_{7.5}B_{15}$  ( $0 \leq x \leq 8$ ), obtenidas en forma de cinta por el proceso de solidificación rápida de "melt spinning". Se encontró que la resistencia a la tensión en las cintas sin tratar aumentaron ligeramente con la sustitución de Fe por Cr de 1.5 GPa ( $x=0$ ) a 2.5 GPa ( $x=8$ ) para la familia de aleación  $Fe_{78-x}Cr_xSi_{10}B_{12}$ , y de 2.2 GPa ( $x=0$ ) a 2.9 GPa ( $x=8$ ) para la familia de aleación  $Fe_{77.5-x}Cr_xSi_{7.5}B_{15}$ . La microdureza Vickers se mantuvo casi constante para todos los contenidos de Cr. Al evaluar el efecto del tratamiento térmico de recocido (realizado por 30 minutos a varias temperaturas) tanto en la resistencia a la tensión como en la microdureza, se observó un decremento gradual con el incremento de la temperatura de recocido en la familia de aleación  $Fe_{78-x}Cr_xSi_{10}B_{12}$ , mientras que en la otra familia de aleación se observó un incremento con temperaturas de recocido mayores. Los resultados son explicados en términos de un incremento en la interacción de enlace atómico metal-metaloide así como de una relajación estructural después de tratamiento térmico.

**Agradecimientos.** J. A. Verduzco agradece a la Universidad de Sheffield, U. K., por su disponibilidad para fabricar las cintas metálicas vítreas. También agradece a la Coordinación de la Investigación Científica de la UMSNH por el apoyo económico recibido a través del proyecto 1.21.

### Referencias

1. Olofinjana, O., Davies, H.A., 1994, *Mater. Sci. Eng. A* **186**, 143.
2. Gu, X.J., Joseph Poon, S., Shiflet, G. J., 2007, *J. Mater. Res.* **22**, vol. **2**, 344.
3. Suryanarayana, C, Inoue, A., 2013, *Int. Mater. Rev.*, **58**, vol. **3**, 131.
4. Alpas, A.T., Edwards, L., Reid, C.N., 1988, *Mater. Sci. Eng.* **98**, 501.
5. Davis, L.A., 1975, *Scripta Metall.* **9**, 339.
6. Davies, L. A., Das, S. K., Li, J. C. M., *Int. J. Rapid Solidif.* **8**,73.

## Recientes avances en TEM para el estudio cristalino de nanopartículas bimetálicas.

J. Arenas-Alatorre<sup>1\*</sup>, O. Hernández<sup>1</sup> and G. Díaz<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México Circuito de la Investigación Científica Ciudad Universitaria CP. 04510 México, D.F.

Autor a contactar: jarenas@fisica.unam.mx

**Palabras clave:** Nanopartículas bimetálicas, TEM, Ni-Pt.

Reportes en la literatura indican que la actividad catalítica de nanopartículas pueden tener una mejor actividad o selectividad catalíticas y una mayor resistencia a la desactivación comparados con sistemas de un solo componente, sin embargo en un gran número de reportes no se explica claramente del porqué de dicho comportamiento, y es donde el análisis cristalográfico, de tamaño y forma de nanopartícula toma relevancia [1]. A la escala nanométrica hay reportes de identificación de fases cristalinas no reportadas en el estado másico volumétrico para determinados sistemas bimetálicos [2]. En este sentido, en este trabajo se presenta la evolución que se ha tenido en la Microscopía Electrónica de Transmisión (TEM) en el estudio de nanopartículas bimetálicas, en particular de los sistemas Ni-Pt y Au-Ir, y como a través de la técnica de campo obscuro anular a gran ángulo de alta resolución (HAADF-HR) [3], es posible hacer análisis cuantitativos.

### Agradecimientos

Al proyecto PAPIIT IN114214 por el financiamiento de este trabajo. Al Ing. Samuel Tehuacanero N. y Al Fis. Roberto Hernández R. por su apoyo técnico en el TEM, así como al Arq. Diego Quiterio Vargas y Armando Lara por la preparación de muestras.

### Referencias

1. Las partículas pequeñas, Flores J. y José Yacamán M. *Ciencia* 31(1980)165-176.
2. Microstructural characterization of bimetallic Ni-Pt catalysts supported on SiO<sub>2</sub>. J. Arenas Alatorre, M. Avalos Borja and G. Díaz. *Applied Surface Science*, *Applied Surface Science* **189** (2002)7-17
3. V. Grillo, E. Rotunno, STEM\_CELL:A software tool for electron microscopy : PartI — simulations, *Ultramicroscopy* **125**(2013)97–111.

## **Evolución de la textura cristalográfica inducida en la aleación de aluminio 6061, procesada por extrusión en canal angular.**

C. A. Reyes<sup>1,\*</sup>, J. M. Cabrera<sup>2</sup>, P. Castillo<sup>3</sup>, I. A. Figueroa<sup>1</sup>, J. G. González<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>Instituto de Investigaciones en Materiales, IIM - Universidad Nacional Autónoma de México.

<sup>2</sup>Departamento de Ciencia de los materiales e Ingeniería Metalúrgica, Universidad Politécnica de Cataluña.

<sup>3</sup>Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Iztapalapa.

\* Autor a contactar: c.reyesruiz@gmail.com

Palabras clave: Deformación Plástica Severa, ECAP, Textura cristalográfica, AA6061, MTEX.

Resumen. El proceso de extrusión en canal angular de sección constante (ECAP: Equal channel angular pressing), es un proceso de deformación plástica severa (DPS) que se ha aplicado en una gran cantidad de materiales con la intención de incrementar considerablemente las propiedades mecánicas de éste, mediante la consistente reducción del tamaño de grano.

El objetivo general de esta investigación es obtener y analizar la evolución de la textura cristalina inducida por el proceso de ECAP. Para ello, se indujo en el material una deformación de hasta  $\epsilon=6$ , mediante la técnica de ECAP, en un dado de sección circular con un ángulo de intersección de  $90^\circ$ , y una rapidez de deformación de  $0.33s^{-1}$ , siguiendo la ruta  $B_C$ , a temperatura ambiente.

Se obtuvieron, mediante difracción de Rayos-X (DRX), figuras de polos en el plano normal (NP) para las familias de planos cristalinos  $\{111\}$ ,  $\{100\}$  y  $\{110\}$  y se calculó la función de distribución de orientaciones (FDO). Con ayuda de la paquetería comercial MatLab® y el complemento MTEX [7], se generaron las FDO y las figuras de polos directas e inversas calculadas, que representan matemáticamente la orientación de los cristales respecto al sistema de la probeta. Adicionalmente se obtuvieron imágenes de alta resolución en microscopía electrónica de transmisión (HR-TEM), que resultan congruentes con la información obtenida mediante DRX. Esta información en conjunto permite evaluar los cambios microestructurales inducidos por el proceso ECAP, analizando los cambios que sufren las celdas de dislocaciones, así como el refinamiento submicrométrico generados por el proceso de en etapas representativas del mismo.

**Agradecimientos.** Los autores desean agradecer a los proyectos CONACYT 166896 y PAPIIT-UNAM IN110014.

### **Referencias**

1. R. Z. Valiev, T. G. Langdon (2006). Principles of equal-channel angular pressing as a processing tool for grain refinement. *Progress in Materials Science*, 51, 881-981.
2. Y. T. Zhu, T. C. Lowe, T. G. Langdon (2004). Performance and applications of nanostructured materials produced by severe plastic deformation. *Scripta Materialia*, 51, 825-830.
3. I. Sabirov, m. Y. Murashkin, R. Z. Valiev (2013). Nanostructured aluminium alloys produced by severe plastic deformation: New horizons in development. *Materials Science and Engineering A*, 560, 1-24.
4. Q. Jining, Z. Di, Z. Guoding, J. Lee (2005). Effect of temperature on texture formation of 6061 aluminum sheet in equal-channel angular pressing. *Materials Science and Engineering A*, 408, 79-84.
5. W. J. Kim, Y. K. Sa, H. K. Kim, U. S. Yoon (2008). Plastic forming of the equal-channel angular pressing processed 6061 aluminum alloy. *Materials Science and Engineering A*, 487, 360-368.
6. I. J. Beyerlein, L. S. Tóth (2009). Texture evolution in equal-channel angular extrusion. *Progress in Material Science*, 54, 427-510.
7. D. Mainprice, R. Hielscher, H. Schaeben (2011). Calculating anisotropic physical properties from texture data using the MTEX open source package. *Geological Society, London, Special Publications*, 360, 175-192.



## Variación en la morfología y área superficial en aleaciones de magnesio metálico dopado con óxido de cromo ( $\text{Cr}_2\text{O}_3$ ) sintetizadas por molienda mecánica.

S. C. Altamirano-Pérez<sup>1</sup>, A. Martínez-García<sup>1</sup>, E. Reguera<sup>2</sup>, E. A. Juárez-Arellano<sup>3</sup>.

<sup>1</sup> División de Estudios de Posgrado, Universidad del Papaloapan, Campus Tuxtepec, Circuito Central 200, Col. Parque Industrial, C.P. 68301, Tuxtepec, Oax. México.

<sup>2</sup> Centro de investigación CICATA-IPN Legaria. C.P. 11200, Col. Ejidación, Del. Miguel Hidalgo. México D.F.

