



UNIVERSIDAD JUÁREZ
AUTÓNOMA DE TABASCO

"ESTUDIO EN LA DUDA. ACCIÓN EN LA FE"



Perspectiva Científica desde la UJAT

División Académica de Ciencias Básicas





José Manuel Piña Gutiérrez
Rector

Gerardo Delgadillo Piñón
Director de la División Académica de Ciencias

COMITÉ EDITORIAL

Tito Adalberto Ocaña Zurita

José Gilberto Torres Torres

María Hortensia Almaguer Cantú

José Edilberto Rodríguez Cervera

Laura Fabiola Estrada Andrade

Cristino Ricárdez Jiménez

Perspectivas Científicas desde la UJAT. División Académica de Ciencias Básicas / Editor,
Fernando Iván Fuentes Vasconcelos. – Primera edición. -- Villahermosa, Centro, Tabasco :
Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, 2017.
203 páginas : Ilustraciones. -- (Colección: Héctor Ochoa Bacelis.
Textos de enseñanza de ciencias básicas).
Incluye referencias bibliográficas al final de cada capítulo.
ISBN 978-607-606-455-9
1. Educación superior - Investigación. \I. editor.
L.C. LB2326.3 P47 2018

Primera Edición, 2018.

D. R. © Universidad Juárez Autónoma de Tabasco
Av. Universidad s/n, Zona de la Cultura
Col. Magisterial, C. P. 86040
Villahermosa, Centro, Tabasco.
www.ujat.mx

ISBN: 978-607-606-455-9

El contenido de la presente obra es responsabilidad exclusiva de los autores. Queda prohibida su reproducción total sin contar previamente con la autorización expresa y por escrito del titular, en términos de la Ley Federal de Derechos de Autor. Se autoriza su reproducción parcial siempre y cuando se cite a la fuente.

Esta obra fue dictaminada mediante el sistema de pares ciegos, por un Comité Científico Interinstitucional que contó con el apoyo de evaluadores de diferentes Instituciones y dependencias públicas, así como por el Consejo Divisional Editorial de la División Académica de Ciencias Básicas de la UJAT. Las denominaciones empleadas y la forma en que aparecen presentados los datos que contiene no implican, de parte de la UJAT, juicio alguno sobre la delimitación de fronteras o límites y la mención de empresas o productos de fabricantes en particular, estén o no patentados, no implica que la UJAT los apruebe o recomiende de preferencia a otros de naturaleza similar que no se mencionan, Aunque la UJAT fomenta la reproducción y difusión parcial o total del material contenido, queda prohibida su reproducción total sin contar previamente con la autorización expresa y por escrito del titular, términos de la Ley Federal de Derechos de Autor. Su uso para fines no comerciales se autorizará de forma gratuita previa solicitud. La reproducción para la reventa u otros fines comerciales, incluidos fines educativos, podría estar sujeta a pago de derecho o tarifas.

Apoyo editorial: Calíope Bastar Dorantes
Revisión de la edición: Dafne Rodríguez González
Responsable de la edición: Gerardo Delgadillo Piñón
José Gilberto Torres Torres
Cristino Ricárdez Jiménez

Hecho en Villahermosa, Tabasco, México.

ÍNDICE

Análisis Estadístico en la Producción De Petróleo En El Estado De Tabasco.	7
Análisis De Los Eventos Sísmicos En El Área Artesa Mundo-Nuevo Utilizando Descomposición Espectral De Frecuencias, Para La Delimitación De Rasgos Estratigráficos.	18
Diferenciabilidad De Funciones Que Preservan La Métrica.	32
Micromanipulación Óptica Por Corrientes De Convección Inducidas Por Láser.	43
Nudos Matemáticos.	50
Espinela Cromífera Como Indicador Petrogenético En Las Rocas Meta- Ultramáficas Del Basamento Del Ne De México.	59

Fotodegradación De Diurón Y De Metil Pararón Utilizando Películas Delgadas De $\text{TiO}_2\text{-GeO}_2$.	70
Efecto De Tratamiento Post-Depósito En Películas Absorbedoras $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ Desarrolladas Por La Técnica De Co-Evaporación.	82
Síntesis De B-Hidroxicetonas Por Química Verde.	91
Curva De Calibración Para Suelo Contaminado Por Hidrocarburos.	97
Los Mooc's: Aprendizaje Gratuito.	105
Estudio Biodirigido Para El Aislamiento Y Caracterización Estructural De Chalconas Presentes En <i>Haematoxylum Campechianum</i>.	113
Las Baterías De Ion Sodio.	124
Localización Y Relocalización De Sismos Con Una Y Tres Estaciones: Ejemplo En Eventos Intraplaca.	133
Tomografía De Resistividad Eléctrica	142

**Tridimensional (Tre 3d) En El Plantel
Casa Libertad De La Uacm Usando
Arreglo Tipo “L”.**

**Variabilidad De La Temperatura
Superficial Del Aire En El Estado De
Tabasco.** 153

**Efecto Bactericida De Metabolitos
Secundarios Producidos Por Especies
De *Bacillus Spp.* Contra Bacterias Gram
Positivas Y Gram Negativas.** 163

**Panorama De Los Sistemas De Control
De Tráfico, El Uso De Modelos De Flujo
De Tráfico Y Obtención De Diagrama
Fundamental De Greenshields En
Matlab.** 173

ANÁLISIS ESTADÍSTICO EN LA PRODUCCIÓN DE PETRÓLEO EN EL ESTADO DE TABASCO

Dr. Francisco Alberto Hernández De La Rosa^{1}*

Dra. María Teresa Fernández Mena²

M.I.C.R. Manuel Antonio Rodríguez Fernández³

RESUMEN

Actualmente la Secretaría de Energía tiene el interés por estimar la cantidad de producción de petróleo porque le permite realizar una toma de decisiones eficiente ante escenarios con incertidumbre. Se realiza un análisis estadístico aplicando el método de descomposición para pronosticar la producción de petróleo crudo correspondiente al segundo cuatrimestre 2017 en el estado de Tabasco, para tal fin se recolectó una serie de tiempo de la producción de petróleo que consiste de 34 periodos cuatrimestrales registrados por el Banco de Información Estadística del INEGI desde 2006 al 2017. Los resultados obtenidos por el software estadístico MINITAB indican que los índices estacionales ajustados (cuatrimestrales) para la producción de petróleo son: 0.98, 1.01 y 0.99 y la ecuación de tendencia que se obtiene es de: $T_t = T(t) = 43,380 + 1,221 * t - 51.12 * t^2$. Finalmente, para el segundo cuatrimestre de 2017 se pronostican 28,839,759 barriles de petróleo crudo a producir en el estado de Tabasco.