<sup>3</sup> Instituto de Química Aplicada, Universidad del Papaloapan, Campus Tuxtepec, Circuito Central 200, Col. Parque Industrial, C.P. 68301, Tuxtepec, Oax. México

**Palabras clave:** magnesio metálico, molienda mecánica, hidrógeno.

### Resumen.

En aras de desarrollar fuentes de energía sustentables y amigables con el ambiente se ha optado por el uso del Hidrógeno como combustible alternativo. Sin embargo, son el almacenamiento y transporte las áreas que representan el principal reto por el riesgo que implica su manejo y por su alto costo económico.

Es así como las tendencias actuales se dirigen a la optimización de materiales almacenadores de hidrógeno que permitan su aprovechamiento de forma segura, con larga vida útil y a costos más bajos. Dentro de las modalidades de almacenamiento de hidrógeno conocidas la que se basa en la formación de hidruros metálicos representa una alternativa confiable por la estabilidad del hidruro formado y las condiciones a las cuales el hidrógeno puede ser liberado. Se sabe que el magnesio tiene la mayor capacidad de almacenamiento estudiada (9%), sin embargo la baja cinética de carga-descarga y su gran reactividad con el oxígeno o la humedad del ambiente hace difícil el uso de este metal. Como posibles soluciones se encuentran el aumento de área superficial disminuyendo el tamaño de partícula, mediante el uso de molienda mecánica, y el uso de dopantes que permiten una mayor rapidez en la adsorción/desorción del hidrógeno.

Como parte de la optimización y caracterización de materiales almacenadores de hidrógeno el presente trabajo muestra los resultados obtenidos en la evaluación de la morfología y el área superficial.

Se sintetizaron aleaciones de magnesio metálico dopado con  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  obtenidas por molienda mecánica en un molino de bolas tipo planetario, mediante carburo de tungsteno como material de molienda, a una velocidad de molienda de 600 rpm, en un intervalo de tiempo de 5 a 320 min. El efecto de la molienda se evaluó mediante Microscopía electrónica de barrido (SEM) como estudio de su morfología y el área superficial se obtendrá con los equipos BELSORP y Xtended Pressure Sorption Analyzer.

Fue evidente la influencia de la molienda mecánica para la disminución del tamaño de partícula y los cambios en la morfología inicial y la observada después del tratamiento, aunado a la incorporación del agente dopante ( $\text{Cr}_2\text{O}_3$ ) que incrementa el área superficial de nuestro material. La molienda mecánica como medio de síntesis y modificación del material es una alternativa eficiente para la optimización de materiales almacenadores de Hidrógeno.

### Agradecimientos.

Centro de investigación CICATA-IPN Legaria por facilitar los equipos para los análisis de área superficial y los estudios de morfología. A CONACYT por la beca otorgada para la realización de la tesis y la estancia en dicho centro de investigación. A la Universidad del Papaloapan campus Tuxtepec por los equipos y espacios prestados para realizar la síntesis de las muestras.

## Caracterización de los productos de corrosión del acero galvanizado expuesto en condiciones de intemperie en Cunduacán, Tabasco, utilizando la Técnica de Rayos X.

E. Del Angel Meraz<sup>1\*</sup>, R. Falconi Calderon<sup>2</sup>, M. Acosta Alejandro<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, Cuerpo Académico de Ingeniería y Materiales

<sup>2,3</sup>Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, Cuerpo Académico de Nuevos Materiales

\*autor a contactar : ebelia.delangel@ujat.mx

**Palabras claves:** corrosión atmosférica, acero galvanizado, rayos X, Tabasco.

**Resumen:** Las muestras de acero galvanizado fueron expuestas a la intemperie en paneles de aluminio, de acuerdo a los procedimientos de las normas ISO 8565 y ASTM G 50-76, en un ambiente con clima tropical húmedo (Cunduacán, Tabasco). Se registró la velocidad de corrosión (pérdida de masa) en diferentes períodos de tiempo (Febrero-Agosto 2009). La velocidad de corrosión presentó categoría de agresividad C<sub>3</sub> (media), según ISO 9223:92. De acuerdo con la norma ISO 9223, las velocidades de deposición del contaminante dióxido de azufre (SO<sub>2</sub>) fueron de categoría de agresividad corrosiva *baja* (P<sub>0</sub>) y el cloruro de sodio (NaCl) de categoría S<sub>1</sub> (*baja*). El análisis de rayos X, muestra los productos de corrosión que se formaron en el acero galvanizado, fueron; la simonkolleita [Zn<sub>5</sub>(OH)<sub>8</sub>Cl<sub>2</sub>.H<sub>2</sub>O], la gordoita [Zn<sub>4</sub>Na(OH)<sub>6</sub>(SO<sub>4</sub>)Cl.(H<sub>2</sub>O)<sub>6</sub>] y el hidroxisulfato de zinc pentahidratado (Zn(OH)<sub>2</sub>)<sub>3</sub>(ZnSO<sub>4</sub>)(H<sub>2</sub>O)<sub>5</sub>. Los resultados demuestran el efecto de los contaminantes (NaCl y SO<sub>2</sub>) en la corrosión del acero galvanizado en Cunduacán, Tabasco.

**Agradecimientos.** A López G. F., Rueda de León R. J.J por el apoyo en los análisis de laboratorio. A la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco por el apoyo brindado para el desarrollo del proyecto: “Influencia de los contaminantes atmosféricos (SO<sub>2</sub> y NaCl) en la corrosión del acero galvanizado en Cunduacán, Tabasco”.

### Referencias

1. ISO 8565, Corrosion of Metals and Alloys - Atmospheric Corrosion Testing-General Requirements for Field Tests, International Organization for Standardization, Geneva, Switzerland, (1992).
2. ASTM G 50-76, Standard Practice for Conducting Atmospheric Corrosion Test on Metals, ASTM International, (2003).
3. ISO 9223, Corrosion of Metals and Alloys. Corrosivity of Atmospheres. Classification, International Organization for Standardization, Geneva, Switzerland, (1992).
4. ISO 9225, Corrosion of Metals and Alloys, Corrosivity of Atmospheres. Measurement of pollution, International Organization for Standardization, Geneva, Switzerland, (1992).

## Estudio morfológico de nanopartículas de Ag mediante TEM

J. C. Flores García<sup>1,2,\*</sup>, S. Basurto Cereceda<sup>2</sup>, F. Paraguay Delgado<sup>3</sup>, R. Palomino Merino<sup>4</sup>, C. Aguilar<sup>4</sup>, D. Hernández

<sup>1</sup>Departament de Física Aplicada, Escola d'Enginyeria de Telecomunicació i Aeronàutica de Castelldefels. Universitat Politècnica de Catalunya. c/Esteve Terrades 7, Parc Mediterrani de la Tecnologia, 08860-Castelldefels, Barcelona.

<sup>2</sup>Instituto Tecnológico Superior de Poza Rica, Ingeniería en Nanotecnología, C. Luis Donaldo Colosio Murrieta s/n, Col. Arroyo del Maíz. 93230, Poza Rica. Veracruz. México.

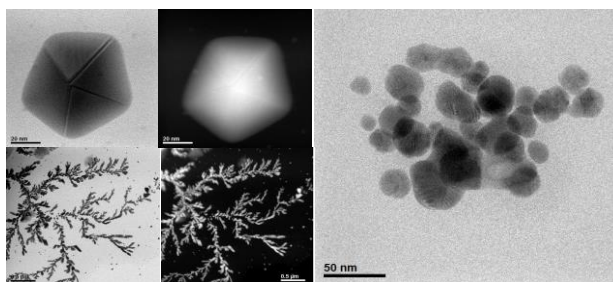
<sup>3</sup>Centro de Investigación en Materiales Avanzados. Ave. Miguel de Cervantes 120 Complejo Industrial Chihuahua, Chihuahua, Chihuahua, México C.P. 31109.3.

<sup>4</sup>Posgrado en Física Aplicada, Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Av. 18 Sur y Av. San Claudio, Ciudad Universitaria, Col. San Manuel, Puebla, Pue. México CP 72570

\* Autor a contactar: hjcflores@hotmail.com

Palabras clave: nanopartículas de plata, plasmón, nanoestructuras, nano-hojas.

Las nanopartículas de metales nobles (NPs) tienen aplicación en varios campos de la ciencia y la tecnología debido a sus inusuales propiedades y potenciales aplicaciones en diferentes áreas. En particular, las aplicaciones de las NPs de plata se pueden encontrar en catalizadores, etiquetadores y en aplicaciones biomédicas. A diferencia de los métodos existentes para la síntesis de nanopartículas de plata, el que aquí se presenta es una técnica sencilla [1] en la que se utilizó un sistema de reflujo para evitar pérdida de la solución por evaporación. Para la obtención de la solución de NPs de Ag se utilizó una mezcla de 2-Propanol, PVP, AgNO<sub>3</sub> (nitrato de plata) y citrato de sodio, en agitación vigorosa. El proceso fue llevado de la temperatura ambiente hasta los 116°C con una velocidad de reflujo muy alta, de 53 gotas por minuto, durante 30 minutos desde el inicio del goteo. Los resultados de UV-Vis confirmaron la formación de partículas de tamaño nanométrico debido a la presencia del plasmón, centrado alrededor de 412 nm. Las muestras fueron lavadas para su caracterización. Con el microscopio electrónico de transmisión TEM se obtuvieron imágenes de campo claro y campo oscuro. Las imágenes confirman la formación de NPs de plata cuyos tamaños oscilan entre los 24 y 45nm, es posible encontrar partículas de plata de tamaño nanométrico con forma decahédrica en la cual se observan los planos cristalinos cuya distancia interplanar es de 1.445 nm, además de encontrar ramificaciones cuyo tamaño de las "hojas" ronda en los 7 nm, con longitudes hasta los 3.2 micras, véase la figura 1. Los análisis de composición química confirman la presencia de plata metálica.