INTRODUCCIÓN

Actualmente la Secretaría de Energía tiene el interés por estimar la cantidad de producción de petróleo porque le permite realizar una toma de decisiones eficiente ante escenarios con incertidumbre. Se realiza un análisis estadístico aplicando el método de descomposición para pronosticar la producción de petróleo crudo correspondiente al segundo cuatrimestre 2017 en el estado de Tabasco, para tal fin se recolectó una serie de tiempo de la producción de petróleo que consiste de 34 periodos cuatrimestrales registrados por el Banco de Información Estadística del INEGI desde 2006 al 2017. Los resultados obtenidos por el software estadístico MINITAB indican que los índices estacionales ajustados (cuatrimestrales) para la producción de petróleo son: 0.98, 1.01 y 0.99 y la ecuación de tendencia que se obtiene es de: $T_t = T(t) = 43,380 + 1,221 * t - 51.12 * t^2$. Finalmente, para el segundo cuatrimestre de 2017 se pronostican 28,839,759 barriles de petróleo crudo a producir en el estado de Tabasco.

OBJETIVO GENERAL

Realizar un análisis estadístico aplicando el método de descomposición para pronosticar la producción de petróleo crudo correspondiente al segundo cuatrimestre 2017 en el estado de Tabasco.

MATERIALES Y MÉTODO

Los métodos de predicción están basados en la idea de que cuando existe un patrón subyacente en una serie de datos, tal patrón se puede aislar de lo aleatorio si se suavizan (promedian) los valores de los datos. El efecto de este suavizamiento consiste en eliminar lo aleatorio, de tal manera que el patrón se pueda proyectar al futuro y se utilice para pronosticar. En el patrón subyacente de la serie de tiempo se puede integrar con uno o más subpatrones denominado: estacional, tendencial y cíclico. Así, el modelo para este principio se escribe como:

$$\text{Datos}=\text{patrón}+\text{error} \quad (1)$$

donde el error (o estocasticidad) es la diferencia entre el efecto combinado de los tres subpatrones de la serie y los datos reales.

Definición. Supóngase que $\{X_t\}$ es una serie de tiempo. Entonces la representación matemática general del enfoque de la descomposición es:

$$X_t=f(S_t,T_t,C_t,I_t) \quad (2)$$

Donde:

X_t = Valor observado (dato real) de la serie para el periodo t ($t=1,2,\dots,N$).

S_t = Componente estacional (índice) en el periodo t . Se refiere a fluctuaciones periódicas de longitud constante y profundidad proporcional, que son provocadas por circunstancias tales como la temperatura, mes del año, entre otros.

T_t = Componente de tendencia en el periodo t . Representa el comportamiento de largo plazo de los datos, puede aumentar, disminuir o permanecer sin cambio.

C_t = Componente cíclico en el periodo t . Representa las altas y bajas de la serie causadas por condiciones específicas.

I_t = Componente aleatorio (o error) en el periodo t . Representa la variabilidad debida al azar que se observa después de retirar los otros componentes.

El método de descomposición considera dos formas de relación funcional:

Modelo Aditivo. Consiste en que los componentes de la serie de tiempo se expresa como:

$$X_t=f(S_t,T_t,C_t,I_t)= S_t+T_t+C_t \quad [+ I] \quad _t \quad (3)$$

Modelo Multiplicativo. Consiste en que los componentes de la serie de tiempo se expresa como:

$$X_t=f(S_t,T_t,C_t,I_t)= S_t*T_t*C_t \quad [* I] \quad _t \quad (4)$$

Definición. Promedio Móvil (PM). Se refiere a la media aritmética de una submuestra de tamaño n de la serie de tiempo de N periodos en total; y después se utiliza para pronosticar el siguiente periodo [2]. La fórmula está dada por:

$$F_{(t+1)}= [VS] \quad _t=1/n \sum_{(i=t-n+1)}^t X_i \quad (5)$$

Donde

$F_{(t+1)}$ = Pronóstico en el tiempo $t+1$

$[VS] \quad _t$ = Valor suavizado en el tiempo t

X_i = Valor actual en el tiempo i

n = Número de valores incluidos en el promedio

A continuación se describen, en general, los pasos del método de descomposición de predicción bajo el modelo multiplicativo (Makridakis y Wheelwright, 2009):

Paso 1. Calcular promedio móvil centrado. Con los datos reales de la serie de tiempo se calculan los promedios móviles centrados con longitud igual a la longitud del ciclo estacional; con el fin de aislar los componentes estacional e irregular. Cabe mencionar que en el primero y último periodo de la serie no tienen asociados promedios móviles.

Paso 2. Determinar el componente estacional. Consiste en calcular los índices estacionales al dividir cada dato real de la serie de tiempo por el promedio móvil centrado correspondiente. Makridakis y Wheelwright (2009) recomiendan ajustar los índices estacionales correspondientes a cada año de tal manera que los promedios obtenidos sean igual a uno. Luego, se procede con cada dato real, dividirlo por el índice estacional ajustado correspondiente al periodo, a este proceso se le conoce como desestacionalizar la serie de tiempo de los datos reales.

Paso 3. Determinar los factores de tendencia. Consiste en ajustar una curva de tendencia a los datos desestacionalizados. Si se supone una tendencia lineal, entonces se puede usar el método estadístico de regresión lineal simple, la cual utiliza el método de mínimos cuadrados para estimar los parámetros de la línea recta. La ecuación de regresión lineal para el componente de tendencia de la serie de tiempo desestacionalizada está dada por:

$$T_t = T(t) = \beta_0 + \beta_1 t \quad (6)$$

Donde

T_t = "Valor de predicción de tendencia de la variable desestacionalizada "

t = "Valor del periodo seleccionado"

β^0_0 = "Valor de la tendencia cuando $t=0$ "

β^0_1 = "Valor de la tendencia (incremento o disminución)"

Los parámetros estimados se obtienen de las siguientes fórmulas:

$$\beta^0_1 = \frac{(\sum_{t=1}^n t X_t) - (\sum_{t=1}^n t)(\sum_{t=1}^n X_t)/n}{(\sum_{t=1}^n t^2) - (\sum_{t=1}^n t)^2/n} \quad \text{y} \quad \beta^0_0 = \bar{X} - \beta^0_1 \bar{t} \quad (7)$$

Paso 4. Determinar los factores cíclicos. Por medio de los promedios móviles se eliminan el patrón estacional y la aleatoriedad, y luego lo que resulta representan los valores de la serie con la componente mezclada: tendencia y ciclo. Por tanto, se pueden determinar los factores cíclicos al dividir cada valor de la componente mezclada por el valor del promedio móvil correspondiente al periodo.