**Figura 1.** Imágenes obtenidas por TEM en campo claro y campo oscuro de diferentes morfologías (decahedros y ramificación de plata).

### Referencias

1. J.C. Flores, V Torres, M. Popa, D. Crespo, J. M. Calderón Moreno, *Journal of NonCrystalline Solid*. 354 (2008), 5435-543.

## Elaboracion de Teleruro de Cobre (CuTe) mediante reacciones químicas

E. Fernández-Díaz<sup>1,2,\*</sup>, B. H.A.Pineda-Leon<sup>1,4</sup>, C. R. Godoy-Rosas<sup>1,4</sup>, D. M.A Santana Rojas<sup>1,2</sup>, E. O.Arellano-Tanori<sup>1,2,3</sup>, E. T. Mendivil-Reynoso<sup>1,5,6</sup>, F. H.A.Pineda-Leon<sup>1,4,b</sup>, G. R.Ochoa-Landin<sup>6</sup>, H. S.J. Castillo<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Investigación en Física, Universidad de Sonora, Apdo. Postal 5-088 CP 83000, Hermosillo, Sonora, México.

<sup>2</sup>Instituto Tecnológico de Hermosillo, Av. Tecnológico s/n Col. Sahuaro, CP 83170, Hermosillo, Sonora, México.

<sup>3</sup>Instituto Tecnológico y de Estudios Superiores de Monterrey, Campus Sonora N., Blvd. Enrique Mazón López No.965, CP 8300, Hermosillo, Son, Mex.

<sup>4</sup>Departamento de Matemáticas, Universidad de Sonora, Luis Donaldo Colosio y Rosales s/n CP 83000, Hermosillo, Sonora, México.

<sup>5</sup>Centro de Investigación en Materiales Avanzados, Miguel de Cervantes 120, Complejo Industrial. CP 31109 Chihuahua, Chih, México.

<sup>6</sup>Departamento de Física, Universidad de Sonora, Apdo. Postal 1626, CP 83000, Hermosillo, Sonora, México.

Autor a contactar: efdtigre@yahoo.com

Palabras clave: teleruro de cobre, fotometría XPS, FTIR, gap, cristalina ortorrómbica, rongalita, iones de telurio.

Resumen. El método utilizado para la síntesis de telururo de cobre se basa principalmente en los precursores de reacción química que contienen telurio y cobre. Se usa Nitrato de cobre para producir cobre, para los iones de telurio Rongalite telurio. El espectro de absorción de la muestra de telururo de cobre valores de banda prohibida directa 3,01 eV y 2,91 eV banda prohibida indirecta a temperatura ambiente correspondientes. Se realizaron estudios de FTIR correspondiente al espectro de picos de absorción característicos de telurio de cobre 530 cm<sup>-1</sup>, que identifica las nanopartículas de cobre. La muestra del estudio Raman exhibe bandas en 411, 438 y 471 cm<sup>-1</sup> en telurato de cobre hidratado (CuTeO<sub>3</sub> · 2H<sub>2</sub>O). XPS telururo de cobre, muestra los picos para Te 3d<sub>3</sub> y 3d<sub>5</sub> Te correspondiente al valor de la energía de 575,5 eV, que identifica los iones de telurio de unión; Te región 3d muestra que la valencia de Te es -2, mientras que la región de valencia espectáculo de Cu 3p para cobre 1. En la muestra de TEM de telururo de cobre, se puede observar un aspecto de un nano-oruga bien definida. Difracción de electrones muestra la distancia interplanar 3.514 Å y d = 3,566 Å muy similares y dilucidado la estructura cristalina, estas distancias son típicas de un compuesto cristalino ortorrómbico CuTe (JCPDS # 22-0252), el estudio se logra al magnificar la región hasta el 10 nm (400 000 extensiones). El estudio de rayos X de dispersión espectroscopia de energía (EDS) cuantifica los elementos en por ciento en peso, 74,92 % de cobre en peso y 8,56 % en peso de telurio.

**Agradecimientos.** CONACYT, UNISON, ITH.

### Referencias

1. Wang, G., Zhang, J., Dai, S., Yang, J., Jiamg, Z. (2005). Thermal analyses, spectral characterization and structural interpretation of Yb<sup>3+</sup> doped TeO<sub>2</sub>-ZnCl<sub>2</sub> glasses. *Physics Letters A*. 341, 285-290.
2. O'Donnell, M. D., Miller, C. A., Furniss, D., Tirkhomirov, V. K., Seddon, A. B. (2003). Fluorotellurite glasses with improved mid-infrared transmission. *Journal of Non-Crystalline Solids*. 331, 48-57.
3. Ilieva, D., Dimitrov, V., Dimitriev, Y. (1997). Infrared spectral study on tellurite vanadate vitreous systems containing ZnO and CdO. *Physics and Chemistry of Glasses*. 38(2), 79-82.
4. Balzar, D. & Popa, N.C., 2004, in *Diffraction Analysis of the Microstructure of Materials*, edited by E.J. Mittemeijer & P. Scardi (Berlin: Springer), pp. 125-145.

## Síntesis y caracterización de telururo de estroncio ( $\text{SrTe}_2$ ) mediante baño químico, utilizando cloruro de estroncio y iones de telurio en rongalita.

E.Fernandez-Diaz<sup>1,2</sup>, B. H.A.Pineda-Leon<sup>1,3</sup>, C. R.Godoy-Rosas<sup>1,3</sup>, D. M.A.Santana-Rojas<sup>1,2</sup>, E. T.Mendivil-Reynoso<sup>1,4</sup>, F. O.Arellano-Tanori<sup>2</sup>, G. R.Ochoa-Landin<sup>4</sup>, H. S.J. Castillo<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de investigación en Física, Universidad de Sonora, Apdo. Postal 5-088 CP 83000, Hermosillo, Sonora, México.

<sup>2</sup>Instituto Tecnológico de Hermosillo, Av. Tecnológico s/n Col. Sahuaro, CP 83170, Hermosillo, Sonora, México.

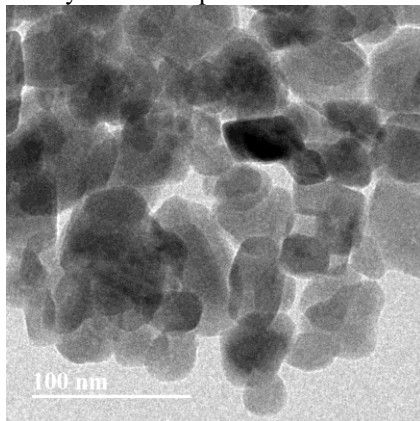
<sup>3</sup>Departamento de Matemáticas, Universidad de Sonora, CP 83000, Hermosillo, Sonora, México.

<sup>4</sup>Departamento de Física, Universidad de Sonora, Luis Donald Colosio y Rosales S/N CP 83000, Hermosillo, Sonora, México.

Autor a contactar: efdtigre@yahoo.com

Palabras clave: Teluro de Estroncio, rongalita, semiconductores, bandgap, absorción óptica.

Resumen. Este trabajo trata de un método de obtención del Teluro de Estroncio, dicho trabajo reporta pocas investigaciones relacionadas en las cuales fue sintetizado el telurio de estroncio y forman parte de esta investigación, ya que en ellas, se validan los resultados obtenidos en este documento. Se propone nuevo método de síntesis, con el cual se obtienen resultados satisfactorios que son similares a los reportados en otras investigaciones. El método utilizado para la síntesis del telurio de estroncio es por baño químico basada fundamentalmente en precursores que contengan el telurio y el estroncio. Se muestra la caracterización de absorción óptica donde se determino un bandgap indirecto de 1 eV y de 3.3eV de bandgap directo. Posteriormente se caracterizo el telurio de estroncio con el FTIR se observaron picos de absorción aproximadamente en 3446 y 1600  $\text{cm}^{-1}$  para el telurio metálico, los cuales corresponden a la vibración O-H y a una vibración de flexión H-O-H, respectivamente, esto se debe a la absorción de  $\text{H}_2\text{O}$  en estas muestra. La siguiente caracterización fue la espectroscopia RAMAN, obteniéndose aproximadamente 158  $\text{cm}^{-1}$ , que se le atribuye a los compuestos binarios de telurio de estroncio.



**Agradecimientos.** O. Arellano-Tanori, Judith Celin Tanori, Ramon Iniguez, Roberto Mora, CONACYT, UNISON, ITH, DIFUS.

### Referencias

1. Khenata, R., Baltache, H., Rérat, M., Driz, M., Sahnoun, M., Bouhafs, B., Abbar, B. (2003). First-principle study of structural, electronic and elastic properties of SrS, SrSe and SrTe under pressure. *Physica B*. 339, 208-215.
2. Hussin, R., Aziz, N., Rohaizat, A., Deraman, K., Nurulhuda, W., Shamsuri, W., Halim, D. N., Husin, M. S., Ahmad, N. E. (2011). Vibrational studies of strontium antimony phosphate glass. *Solid State Science and Technology*. 19(2), 363-370.