Paso 5. Preparar un pronóstico para el período de tiempo deseado. Se empieza con el periodo que se pronosticará. Para esto se considera lo siguiente: (1) identificar el factor estacional ajustado para ese periodo de tiempo particular, (2) determinar la tendencia al introducir el periodo deseado en la ecuación de tendencia (regresión lineal estimada), y (3) el factor cíclico para el periodo deseado se puede estimar a partir del último cíclico estimado de la serie obtenido del paso 4. Entonces, el pronóstico se calcula como:

$$F = \text{pronóstico} = \text{estacional} \times \text{tendencial} \times \text{cíclico}$$

RESULTADOS

A continuación, se muestran los resultados del análisis estadístico aplicado a los datos de producción de petróleo crudo en el estado de Tabasco. Para este análisis se utilizó el software de estadística MINITAB versión 16 para realizar los cálculos requeridos por el método de descomposición de serie de tiempo (MINITAB Inc., 2017). En la Tabla 1 se presentan los 34 (N) periodos

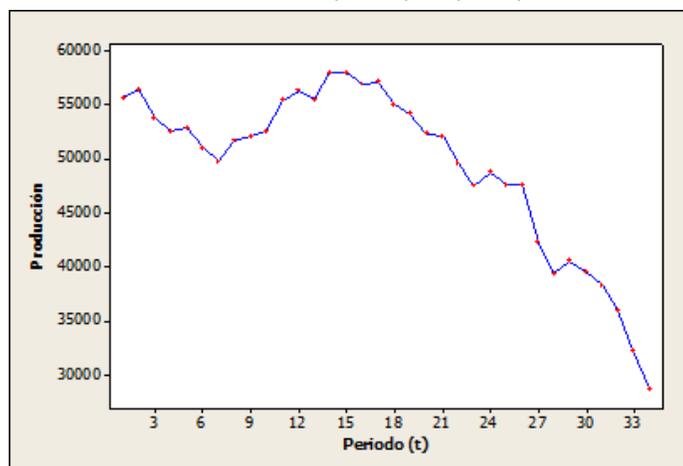
cuatrimestrales registrados por el Banco de Información Estadística del Instituto Nacional de Estadística, Geografía e Informática (INEGI) desde el primer cuatrimestre de 2006 al primer cuatrimestre de 2017 (INEGI, 2017).

Tabla 1. Producción de petróleo crudo en Tabasco (2006-2017).

Periodo t	Cuatrimestr e	Producción (miles de barriles)	Periodo t	Cuatrimestr e	Producción (miles de barriles)
1	1	55665.718	18	3	55100.456
2	2	56410.815	19	1	54181.877
3	3	53829.627	20	2	52287.453
4	1	52608.649	21	3	52145.771
5	2	52835.063	22	1	49567.901
6	3	50943.575	23	2	47550.574
7	1	49687.612	24	3	48778.964
8	2	51714.635	25	1	47557.105
9	3	52106.570	26	2	47552.479
10	1	52606.784	27	3	42255.660
11	2	55429.522	28	1	39409.370
12	3	56288.748	29	2	40530.424
13	1	55494.890	30	3	39512.585
14	2	57980.102	31	1	38299.944
15	3	57950.498	32	2	36035.191
16	1	56926.458	33	3	32313.807
17	2	57128.970	34	1	28710.105

En la Gráfica 1 se muestra la serie de tiempo de los datos de producción obtenida por MINITAB, en la cual se muestra cierta evidencia de tendencia, estacionalidad y no se observan fluctuaciones (oscilaciones a largo plazo) significativas para el factor cíclico. Por lo tanto, el modelo multiplicativo se reduce como:

$$X_t = S_t * T_t * I_t$$



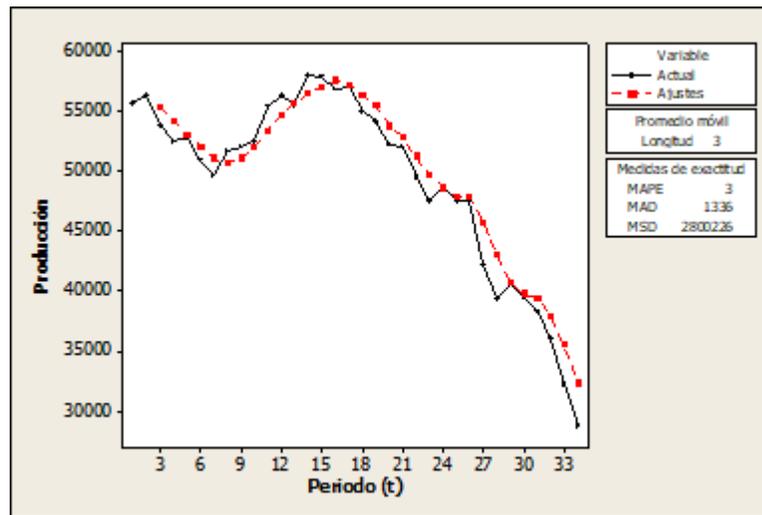
Gráfica 1. Serie de tiempo de producción de petróleo crudo.

En la Gráfica 2 se muestran los datos suavizados de producción calculando los promedios móviles de longitud de 3 cuatrimestres para la serie de tiempo de la Tabla 1. Para ejemplificar, considere el promedio móvil correspondiente a los tres periodos cuatrimestrales del año 2006:

$$PM = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 X_i = \frac{165,906.16}{3} = 55,302.053 \quad (10)$$

Este valor suavizado no incluye estacionalidad pero sí una cantidad mínima de aleatoriedad. Por tanto, el promedio de móvil sólo incluye tendencia y ciclo, y se expresa como:

$$PM = T \times C$$



Gráfica 2. Serie de tiempo suavizada (o ajustada) de producción de petróleo crudo.