## **Esferoidización de la fase intermetálica Al<sub>3</sub>Ni por medio de solidificación rápida**

J. Miranda-Chávez, O. Novelo-Peralta, G. A. Lara, G. González, I. A. Figueroa\*

Instituto de Investigaciones en Materiales, (UNAM), Circuito Exterior S/N, Cd. Universitaria, C.P. 04510, México, D.F.

\* Autor a contactar: [iafigueroa@unam.mx](mailto:iafigueroa@unam.mx)

Palabras clave: Aleaciones de aluminio, intermetálicos, solidificación rápida, esferoidización

Resumen. El presente estudio examina el comportamiento de tres aleaciones Al-Ni: una hipoeutéctica (4.1%Ni), una eutéctica (6.1% Ni) y una hipereutéctica (8.1%Ni), cuando se procesan por medio de la técnica de solidificación rápida; melt spinning, a tres velocidades del disco (20, 30 y 40 m/s). Con la finalidad de modificar la morfología de las partículas del intermetálico Al<sub>3</sub>Ni presente en este tipo de aleaciones. La hipótesis es modificar la ductilidad de estas aleaciones, que es muy baja, a partir de la esferoidización de la fase intermetálica. Las microestructuras resultantes se analizaron con microscopía electrónica de barrido (MEB) para compararlas con su correspondiente microestructura de colada. Se utilizó la técnica de difracción de rayos X (DRX) con el objeto de identificar las fases cristalinas presentes en cada una de las aleaciones, donde se espera obtener fases metaestables. Por otro lado, se determinó el efecto del tamaño de partícula sobre el ancho del pico de difracción. Además se hicieron análisis de calorimetría diferencial de barrido (DSC) para conocer la estabilidad térmica de las microestructuras obtenidas por solidificación rápida en cada aleación y al final se realizaron ensayos de microdureza con el fin de evaluar el efecto de los intermetálicos globulares Al<sub>3</sub>Ni en la dureza de cada aleación.

**Agradecimientos.** Los autores agradecen el soporte económico de SEP-CONACYT 178289 por el financiamiento del proyecto. También, se agradece a: A. Tejeda-Cruz, J. J. Camacho, J. Morales-Rosales, C. Flores-Morales, C. Flores, C. Delgado, G. Aramburo, D. Cabrero y E. Sánchez, por el soporte técnico.

## Síntesis y caracterización de nanopartículas de Ag realizadas con nitrito de plata

J.C. Flores García<sup>1,2\*</sup>, F. Paraguay Delgado<sup>3</sup>, R. Palomino Merino<sup>4</sup>.

<sup>1</sup>Departament de Física Aplicada, Escola d'Enginyeria de Telecomunicació i Aeronàutica de Castelldefels. Universitat Politècnica de Catalunya. c/Esteve Terrades 7, Parc Mediterrani de la Tecnologia, 08860-Castelldefels, Barcelona.

<sup>2</sup>Instituto Tecnológico Superior de Poza Rica, Ingeniería en Nanotecnología, C. Luis Donaldo Colosio Murrieta s/n, Col. Arroyo del Maíz. 93230, Poza Rica. Veracruz. México.

<sup>3</sup>Centro de Investigación en Materiales Avanzados. Ave. Miguel de Cervantes 120 Complejo Industrial Chihuahua, Chihuahua, Chihuahua, México C.P. 31109.3.

<sup>4</sup>Posgrado en Física Aplicada, Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Av. 18 Sur y Av. San Claudio, Ciudad Universitaria, Col. San Manuel, Puebla, Pue. México CP 72570.

\* Autor a contactar: hjcflores@hotmail.com

Palabras clave: nanopartículas de plata, nitrato de plata, nanoestructuras, óxido de plata, síntesis de nanopartículas.

Resumen. Se sintetizaron nanopartículas (NPs) de plata por un método químico utilizando un sistema de reflujo, el cual se le incrementó paulatinamente su temperatura desde 22°C hasta 116°C. Para la síntesis de NPs se agregaron 2-Propanol, PVP, nitrito de plata y citrato de sodio dentro de un sistema de reflujo, se agitaron vigorosamente. La solución resultante mostró el plasmón característico centrado alrededor de 410 nm, confirmando la formación de NPs como lo muestra la figura 1. Las NPs de plata se limpiaron previamente con agua tridestilada y se centrifugaron 3 veces durante 15 minutos para ser analizadas en el microscopio electrónico de transmisión. Los resultados de TEM muestran que se obtuvieron NPs de plata metálica, cuyos tamaño promedio son de 45 nm. Con EDS se pudo comprobar que el material que conforman las partículas es plata metálica. Sin embargo, los resultados de XRD mostraron la existencia de óxido de plata según la tabla 004-0783, debido a que en la preparación de muestra las nanopartículas de plata se expusieron al aire sobre una oblea de silicio puro.

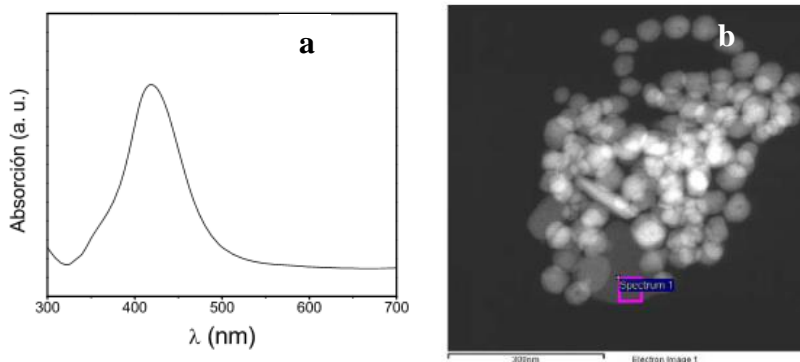


Figura 1. a) Plasmón característico a las nanopartículas de plata, UV-VIS. b) Imagen de TEM de nanopartículas de plata.

### Referencias

1. J.C. Flores, V Torres, M. Popa, D. Crespo, J. M. Calderón Moreno, Journal of NonCrystalline Solid. 354 (2008), 5435-5439.
2. Juan C. Flores, Victor Torres, Monica Popa, Daniel Crespo, José M. Calderón-Moreno. Colloids and surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects. 330 (2008), 86-90.

## **Inspección de factores ambientales en aceros SAE 1010 para la aplicación de epóxico poliamidas en atmósfera marina-industrial en Paraíso, Tabasco.**

Evelia Del Ángel Meraz<sup>1</sup>, José del Carmen Hernández de la Cruz<sup>2\*</sup>, Eduardo Torres Aguilar<sup>2</sup>, Daniel Gutiérrez Ramos<sup>3</sup>

1 Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, DAIA, Cuerpo Académico de Ingeniería y Materiales, Km.1 Carretera Cunduacán- Jalpa de Méndez, CP 86690, Cunduacán, Tabasco, México.

2 Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, DACB, Km.1 Carretera Cunduacán-Jalpa de Méndez, CP86690, A. P. 24, Cunduacán Tabasco, México.

3 Universidad Tecnológica de Tabasco, División de Química, Cuerpo Académico de Materiales y Corrosión, Carr. Vhsa-Teapa Km 14.6 S/N, Parrilla, Centro, Tabasco, México.

Autores a contactar: josedelchdez@hotmail.com [ebelia.delangel@daia.ujat.mx](mailto:ebelia.delangel@daia.ujat.mx)

Palabras clave: acero, atmósfera, inspección, epóxico, recubrimientos.

Resumen. La técnica de uso adecuado de los equipos y el correcto seguimiento en las secuencias de la inspección de los factores ambientales como humedad relativa y temperatura del sustrato, es de vital importancia para cualquier persona que trabaje en el área para decidir si se aplica el recubrimiento epóxico poliamidas a acero SAE 1010 en atmósfera marina-industrial en Paraíso Tabasco, por lo cual en el presente cartel, se presenta como una herramienta que facilitara el acceso a este conocimiento de tal manera que la formación práctica sea integral y aplicada en el sector laboral, ya que normalmente este se adquiere en la práctica fuera de la escuela, cuando lo ideal es que el estudiante aprenda precisamente antes de insertarse en el campo profesional.

También se perfila como una herramienta de capacitación en las empresas que aplican recubrimientos anticorrosivos como Pemex, Gas y Petroquímica Básica, Comisión Federal de Electricidad, Complejo Procesador de Gas Nuevo Pemex, etc. Y que requieren que sus nuevos empleados aprendan a realizar la inspección de factores ambientales antes de aplicar el sistema recubrimiento anticorrosivo epóxicos poliamidas a los aceros SAE 1010.

Los equipos que se utilizan para la inspección es el termo higrómetro digital para medir la humedad relativa y el termómetro magnético que se utiliza para medir la temperatura del acero SAE 1010. Para decidir de acuerdo a los resultados obtenidos y conforme a la norma NRF-053-PEMEX-2006 si se acepta o se rechaza empezar la aplicación del epóxico poliamidas al acero SAE 1010 en atmósfera marina-industrial en Paraíso, Tabasco, México.