Para separar el componente de estacionalidad se aplica la siguiente fórmula:

$$\frac{X_t}{PM} = \frac{T \times C \times S \times I}{T \times C} = S \times I$$

En la Tabla 2 se muestran los índices de estacionalidad ajustado obtenidos por MINITAB:

Tabla 2. Índices estacionales ajustados.

Cuatrimestre	Índice de estacionalidad ajustado
1	0.98988
2	1.01217
3	0.99795

En la Tabla 3 se muestra la serie de tiempo de valores desestacionalizados obtenidos por MINITAB:

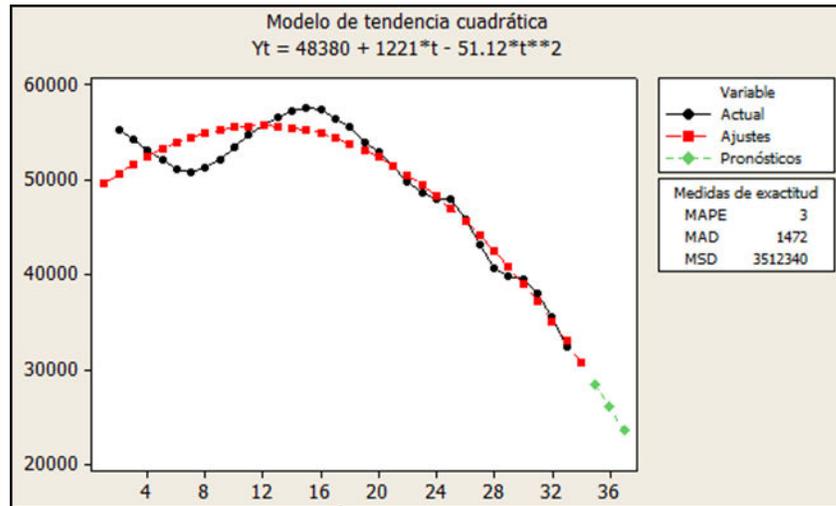
Tabla 3. Serie de tiempo de la producción de petróleo desestacionalizado

Periodo	Cuatrimestre	Valores desestacionalizados	Periodo	Cuatrimestre	Valores desestacionalizados
1	1	*	18	3	55470.4
2	2	55302.1	19	1	53856.6
3	3	54283.0	20	2	52871.7
4	1	53091.1	21	3	51333.7
5	2	52129.1	22	1	49754.7
6	3	51155.4	23	2	48632.5
7	1	50781.9	24	3	47962.2
8	2	51169.6	25	1	47962.8
9	3	52142.7	26	2	45788.4
10	1	53381.0	27	3	43072.5
11	2	54775.0	28	1	40731.8
12	3	55737.7	29	2	39817.5
13	1	56587.9	30	3	39447.7
14	2	57141.8	31	1	37949.2
15	3	57619.0	32	2	35549.6
16	1	57335.3	33	3	32353.0
17	2	56385.3	34	1	*

Por tanto, el método de mínimos cuadrados aplicado a la serie de tiempo de la Tabla 3 permite obtener la ecuación de tendencia ajustada (suavizada):

$$T_t = T(t) = 43,380 + 1,221 * t - 51.12 * t^2 \quad (13)$$

En la Gráfica 3 se muestra la curva de tendencia ajustada obtenida por MINITAB:



Gráfica 3. Recta de tendencia suavizada de producción de petróleo.

DISCUSIÓN

Se realizó un análisis estadístico a los datos de producción de petróleo crudo en el estado de Tabasco aplicando el método de descomposición. Al graficar los datos de la serie de tiempo de producción se observó que hay evidencia de los componentes estacional y de tendencia, en cambio el componente cíclico no resulta significativo y por consecuencia el modelo multiplicativo se simplifica. Una vez que en la serie de tiempo de producción se ha estimado los índices estacionales ajustados y la ecuación de tendencia se procede a calcular el pronóstico de la producción de petróleo por medio de la fórmula:

$$F_t = T_t * S_t, \quad t = N + 1, N + 2, \dots$$

Los pasos para el calcular F_t son:

1. Para el segundo cuatrimestre de 2017 ($t=35$), el pronóstico de tendencia es:

$$T_{35} = T(35) = 48,380 + 1,221 * 35 - 51.12 * 35^2 = 28,493$$

2. El índice estacional ajustado para el segundo cuatrimestre es 1.01217.
3. Finalmente, el pronóstico para $t=35$, se calcula como:

$$F_{35} = T_{35} * S_{35} = 28,497.2 * 1.01217 = 28,839.759$$

Entonces para el segundo cuatrimestre de 2017 se pronostica 28,839,759 barriles de petróleo crudo en el estado de Tabasco.

CONCLUSIONES

Los directivos de organismos petroleros se enfrentan con la problemática de pretender predecir el comportamiento de serie de tiempo relacionados con las actividades petroleras. El ejercicio de pronosticar la producción de campos petroleros es una tarea importante para lograr confiabilidad en la planeación y en el presupuesto; ya que existen una variedad de eventos inciertos que pueden afectar la producción petrolera. De ahí la necesidad de aplicar la técnica cuantitativa denominada Método de Descomposición. En el caso particular se pronosticó 28,839.759 miles de barriles de petróleo para el segundo cuatrimestre.

REFERENCIAS

INEGI (2017). Banco de Información Estadística. México: INEGI. Recuperado de: <http://www.inegi.org.mx/sistemas/bie/?idserPadre=10500250>

Makridakis, S. y Wheelwright, S. (2009). Métodos de pronósticos. México: LIMUSA.

MINITAB Inc. (2017). Software estadístico MINITAB® versión 16: soporte técnico. Recuperado de: <https://support.minitab.com/es-mx/minitab/18/>

Morales-Reyes, G., Camps-Pérez, A. y García-Vásquez, J. J. (2008). Análisis de riesgo aplicado a la planeación de la producción de petróleo en la Región Marina, Tecnología, Ciencia, Educación, 23(2): 53-61.

SENER (2013). Prospectiva de Petróleo y Petrolíferos 2013-2027. México: Secretaría de Energía.