### **Referencias**

- 1.- NACE VIS 7 Contaminantes visibles 1995.
- 2.- NRF-053-PEMEX-2006 Sistema de protección anticorrosiva a base de recubrimientos para instalaciones superficiales 2006.
- 3.- NACE STANDAR 6G198 Wet Abrasive Blast Cleaning SSPC/TR 2:1998
- 4.- STRUCTURE STEEL PAINTING COUNCIL SSPC-VIS 1 Visual Standard for Abrasive Blast Cleaned Steel.



## Síntesis y caracterización de selenuro de cobalto (CoSe<sub>2</sub>) MEDIANTE reacción química.

H.A.Pineda-Leon<sup>1,3\*</sup>, B. R.Godoy-Rosas<sup>1,3</sup>, C. E. Fernández-Díaz<sup>1,2</sup>, D. M.A. Santana Rojas<sup>1,2</sup>, E. T.Mendivil-Reynoso<sup>1,4</sup>, F. O.Arellano-Tanori<sup>2</sup>, G. R.Ochoa-Landín<sup>4</sup>, H. S.J.Castillo<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Investigación en Física, Universidad de Sonora, Apdo. Postal 5-088 CP 83000, Hermosillo, Sonora, México.

<sup>2</sup>Instituto Tecnológico de Hermosillo, Av. Tecnológico s/n Col. Sahuaro, CP 83170, Hermosillo, Sonora, México.

<sup>3</sup>Departamento de Matemáticas, Universidad de Sonora, CP 83000, Hermosillo, Sonora, México.

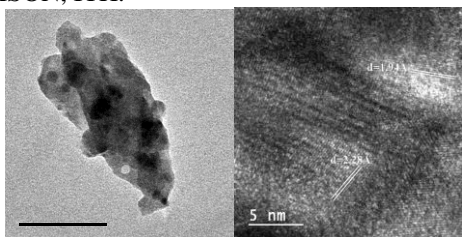
<sup>4</sup>Departamento de Física, Universidad de Sonora, Luis Donald Colosio y Rosales S/N CP 83000, Hermosillo, Sonora, México.

Autor a contactar: horanpile@hotmail.com

Palabras clave: Selenuro de Cobalto, nanopartículas, caracterización, morfología.

Resumen. se obtiene CoSe<sub>2</sub> usando un método de reacción química por intercambio iónico, en el cual se usan precursores con cobalto y selenio. La caracterización de absorción óptica reportada en este trabajo, es similar a la obtenida en un modelo matemático previamente reportado, se encontró tanto el bandgap directo que fue de 1.7eV y el bandgap indirecto que fue de 1.4eV. La espectroscopia FTIR que muestra esta investigación para el selenuro de cobalto, coincide con datos previamente reportados, lo que valida la obtención del CoSe, en el espectro de infrarrojo, aparecen las mismas bandas correspondientes en 3446 y 1600 cm<sup>-1</sup> para el selenuro metálico, y éstas corresponden a la vibración O-H y a una vibración de flexión H-O-H, respectivamente. Al utilizar la espectroscopia RAMAN para analizar CoSe, se identificaron las frecuencias que lo caracterizan, se observo el pico correspondiente a 192 cm<sup>-1</sup> que es del CoSe<sub>2</sub>. También en este documento se reporta el estudio de XPS que se realizó para el CoSe; obteniéndose energías de enlaces características para el cobalto y selenio. Los picos característicos de cobalto 2p1 y Co 2p3 se determinaron en 802 eV y 782 eV, mientras que los picos del selenio se encuentran en 163 eV y 57 eV, para Se 3p3 y Se 3d5. Por último, se realizó el estudio del TEM, donde se observaron pequeñas aglomeraciones o agregados del compuesto y se obtuvieron las correspondientes distancias interplanares  $d = 2.28 \text{ \AA}$  y  $d = 1.94 \text{ \AA}$ , que son correspondientes a una estructura ortorrómbica relacionada al compuesto CoSe<sub>2</sub>.

**Agradecimientos.** CONACYT, UNISON, ITH.



## Referencias

1. Zhao, D., Zhang, S., Yin, G., Du, C., Wang, Z., Wei, J. (2013). Tungsten doped Co-Se nanocomposites as an efficient non precious metal catalyst for oxygen reduction. *Electrochimica Acta*, 91, 179-184.
2. Zhu, L., Teo, M., Wong, P.C., Wong, K. C., Narita, I., Ernst, F., Mitchell, K. A. R., Campbell, S. A. (2010). Synthesis, characterization of a CoSe<sub>2</sub> catalyst for the oxygen reduction reaction. *Applied Catalysis A: General*, 386, 157-165.

## Teluro de cobalto nanoestructurado obtenido mediante reacción química

A.R.Godoy-Rosas<sup>1,2\*</sup>, B. H.A.Pineda-Leon<sup>1,2</sup>, C. E.Fernandez-Diaz<sup>1,3</sup>, D. M.A. Santana Rojas<sup>1,3</sup>, E. T.Mendivil-Reynoso<sup>1,4,6</sup>, F. O.Arellano-Tanori<sup>3,4</sup>, G. R.Ochoa-Landin<sup>6</sup>, H. S.J.Castillo<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de investigación en Física, Universidad de Sonora, Apdo. Postal 5-088 CP 83000, Hermosillo, Sonora, México.

<sup>2</sup>Departamento de Matemáticas, Universidad de Sonora, CP 83000, Hermosillo, Sonora, México.

<sup>3</sup>Instituto Tecnológico de Hermosillo, Av. Tecnológico s/n Col. Sahuaro, CP 83170, Hermosillo, Sonora, Mexico.

<sup>4</sup>Instituto Tecnológico y de Estudios Superiores de Monterrey, Campus Sonora Norte, Blvd. Enrique Mazon Lopez No.965, CP 8300, Hermosillo, Sonora, Mexico.

<sup>5</sup>Centro de Investigación en Materiales Avanzados, Miguel de Cervantes 120, Complejo Industrial. CP 31109 Chihuahua, Chih., México.

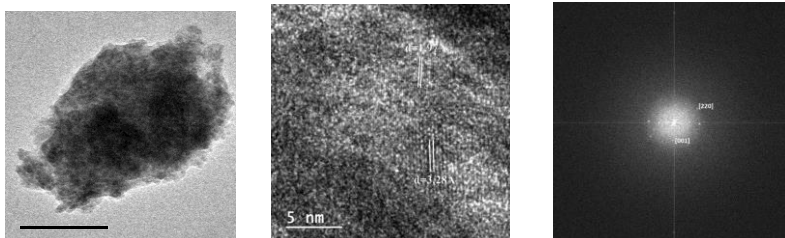
<sup>6</sup>Departamento de Física, Universidad de Sonora, Luis Donald Colosio y Rosales S/N CP 83000, Hermosillo, Sonora, México.

Autor a contactar: rodolfogodoyrosas@hotmail.com

Palabras clave: nanopartículas, teluro de cobalto, caracterizaciones, intercambio iónico bandgap.

Resumen: Este material se obtuvo mediante el uso de iones cloruro de cobalto y telurio en ronalita como precursores, en el teluro de reacciones químicas de cobalto. se obtuvo polvo nanoestructurado el cual se caracterizó obteniéndose los siguientes resultados: UV-Vis de banda prohibida directa e indirecta de 1,7 eV y 2,32 respectivamente. IR La muestra se mezcló con pastillas de KBr para la lectura del espectro, se puede ver que los picos de absorción en FTIR para teluro de cobalto muestra picos de absorción a 3446 y 1600  $\text{cm}^{-1}$  y en 524  $\text{cm}^{-1}$  corresponde a las vibraciones de enlaces CO -O, la existencia de este pico es terreno para determinar la formación de nanopartículas de teluro de cobalto. El espectro Raman de la muestra de Teluro de Cobalto muestra las frecuencias que coinciden con los de las referencias enumeradas. Espectro XPS para el compuesto de teluro de cobalto incluye dos energías de enlace correspondientes a telurio de Te 3d5 / 2 y Te 3d3 / 2, y el cobalto 2 p / 2 y 2 P1 / 2 para las características indicadas. TEM la distancia interplanar obtenidos fueron  $d = 3,28 \text{ \AA}$  y  $d = 1.97 \text{ \AA}$

**Agradecimientos.** Conacyt, UNISON, ITH, STAUS.



## Referencias

- 1.- Himei, Y., Osaka, A., Nanba, T., Miura, Y. (1994). Coordination Change of Te Atoms in Binary Tellurite Glasses. *J. Non-Cryst. Solids*. 177(1), 164–169.
- 2.- Xie, Y., Li, B., Su, H., Liu, X., Qian, Y. (1999). Solvothermal route to CoTe<sub>2</sub> nanorods. *Nanostructured Materials*. 11(4), 539-544.

## Obtención de una espuma metálica de Al-Cu-Fe por tratamiento térmico

I.A. Figueroa<sup>\*</sup>, M.A. Suárez, O. Novelo-Peralta, G.A. Lara-Rodríguez, I. Alfonso-López, G. González

Instituto de Investigaciones en Materiales, (UNAM), Circuito Exterior S/N, Cd. Universitaria, C.P. 04510, México, D.F.

<sup>\*</sup> Autor a contactar: [iafigueroa@unam.mx](mailto:iafigueroa@unam.mx)

Palabras clave: Espumas, Tratamientos térmicos, Fases, Aleación Al-Cu-Fe, Porosidad

Resumen. Esta investigación presenta un estudio sobre la secuencia de formación de macro porosidad durante tratamientos térmicos de la aleación  $\text{Al}_{68}\text{Cu}_{20}\text{Fe}_{12}$ . Las técnicas de difracción de rayos X, Calorimetría DTA, Microscopia Electrónica de Barrido, Microscopia Electrónica de Transmisión y Microscopia Óptica fueron usadas para describir y analizar los resultados experimentales. La aleación solidificada lentamente ( $0.05^\circ\text{C/s}$ ) presentó una microestructura multi-fásica constituida principalmente por la fases monoclinica  $\lambda\text{-Al}_{13}\text{Fe}_4$ , I-cosaedral, tetragonal  $\theta\text{-Al}_2\text{Cu}$  y tetragonal  $\omega\text{-Al}_7\text{Cu}_2\text{Fe}$ . Trazas de las fases cúbica tipo CsCl  $\tau\text{-AlFe}$  y monoclinica  $\eta\text{-AlCu}$  también fueron detectadas en la microestructura de colada. Para llevar a cabo las transformaciones de fase y la formación de la macro-porosidad en las muestras de colada, se efectuaron tratamientos térmicos a  $750^\circ\text{C}$  durante tiempos cortos, desde 3min a 15 min y tiempos largos a 3h y 6h. Además se efectuaron tratamientos térmicos a mayores temperaturas;  $900^\circ\text{C}$  durante 6h. Durante el tratamiento térmico, las fases con punto de fusión menores a  $750^\circ\text{C}$  tales como  $\eta\text{-AlCu}$ ,  $\theta\text{-Al}_2\text{Cu}$  and  $\tau\text{-AlFe}$  fueron fundidas consecutivamente. La fase líquida resultante causó formación de macro porosidad y transformación de fases. Después de los tratamientos térmicos, las muestras estuvieron formadas por una estructura metálica constituida por varias fases y por una gran cantidad de macro poros superficiales e internos interconectados con morfología tetragonal.

La densidad de las muestras y el porcentaje de porosidad dependieron en gran medida a las condiciones de tratamiento térmico. Las muestras tratadas a  $900^\circ\text{C}$  por 6h alcanzaron una porosidad del 65% y una densidad de  $1.5\text{ g/cm}^3$ . Estos arreglos de poros-estructura metálica constituyen una espuma de aleación Al-Cu-Fe.

**Agradecimientos.** Los autores agradecen el soporte económico de SENER-CONACYT 151496 por el financiamiento del proyecto. También, se agradece a: A. Tejeda-Cruz, J. J. Camacho, J. Morales-Rosales, C. Flores-Morales, C. Flores, M.J. Arellano-Jiménez, C. Delgado, G. Aramburo, D. Cabrero, C. González y E. Sánchez, por el soporte técnico.

## Elaboración películas delgadas de telururo de cadmio mediante deposición por láser pulsado

H.A.Pineda-Leon<sup>1,2\*</sup>, M.A.Santana-Rojas<sup>1,3</sup>, M.A.Quiroga-de la Torre<sup>1,3</sup>, O.M. Rodríguez-Sánchez<sup>1,2,3</sup>, E. L.Morales-Peral<sup>1,2</sup>, F. R.Godoy-Rosas<sup>1,2</sup>, G. M.A. Ruiz<sup>1</sup>, H. S.J.Castillo<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de investigación en Física, Universidad de Sonora, Apdo. Postal 5-088 CP 83000, Hermosillo, Sonora, México.

<sup>2</sup> Departamento de Matemáticas, Universidad de Sonora, Luis Donaldo Colosio y Rosales S/N CP 83000, Hermosillo, Sonora, México.

<sup>3</sup>Instituto Tecnológico de Hermosillo, Av. Tecnológico S/N Col. El Sahuaro, CP 83170, Hermosillo, Sonora, México.

Autor a contactar: horanpile@hotmail.com

Palabras clave: Películas delgadas, semiconductores, Telururo de cadmio, sustrato, deposición por láser pulsado.

Resumen. El propósito de este trabajo es mostrar el crecimiento correlacionado con las condiciones de deposición de películas delgadas de CdTe mediante el método de deposición por láser pulsado. Se muestran micrografías que fueron obtenidas con el microscopio electrónico de barrido tanto de vista superior como de vista transversal con diferentes escalas de magnificación las que se indican, para medir el tamaño de los granos en cada una de las películas. Las condiciones de crecimiento de estas películas de CdTe consistieron de mantener el sustrato a una temperatura de 400 ° C, 100 mT de presión y una frecuencia de 10 Hz. Se puede constatar que al elevar la temperatura del sustrato al momento de hacer el depósito se obtiene un mayor tamaño de grano de la película.

Agrademos. A los doctores: Dr. José Santos Castillo, Dra. Milka Elena Acosta Enriquez, Dra. Ma. Elena Zayas, Universidad de Sonora y CONACyT.

### Referencias

1. Arreola-Jardón, L.A. González, L.A. García-Cerda, B. Gnade, M.A. Quevedo-López and R. Ramírez-Bon, "Ammonia-free chemically deposited CdS films as active layers in thin film transistors", G., journal of Thin Solid Films, 517-520, Vol.519, Issue 1, 29 October (2010)
2. Pauer S.M., Pauer B.S., Kim J.H., Oh-Shim Joo, C.D. Lokhande, "Recent status of chemical bath deposited metal chalcogenide and metal oxide thin films", Current Applied Physics Vol. 11, p.117-161 (2011)
3. Potlog, T., Ghimpu, L., Antoniuc, C., Gashin, P., Pudov, A.O., Sites, J.R., 2003. "Photovoltaic parameters of CdS/CdTe solar cells as a function of processing parameters". In: Proceedings of the ISES Solar World Congress. Goteborg, Sweden, June 14–19, p. 4.30.
4. S.J. Castillo, A. Mendoza-Galván, R. Ramírez-Bon, F.J. Espinoza-Beltrán, M. SoteloLerma, J. González-Hernández, G. Martínez. "Structural, optical and Electrical characterization of InrCdSrglass thermally annealed system"

## Elaboracion de selenuro de cobre mediante agregacion quimica.

A.R.Godoy-Rosas<sup>1,2\*</sup>, B. H.A.Pineda-Leon<sup>1,2</sup>, C. E.Fernandez-Diaz<sup>1,3</sup>, D. M.A. Santana Rojas<sup>1,3</sup>, E. T.Mendivil-Reynoso<sup>1,4,6</sup>, F. O.Arellano-Tanori<sup>3,4</sup>, G. R.Ochoa-Landin<sup>6</sup>, H. S.J.Castillo<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de investigación en Física, Universidad de Sonora, Apdo. Postal 5-088 CP 83000, Hermosillo, Sonora, México.

<sup>2</sup>Departamento de Matemáticas, Universidad de Sonora, CP 83000, Hermosillo, Sonora, México.

<sup>3</sup>Instituto Tecnológico de Hermosillo, Av. Tecnológico s/n Col. Sahuaro, CP 83170, Hermosillo, Sonora, Mexico.

<sup>4</sup>Instituto Tecnológico y de Estudios Superiores de Monterrey, Campus Sonora Norte, Blvd. Enrique Mazon Lopez No.965, CP 8300, Hermosillo, Sonora, Mexico.

<sup>5</sup>Centro de Investigación en Materiales Avanzados, Miguel de Cervantes 120, Complejo Industrial. CP 31109 Chihuahua, Chih., México.

<sup>6</sup>Departamento de Física, Universidad de Sonora, Luis Donald Colosio y Rosales S/N CP 83000, Hermosillo, Sonora, México.

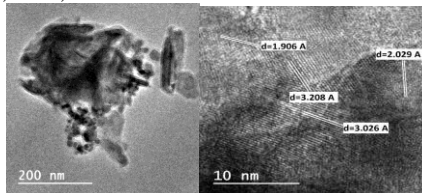
Autor a contactar: rodolfogodoyrosas@hotmail.com,

Palabras clave: Selenuro de Cobre, rongalita, semiconductores, bandgap, absorción óptica.

Resumen: Este trabajo trata de un método de obtención del selenuro de cobre, dicho trabajo reporta algunas investigaciones relacionadas en las cuales fue sintetizado el selenuro de cobre y forman parte de esta investigación, ya que en ellas, se validan los resultados obtenidos en este documento. Se propone nuevo método de síntesis, con el cual se obtienen resultados satisfactorios que son similares a los reportados en otras investigaciones. El método utilizado para la síntesis del selenuro de cobre es por reacción química basada fundamentalmente en precursores que contengan el selenio y el cobre. Para el caso cobre se utilizó el nitrato de cobre y para el selenio se manejo, el selenio en polvo activado con rongalita e hidróxido de amonio. Se muestra la caracterización de absorción óptica donde se determinó un bandgap directo de 2.79eV y de 1.36eV de bandgap indirecto. Posteriormente se caracterizó el selenuro de cobre con el FTIR se observaron picos de absorción aproximadamente en 3446 y 1600 cm<sup>-1</sup> para el selenuro metálico, los cuales corresponden a la vibración O-H y a una vibración de flexión H-O-H, respectivamente, esto se debe a la absorción de H<sub>2</sub>O en estas muestra. El pico en 514 cm<sup>-1</sup> se relaciona a nanopartículas de cobre.