ANÁLISIS DE LOS EVENTOS SÍSMICOS EN EL ÁREA ARTESA MUNDO-NUEVO UTILIZANDO DESCOMPOSICIÓN ESPECTRAL DE FRECUENCIAS, PARA LA DELIMITACIÓN DE RASGOS ESTRATIGRÁFICOS.

Fernando Alvarez San Román¹

Vsevolod Yutsis²

RESUMEN

La descomposición espectral es una técnica particularmente útil para analizar capas de roca delgadas y delimitar características sedimentarias asociadas a ambientes de depósito, tales como canales, esta descompone la señal sísmica en sus componentes de frecuencias y permite ver la amplitud y la fase ajustada a longitudes de onda específicas. Dado que la estratigrafía resuena a longitudes de onda dependientes del espesor de capa, no sólo se pueden definir variaciones y discontinuidades sutiles, sino también predecir con precisión el espesor de las capas de roca de forma cuantitativa. Además, como la respuesta de alta frecuencia de un reflector puede ser atenuada por la presencia de fluidos, la descomposición espectral puede ayudar a la detección directa de hidrocarburos. Para este estudio se aplicó este método para transformar los datos sísmicos del área Artesa-Mundo Nuevo, del dominio del tiempo al dominio de la frecuencia a través de métodos matemáticos como Transformada Discreta de Fourier, Transformada-S, Transformada de Ondícula Continua Tiempo-Frecuencia y Transformada de ondícula continua. Los resultados de cada método incluyen gathers de frecuencia que muestran la separación de eventos a distintas frecuencias y mapas de amplitud en sintonía, que manifiestan características estructurales/estratigráficas como canales, reflexiones de capa delgada y fallas.

INTRODUCCIÓN

La Descomposición Espectral es una técnica que comúnmente se utiliza para generar un volumen continuo de atributos espectrales instantáneos a partir de datos sísmicos de anchos de banda completos. El objetivo es proporcionar información útil acerca de la caracterización de un área, así como la detección directa de hidrocarburos (Partyka, et. al., 1999; Castagna, et al., 2003; Liu y Marfurt, 2007).

Un levantamiento sísmico completamente procesado contiene todas las frecuencias que son capaces de ser registradas por los geófonos/hidrófonos usados en el levantamiento sísmico (esto se conoce como el rango dinámico). Después de que la fuente sísmica ha sido disparada la energía se propaga hacia abajo atravesando el subsuelo y sus límites geológicos (discordancias, capas, etc); la energía sísmica es reflejada, refractada y absorbida.

Así como el frente de onda continua propagándose en las capas de sedimentos, esta se atenúa, provocando que el contenido de frecuencia disminuya con la profundidad, es por esto que las frecuencias altas se preservan en la parte superior de la sección. Debido a esta atenuación, las frecuencias más altas en las partes profundas del levantamiento son absorbidas por las frecuencias bajas más dominantes. El propósito de la Descomposición Espectral es observar la respuesta sísmica a diferentes intervalos de frecuencias discretas, de esta forma las frecuencias más altas generarán una imagen de las capas delgadas mientras que las frecuencias más bajas generaran una imagen de las capas gruesas.

El concepto de la Descomposición Espectral consiste en que la reflexión sísmica de una capa delgada tiene características particulares que se expresan en el dominio de la frecuencia como un indicativo de su espesor en el tiempo. Por

ejemplo, una capa delgada sencilla y homogénea contiene una secuencia predecible y periódica de muescas en el espectro de amplitud de la reflexión. Sin embargo, generalmente una ondícula sísmica contiene la información de múltiples capas en el subsuelo y no solo el de una capa sencilla. La respuesta sísmica combinada de estas capas múltiples en el subsuelo generalmente resulta en una compleja reflexión sintonizada la cual tiene una expresión única en el dominio de la frecuencia, con el objetivo de resolver la sintonía de estas capas delgadas es que se usa la descomposición espectral, utilizando métodos matemáticos a manera de algoritmos programados dentro de las aplicaciones técnicas o software dedicados a estos fines.

OBJETIVO GENERAL

Definir las características estratigráficas y sedimentológicas de la secuencia terciaria del área Artesa - Mundo Nuevo en base la aplicación de la técnica de descomposición espectral de frecuencias.

Definir el algoritmo matemático que brinde los mejores resultados al ser aplicado sobre datos sísmicos de reflexión.

MATERIALES Y MÉTODO

Esta sección describe las diferencias entre cuatro métodos y las ventajas y desventajas de cada técnica, utilizando un horizonte sísmico que se obtuvo realizando un picado fino a lo largo de cada diez líneas en la dirección norte-sur y este-oeste (Marfurt et al. 2001). La descomposición espectral se refiere a la transformación de los datos sísmicos de reflexión en sus componentes individuales de frecuencia, dentro de un ancho de banda sísmico (Guo H. et al. 2009). La utilización de los distintos métodos de descomposición espectral ayuda a visualizar diferentes aspectos de la morfología de un área de estudio y dependiendo de la elección del método puede llegar a mejorar enormemente la comprensión del potencial de yacimientos petroleros asociados a la presencia

de rasgos estratigráficos como canales, desbordes de canal o Sabanas de arena que puedan ser definidos por algunas de las técnicas de descomposición espectral.

La selección de alguno de los métodos tales como, Transformada Discreta de Fourier, Transformada de Ondícula Continua, Transformada de Ondícula Continúa Tiempo-Frecuencia y Transformada $-S$, dependerá en gran medida del problema que se requiera resolver y de la capacidad de respuesta del método ante la resolución que logre alcanzar para lograr definir espesores temporales asociados a frecuencias altas y bajas, así como de la calidad de imagen a nivel de rasgos estratigráficos que logre alcanzar

4.1 APLICACIÓN DEL ALGORITMO TRANSFORMADA DISCRETA DE FOURIER

La Descomposición Espectral convencional se realiza utilizando la Transformada Discreta de Fourier, la cual evalúa las características espectrales a lo largo de una ventana que contiene varios eventos (Castagna, et al., 2006). Disminuyendo la longitud de la ventana de tiempo se incrementa la resolución en el tiempo, pero la resolución de la frecuencia se verá afectada. Por esta razón se desarrollaron métodos de análisis espectral instantáneo y descomposición con análisis exponenciales, para alcanzar mejor resolución temporal y espectral (Castagna, et. al. 2003, Castagna, et. al., 2006).