La siguiente caracterización fue la espectroscopia RAMAN, obteniéndose aproximadamente 258 cm<sup>-1</sup>, que se le atribuye a los compuestos binarios de selenuro de cobre. Mediante XPS las energías de enlace correspondientes al Se 3d y Cu 2p<sub>3</sub>, son de 53 y 953 eV respectivamente. Aplicando microscopia electronica de transmisión, se confirmó que se trataba de una estructura cristalina ortorrómbica y se detectaron los índices de Miller [0 2 2] [0 2 3] [1 1 7] [1 3 3] a cada índices le corresponden las siguientes distancias interplanares 3.208 Å, 3.026Å, 3.029Å y 1.906Å.

**Agradecimientos.** Conacyt, UNISON, ITH, STAUS etc.



## Referencias

- [1] Kumar, P., Gusain, M., Nagarajan, R. (2012). Solvent-Mediated Room Temperature Synthesis of Highly Crystalline Cu<sub>9</sub>S<sub>5</sub> (Cu<sub>1.8</sub>S), CuSe, PbS, and PbSe from Their Elements. *Inorganic Chemistry*, 51, 7945-7947.
- [2] Sharma, R., Kedarnath, G., Jain V., Wadawale, A., Pillai, C. G. S., Nalliath, Manoj, Vishwanadh, B. (2011). Copper(I) 2-pyridyl selenolates and tellurolates: Synthesis, structures and their utility as molecular precursors for the preparation of copper chalcogenide nanocrystals and thin films. *The Royal Society of Chemistry*, doi: 10.1039/c1dt10461f.

## Comportamiento estructural de las fase cuasicristalina icosaedra del sistema Al-Cu-Fe sujeta a molienda mecánica y alta temperatura

C. Patiño-Carachure<sup>1,\*</sup>, M. Abatal<sup>1</sup>, I. Alfonso<sup>2</sup>, G. Rosas<sup>3</sup>, R. Esparza<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma del Carmen, Campus III, Av. Central S/N, Esq. con Fracc. Mundo Maya, C.P. 24115, Ciudad del Carmen, Campeche, México.

<sup>2</sup>Instituto de Investigaciones en Materiales. Universidad Nacional Autónoma de México. Circuito Exterior SN. Ciudad Universitaria. CP. 04510. Del. Coyoacán, México, DF. México.

<sup>3</sup>Instituto de Investigaciones Metalúrgicas, UMSNH, Edificio U, Ciudad Universitaria, C.P. 58000, Morelia, Michoacán, México.

<sup>4</sup>Centro de Física Aplicada y Tecnología Avanzada, Universidad Nacional Autónoma de México, Boulevard Juriquilla 3001, Santiago de Querétaro, Qro., 76230, México

\* Autor a contactar; e-mail: cpatino@pampano.unacar.mx.

Palabras clave: Molienda mecánica, cuasicristales, Al-Cu-Fe, transformación estructural, DRX.

Resumen. Se conoce ampliamente que las fases cuasicristalinas son de naturaleza frágil y que se limitan sus propiedades mecánicas. Sin embargo, poseen otras propiedades importantes, tales como alta dureza, bajos coeficientes de fricción, alta resistencia a la corrosión, entre otras. En este sentido, para explorar y ampliar sus posibles aplicaciones se ha sintetizado una fase cuasicristalina icosaedra i-Al<sub>6</sub>Cu<sub>2</sub>Fe del sistema Al-Cu-Fe, para ser sujeta a molienda mecánica y analizar su estabilidad estructural. La fase cuasicristalina i fue sujeta a tiempos de molienda de 1, 5, 10, 30 y 50 h, para un medio acuoso fueron empleados 0.5, 1 y 1.5 h. Por otro lado la fase i fue tratada térmicamente desde 400 a 900 °C para explorar su estabilidad térmica frente a una atmosfera de aire. Los resultados por molienda mecánica indican una transformación de la fase i a una fase cristalina tipo B2, marcando su estabilidad a los 10 h de molienda mecánica. Los resultados de la molienda en húmedo, muestran una oxidación superficial de los planos externos del cuasicristal icosaedra por lo que su tamaño se reduce de forma homogénea en la dirección radial. Finalmente los tratamientos térmicos muestran una estabilidad térmica alrededor de los 900 °C formándose una coraza de óxido de aluminio que recubre a los cuasicristales icosaedrales.

### Referencias

1. Leoni, M., Welzel, U., Lamparter, P., Mittemeijer, E.J. & Kamminga, J.-D., 2001, *Phil. Mag. A*, 81, 597.
2. Bradley, A.J., Goldschmidt, H.J., 1939, *J. Inst. Met.* **65**, 403.
3. Patiño-Carachure, C., García-De León, E., Angeles-Chávez, C., Esparza, R., Rosas-Trejo, G., 2009, *J. Non-Cryst. Solids* **355**, 1713.
4. Sordelet, D.J., Dubois, J.M., 1997, *MRS Bull.* **22**, 34.
5. Dubois, J.M., Kang, S.S., Von Stebut, J., 1991, *J. Mater. Sci. Lett.* **10**, 537.
6. Kang, S.S., Dubois, J.M., Von Stebut, J., 1993, *J. Mater. Res.* **8**, 2471.
7. Patiño-Carachure, C., et al., 2011, *Journal of Alloys and Compounds* **509**, 10036.

## Índice General de Participantes

Asistente	Adscipción	Página
Abatal Mohamed	Universidad Autónoma del Carmen, Campeche	<a href="#">57</a>
Acosta Alejandro Manuel	DACB, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco	<a href="#">106</a>
Aguirre Hernández Gerardo	Instituto Tecnológico de Tijuana	<a href="#">19</a>
Altamirano Pérez S.A.	Universidad del Papaloapan Tuxtepec, Oaxaca	<a href="#">105</a>
Álvarez Torres David	Universidad Juárez Autónoma de Tabasco	<a href="#">65</a>
Antonio Arias Jorge Eladio	DACB, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco	<a href="#">72</a>
Araux Sánchez Elizabeth	FICyM, Universidad de Sonora	<a href="#">5</a>
Arenas Alatorre Jesús	Instituto de Física, UNAM	<a href="#">4</a> , <a href="#">95</a> , <a href="#">99</a> , <a href="#">103</a>
Arias Ruíz Saira Nallely	DACB, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco	<a href="#">72</a>
Ávalos Borja Miguel	Centro de Ciencias de la Materia Condensada, UNAM	<a href="#">5</a> , <a href="#">55</a> , <a href="#">60</a>
Balmaseda Era Jorge	Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM	<a href="#">40</a> , <a href="#">41</a> , <a href="#">77</a> , <a href="#">88</a> , <a href="#">89</a>
Basurto Cereceda Sofía	Instituto Tecnológico Superior de Poza Rica	<a href="#">107</a>
Beltrán Moha Carlos Rogelio	DACB, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco	<a href="#">4</a>
Bernès Sylvain	FCQ, Universidad Autónoma de Nuevo León	<a href="#">11</a>
Billinge Simon	Universidad de Columbia, N.Y., EEUU	<a href="#">12</a>
Bokhimi Xim	Instituto de Física, UNAM	<a href="#">4</a> , <a href="#">20</a>
Bucio Galindo Lauro	Instituto de Física, UNAM	<a href="#">47</a> , <a href="#">59</a> , <a href="#">70</a> , <a href="#">81</a> , <a href="#">83</a> , <a href="#">84</a> , <a href="#">85</a>
Chateigner Daniel	Normandie Université, CRISMAT-ENSICAEN, Caen, France	<a href="#">21</a> , <a href="#">24</a>
Chávez Carvayar José	Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM	<a href="#">66</a> , <a href="#">67</a> , <a href="#">69</a>
Chávez Martínez Margarita	Universidad Autónoma Metropolitana, Azcapotzalco	<a href="#">75</a> , <a href="#">76</a>
Chávez Mendiola E.	DIF, Universidad de Sonora	<a href="#">58</a>
Cosio Castañeda C	Facultad de Química UNAM	<a href="#">96</a>
Cruz Ocampo Juan Carlos	Instituto de Geología, UNAM	<a href="#">5</a>
De la Cruz Romero Durvel	DACB, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco	<a href="#">4</a>
Del Ángel Meraz Ebelia	DAIA, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco	<a href="#">106</a> , <a href="#">112</a>
Díaz Reyes J.	Instituto Politécnico Nacional	<a href="#">97</a>