El ejemplo en la Figura 1 muestra una comparación entre un mapa generado con el método DFT y el mapa de amplitudes con el ancho de banda completo, así como una sección y el gather de frecuencia en 24 Hz generados bajo el mismo método. Revisando los resultados de la sección DFT (Figura 1), observamos que el método no realiza separación de capas en espesores temporales de manera muy adecuada y genera un efecto de difuminado en estas, el cual se ve reflejado en el gather de frecuencias de esta sección. También se muestra una comparativa entre el mapa generado mediante el

método de Transformada Discreta de Fourier el cual logra resolver algunos canales y el mapa de amplitudes con el ancho de banda completo, el cual solo esboza algunos rasgos canalizados, pero no los resuelve de manera clara.

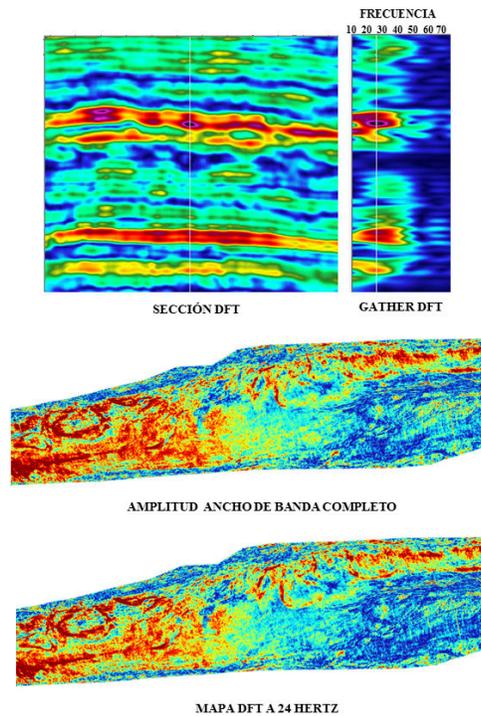


Figura 1. Ejemplo de los resultados de la descomposición Espectral utilizando el método de Transformada Discreta de Fourier y una comparación en un mapa de amplitud con el ancho de banda completo, y un mapa DFT a 24 Hertz.

4.2- APLICACIÓN DEL ALGORITMO TRANSFORMADA DE ONDÍCULA CONTINUA

La Transformada de Ondícula Continua muestrea la señal sísmica utilizando una ventana de tiempo móvil escalable. En este método, el tamaño de la ventana cambia automáticamente con la frecuencia, y permite el muestreo

adaptativo de la traza sísmica. Los mapas espectrales resultantes proporcionan mayor resolución temporal a frecuencias más altas en comparación con la DFT.

El ejemplo de la Figura 2 muestra el mapa, la sección, y el gather de frecuencia resultado de la descomposición espectral utilizando el método de Transformada de Ondícula Continua (CWT), a 24 Hz. En esta misma figura el gather de frecuencia es muy superior en cuanto a la preservación de la reflexión de los eventos que el método de Transformada Discreta de Fourier (DFT), para frecuencias más altas. En bajas frecuencias, sin embargo, Transformada de Ondícula Continua (CWT), puede no resolver adecuadamente los eventos que están estrechamente espaciados en el dominio del tiempo.

En el mapa de la figura 2, los resultados de Transformada de Ondícula Continua (CWT), resuelven algunos canales mejor que el mapa de amplitudes con el ancho de banda completo y ponen de manifiesto la morfología del canal significativamente mejor que el mapa Transformada Discreta de Fourier (DFT) de la sección anterior (Figura 1). Estos resultados son consistentes con el análisis del gather de frecuencias, lo que demuestra que el cálculo de la ventana móvil de Transformada de Ondícula Continua (CWT), proporciona mayor resolución que la Transformada Discreta de Fourier (DFT).

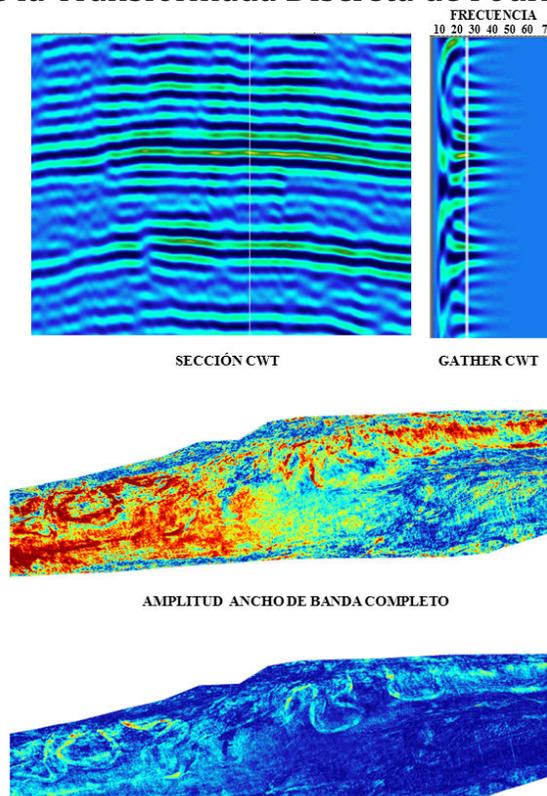


Figura 2. Ejemplo de los resultados de la descomposición Espectral utilizando el método de Transformada de Ondícula Continua y una comparación entre un mapa de amplitud con el ancho de banda completo, y un mapa CWT a 24 Hertz.

4.3- APLICACIÓN DEL ALGORITMO TRANSFORMADA DE ONDÍCULA CONTINUA TIEMPO-FRECUENCIA.

La aplicación de este método (TFCWT), genera un mapa de Tiempo-Frecuencia que muestra la frecuencia exacta para cualquier evento. Los métodos de Transformada de Ondícula Continua (CWT) y Transformada Discreta de Fourier (DFT), por otro lado, generan mapas de salida a una frecuencia central dentro de una ventana de tiempo definida. Por ejemplo, un mapa descomposición espectral CWT a 24 Hz muestra la respuesta promedio de amplitud de alrededor de 20 a 30 Hz. Sin embargo, un mapa TFCWT a 24 Hz muestra las amplitudes en exactamente 24 Hz. Al igual que CWT, el método de descomposición espectral TFCWT utiliza un enfoque de ventana móvil, pero no promedia frecuencias vecinas de la misma manera como los métodos mencionados anteriormente. Por lo tanto, los mapas TFCWT proporcionan una resolución de tiempo y frecuencia superiores a las de DFT o CWT. Ambos métodos CWT y TFCWT proporcionan una resolución de alta frecuencia en las frecuencias bajas, y alta resolución temporal a altas frecuencias.