Delgado José Miguel	Universidad de los Andes, Venezuela	<a href="#">13</a>
Duax William	Universidad de Bufalo, N.Y., EEUU	<a href="#">14</a>
Enríquez Moreno Leopoldo	Jeol de México S.A. de C.V.	<a href="#">8</a>
Escalante Eduardo	FEI Company	<a href="#">8</a>
Espinosa Rosario	Anton Paar México S.A.	<a href="#">8</a>
Falconi Calderón Richart	DACB, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco	<a href="#">79, 106</a>
Fernández Díaz E.	DIF, Universidad de Sonora	<a href="#">108, 109</a>
Fernando Márquez Clemente	Universidad del Papaloapan Tuxtepec, Oaxaca	<a href="#">50, 87</a>
Figueroa Vargas Ignacio A.	Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM	<a href="#">98,110,115</a>
Flores Juan Carlos	Instituto Tecnológico Superior de Poza Rica	<a href="#">111</a>
Flores Ledesma Abygail	Facultad de Odontología, UNAM	<a href="#">85</a>
Fuentes Cobas Luis Edmundo	Centro de Investigación en Materiales Avanzados, S.C.	<a href="#">22, 27, 48</a>
Gallegos Jiménez Landí Anahí	Universidad Juárez Autónoma de Tabasco	<a href="#">64</a>
García Murillo Antonieta	CIITEC, IPN	<a href="#">46, 47</a>
García Llamas Raúl	Universidad de Sonora	<a href="#">23</a>
García Rosales Gabriela	Sociedad Mexicana de Cristalografía	<a href="#">4</a>
Godoy Rosas R.	DIF, Universidad de Sonora	<a href="#">44, 117</a>
Gómez García José Fco.	Fcaultad de Química UNAM	<a href="#">70</a>
González Amador	Universidad Politécnica de Madrid, España	<a href="#">24</a>
González F.	UAM-Iztapalapa	<a href="#">62</a>
González Reyes Gonzalo	Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM	<a href="#">98, 104, 110,115</a>
González Vergara Enrique	Benemérita Universidad Autónoma de Puebla	<a href="#">73</a>
Granados Fitch Mizraim Guillermo	Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica A.C.	<a href="#">60</a>
Hernández Juárez Edilberto	Instituto de Física, UNAM	<a href="#">90</a>
Hernández Lepe Daniel Antuhan	Instituto Tecnológico Superior de Poza Rica	<a href="#">106</a>
Hernández Silva Osiry	Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada, IPN	<a href="#">101</a>
Jacobo Miranda Juan	Bruker Mexicana S.A. de C.V.	<a href="#">8</a>
Juárez Arellano Erick A.	Universidad de Papaloapan	<a href="#">53,56</a>
Kryshtab Tetyana	Escuela Superior de Física y Matemáticas, IPN	<a href="#">91</a>
Lazo Jiménez R.E.	Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM	<a href="#">93</a>



Lobato García Carlos	DACB, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco	<a href="#">72</a>
López Pacheco German	Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM	<a href="#">62</a>
López Pérez Emanuel Asunción	Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM	<a href="#">97</a>
López Medina M.	Universidad del Papaloapan, Tuxtepec, Oaxaca	<a href="#">56</a>
Malpica Cruz Víctor M.	Instituto de Geología, UNAM	<a href="#">25</a>
Marin Romero José Alfredo	CINVESTAV Unidad Mérida	<a href="#">48</a>
Martínez Anaya Oliver	Facultad de Química, UNAM	<a href="#">59</a>
Martínez Bautista R.	Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM	<a href="#">66</a>
Martínez Caballero Carol Siseth	Instituto de Química, UNAM	<a href="#">38</a>
Martínez García A.	Universidad del Papaloapan, Tuxtepec, Oaxaca	<a href="#">55</a>
Mendoza Álvarez María Eugenia	Instituto de Física, BUAP	<a href="#">26</a>
Méndoza Pérez Víctor M	Instituto de Física UNAM	<a href="#">95</a>
Montero Cabrera María Elena	Centro de Investigación en Materiales Avanzados, S.C.	<a href="#">27</a>
Mora Fonz José Miguel	DACB, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco	<a href="#">65</a>
Morán Emilio	Universidad Complutense de Madrid, España	<a href="#">15</a>
Moreno Calles Bernardo Misael	DIF, Universidad de Sonora	<a href="#">43</a>
Moreno Cárcamo Abel	Instituto de Química, UNAM	<a href="#">28</a>
Moreno Vargas Yoshamín Abnoba	CINVESTAV, IPN	<a href="#">84</a>
Mott Marcelo	PANalytical	<a href="#">8</a>
Muciño Velez Alberto	Facultad de Arquitectura, UNAM	<a href="#">83</a>
Murillo Cordova Carlos Fernando	Universidad Juárez Autónoma de Tabasco	<a href="#">37</a>
Obregón Guerra Ricardo	FCFM, Universidad Autónoma de Nuevo León	<a href="#">63</a>
Ocaña Zurita Tito A.	DACB, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco	<a href="#">4</a>
Ortiz Pastrana N.	Facultad de Química, UNAM	<a href="#">74</a>
Pacheco Sosa José Guadalupe	DACB, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco	<a href="#">4</a>
Palacios Gómez Jesús	ESFM, IPN	<a href="#">91</a>
Palma Ramírez Diana	CICATA, IPN Unidad Altamira	<a href="#">86</a>
Patiño Carachure Cristobal	Universidad Autónoma del Carmen, Campeche	<a href="#">118</a>
Peña Jesús A.	Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM	<a href="#">52</a>
Pérez Castellanos Nora Ariadna	Instituto de Física, UNAM	<a href="#">81</a>
Pérez Vidal Hemicenda	DACB, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco	<a href="#">4</a>
Picco Díaz Edna Lillian	Spectramex S.A. de C.V.	<a href="#">8</a>

Picco Ruíz Guillermo	Spectramex S.A. de C.V.	<a href="#">8</a>
Pineda León H.A.	DIF, Universidad de Sonora	<a href="#">44</a> , <a href="#">113</a> , <a href="#">116</a>
Ramos Álvarez P.	Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM	<a href="#">67</a> , <a href="#">69</a>
Ramírez Aparicio Jeannete	CINVESTAV Querétaro	<a href="#">78</a>
Reyes Miranda Juan	CIITEC, IPN	<a href="#">45</a>
Reyes Montero Armando	Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM	<a href="#">61</a>
Reyes Ruíz Carlos Arturo	Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM	<a href="#">104</a>
Ricardez Jiménez Cristino	DACB, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco	<a href="#">4</a>
Ricardez Vargas I.	Universidad Juárez Autónoma de Tabasco	<a href="#">68</a>
Ríos Gómez María Laura	Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM	<a href="#">89</a>
Ríos Jara David	Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica A.C.	<a href="#">29</a>
Roa de la Fuente Luis Fernando	DACB, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco	<a href="#">4</a> , <a href="#">72</a>
Rodríguez Hernández Joelis	Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM	<a href="#">40</a> , <a href="#">41</a> , <a href="#">77</a> , <a href="#">89</a>
Rodríguez Hinojosa Cecilia	FCFM, Universidad Autónoma de Nuevo León	<a href="#">92</a>
Rodríguez Mijangos Ricardo	CIFUS, Universidad de Sonora	<a href="#">4</a>
Rodríguez Romero Adela	Instituto de Química, UNAM	<a href="#">16,38</a>
Rojas Blanco Lizeth	Universidad Juárez Autónoma de Tabasco	<a href="#">78</a>
Romeu Casajuana David	Instituto de Física, UNAM, México	<a href="#">30</a>
Romero Ceronio Nancy	DACB, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco	<a href="#">72</a>
Ruíz Villegas María Fernanda	FQ, Universidad Autónoma del Estado de México	<a href="#">99,100</a>
Ruvalcaba Sil José Luis	Instituto de Física, UNAM	<a href="#">31</a>
Salinas Nolasco Manlio Flavio	Escuela Nacional de Conservación Restauración y Museografía, INAH	<a href="#">80</a>
Sánchez González Elí	Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM	<a href="#">77</a>
Sánchez Lara Eduardo	Benemérita Universidad Autónoma de Puebla	<a href="#">73</a>
Sanjuán Szklarz Wieslawa Fabiola	Universidad de Varsovia, Polonia	<a href="#">36</a>
Santos Vasques Víctor	Coordinación Nacional de Conservación del Patrimonio Cultural	<a href="#">82</a>
Sanz Ángel	DiffRACTIA	<a href="#">8</a>
Segovia Urbano Carlos	Micra Ingeniería S.A. de C.V.	<a href="#">8</a>
Solorzano M.	DACB, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco	<a href="#">79</a>

---

Tabasco Carolina	CINVESTAV, IPN Unidad Mérida	<a href="#">49</a>
Tavizón Alvarado Gustavo	Facultad de Química, UNAM	<a href="#">59</a> , <a href="#">70</a>
Torres Moreno América Yazmín	Escuela Superior de Medicina del IPN	<a href="#">39</a>
Torres Torres Gilberto	DACB, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco	<a href="#">32</a>
Valera Zaragoza	Universidad de Papaloapan	<a href="#">51</a> , <a href="#">87</a>
Vera Cruz P.	Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM	<a href="#">41</a>
Verduzco J.A.	Instituto de Investigación en Metalurgia y Materiales, UMSNH	<a href="#">102</a>
Villafuerte Castrejón María Elena	Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM	<a href="#">51</a> , <a href="#">53</a> , <a href="#">60</a> , <a href="#">62</a>
Villaurrutia Rafael	FEI Company	<a href="#">33</a>
Vivar Ocampo Rodrigo	Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM	<a href="#">54</a>
West Anthony R.	Universidad de Sheffield, R. Unido	<a href="#">17</a>
Woo Patrick	Hitachi High Technology, Canadá	<a href="#">34</a>

---