Una desventaja de TFCWT es que es computacionalmente hablando requiere de demasiados recursos, y la generación de mapas de descomposición espectral con este método pueden llevar mucho tiempo. El ejemplo de la Figura 3 muestra el mapa, la sección, y el gather de frecuencia aplicando el algoritmo de descomposición espectral, Transformada de Ondícula Continua tiempo frecuencia (TFCWT), a 24 Hz.

Debido al cálculo del espectro instantáneo de la Transformada de Ondícula Continua Tiempo-Frecuencia, se puede ver mejor resolución y mayor detalle de los rasgos estratigráficos que están presentes en el área. En el mapa (Figura 3), los resultados de este método resuelven el canal mucho mejor que el mapa de amplitudes con el ancho de banda completo y ponen de manifiesto la morfología de un sistema de canales significativamente mejor que cualquiera de los mapas de CWT o DFT.

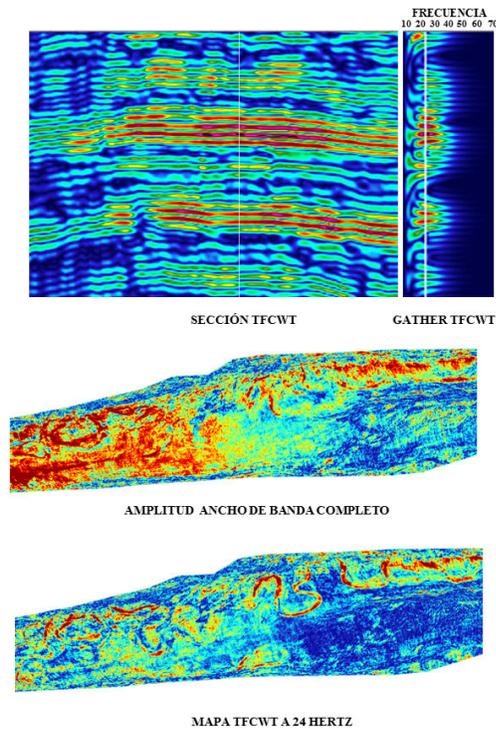


Figura 3. Ejemplo de los resultados de la descomposición Espectral utilizando el método de Transformada de Ondícula Continua Tiempo-Frecuencia y una comparación entre un mapa de amplitud con el ancho de banda completo, y un mapa TFCWT a 24 Hertz.

4.4- APLICACIÓN DEL ALGORITMO TRANSFORMADA -S.

Así como la Transformada de Ondícula Continua Tiempo-Frecuencia (TFCWT), la Transformada-S genera un mapa tiempo-frecuencia y muestrea la señal sísmica con una ventana de tiempo en movimiento (Stockwell, et. al. 1996), sin embargo, el tamaño de la ventana en el método de la Transformada -S es dependiente de la frecuencia debido a que la transformada tiene una relación más rigurosa con los espectros, lo cual permite que se puedan producir mapas de descomposición espectral con resolución bastante alta. El método de Transformada -S es a nivel de procesos de computo, más rápido de calcular que la el método de la Transformada de Ondícula Continua Tiempo-Frecuencia (TFCWT), pero puede producir resultados similares.

El ejemplo de la Figura 4, muestra el mapa, la sección y el gather de frecuencia resultado de la aplicación del método de descomposición espectral de Transformada -S a 24 Hertz. En este caso, el gather de frecuencia y el mapa de la Transformada -S, son casi idénticos a los resultados TFCWT (Figura 3).

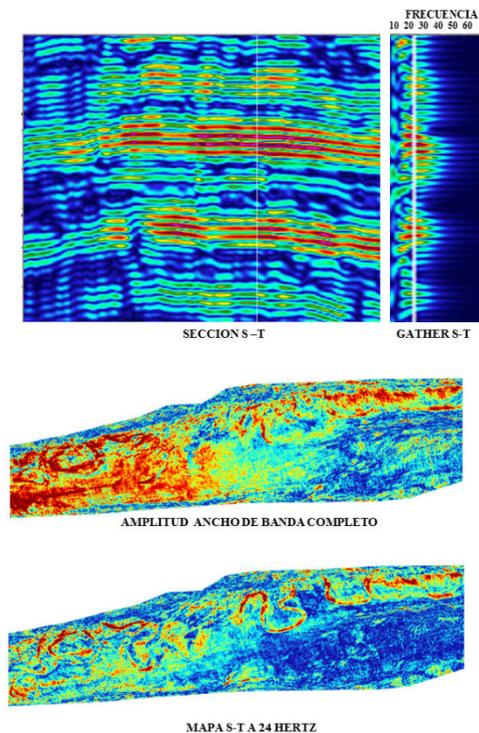


Figura 4. Ejemplo de los resultados de la descomposición Espectral utilizando el método de Transformada -S y una comparación entre un mapa de amplitud con el ancho de banda completo, y un mapa S_T a 24 Hertz

RESULTADOS

Después de describir los resultados de cada uno de los métodos de descomposición espectral y de analizar la forma en que estos trabajan, se realizó una tabla comparativa (Tabla1), donde se detallan las ventajas y desventajas que ofrece cada uno de estos métodos.

Tabla 1. Tabla comparativa que muestra las ventajas y desventajas de la utilización de cada método de descomposición espectral, así como las características de las ventanas de análisis.

Método de Descomposición Espectral	Ventanas de Análisis	Ventajas y Desventajas
Transformada Discreta de Fourier (DFT)	<ul style="list-style-type: none"> • Ventana de tiempo ajustable • Utiliza solo una longitud específica para la ventana de tiempo. 	<ul style="list-style-type: none"> • Ventanas pequeñas pueden resolver eventos a altas frecuencias, pero pueden ocultar eventos a bajas frecuencias. • Las ventanas grandes promedian la respuesta para obtener una mejor representación estadística, pero pueden ocultar detalles finos.
Transformada de Ondícula Continua (CWT)	<ul style="list-style-type: none"> • Ventana de tiempo escalable y ajustable. • El tamaño de la ventana cambia con la frecuencia. 	<ul style="list-style-type: none"> • Permite un muestreo adaptable a la traza lo cual permite preservar algunos eventos mejor que la Transformada de Fourier. • No puede resolver adecuadamente eventos de bajas frecuencias que tengan un espaciamiento muy cercano en el dominio del tiempo.
Transformada de Ondícula Continua Tiempo-Frecuencia (TFCWT)	<ul style="list-style-type: none"> • Ventana de tiempo escalable y ajustable. • Las ventanas no promedian frecuencias vecinas. 	<ul style="list-style-type: none"> • Genera un mapa tiempo-frecuencia verdadero con una resolución mayor que el método CWT para un espectro tiempo frecuencia calculado intensivamente.

Transformada S (ST)	<ul style="list-style-type: none"> • Ventana de tiempo escalable, la longitud de la ventana de tiempo depende de la frecuencia • La ventana de tiempo se define con la frecuencia (tiene una relación más rigurosa con la frecuencia comparando con los métodos. CWT o TFCWT) 	<ul style="list-style-type: none"> • Los resultados son similares al método TFCWT con mayor resolución que el CWT en el espectro tiempo-frecuencia.
---------------------	---	--

ANÁLISIS COMPARATIVOS DE LOS GATHERS DE FRECUENCIA.

Comparando los gathers generados a partir de cada método, se demuestran las diferencias en la resolución de frecuencia entre las cuatro técnicas. El propósito del análisis de la sección sísmica vertical en la descomposición espectral es comparar la respuesta de las arenas con diversos rangos de frecuencia (Naseer T. M. et al., 2014). La figura 5 muestra cuatro gathers de frecuencias generados a partir de cada algoritmo matemático del método de descomposición espectral. Cada gather presenta la misma ubicación para poder hacer una comparación efectiva, a medida que avanza de izquierda a derecha, se puede ver el aumento de la señal en el dominio de la frecuencia.

El gather de frecuencia generado a partir del uso del método de la Transformada Discreta de Fourier (DFT), muestra que los eventos son difuminados o borrosos debido al efecto de promediar la respuesta de la señal a través de una ventana fija.

El gather CWT ofrece una mayor resolución y separa los eventos individuales mejor que el gather DFT. Esto es posible porque la ventana de movimiento de la Transformada de Ondícula Continua permite muestreo adaptativo de la traza, y una mejor representación de la señal dentro de la ventana.

TFCWT y ST ofrecen la mejor resolución y detalle para el análisis de los datos de la descomposición espectral. Esto es debido a que tanto TFCWT y ST generan un mapa de tiempo-frecuencia que muestra la frecuencia exacta para cualquier caso. Alternativamente, los métodos de CWT y DFT producen mapas con una frecuencia central dentro de una ventana de tiempo determinada.

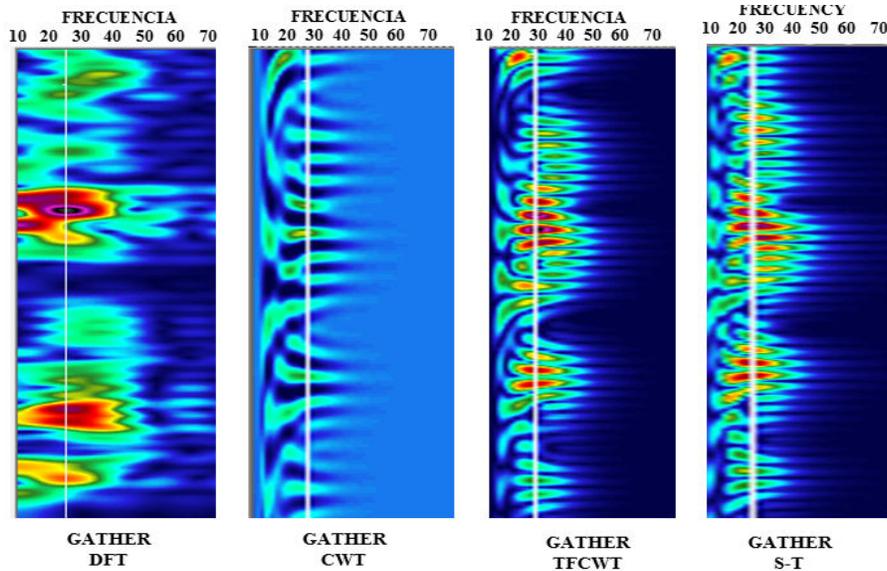


Figura 5. Comparación de la resolución que alcanza un gather de frecuencia mediante la utilización de los distintos métodos de descomposición espectral de frecuencias. De izquierda a derecha incrementa la resolución de la frecuencia, así como la definición de espesores temporales.

ANÁLISIS COMPARATIVO DE LOS MAPAS DE DESCOMPOSICIÓN ESPECTRAL

Usando los datos sísmicos de este estudio que muestran los canales como ejemplo, se puede ver que cuatro de los métodos de descomposición espectral proporcionan una mejor resolución de la morfología de los canales en comparación con el mapa de amplitudes con el ancho de banda completo (Figura 6). Sin embargo, cada método ofrece una respuesta espectral diferente a una frecuencia de 24 Hz.

El inciso B de la Figura 6 muestra los resultados de descomposición espectral a través de DFT con un tamaño de ventana de 30 ms. El mapa muestra algunos detalles en la morfología de los canales, pero no resuelve del todo el canal a la misma frecuencia de 24 Hz.

Las partes C y D de la figura 6 demuestran que los enfoques ventana móvil de CWT y TFCWT proporcionan una mejor resolución de tiempo-frecuencia en comparación con la DFT. Sin embargo, el mapa TFCWT tiene una mejor diferenciación de los rasgos estratigráficos que están presentes en la estructura.

El mapa de Transformada -S (Figura 6, inciso E), produjo resultados similares a TFCWT con sólo un poco menos resolución. En general, el mapa TFCWT resuelve la morfología de los canales con mayor detalle en comparación con todos los demás métodos. Una revisión de los cuatro mapas de descomposición espectral muestra que los resultados son consistentes con el análisis del gather de frecuencia.

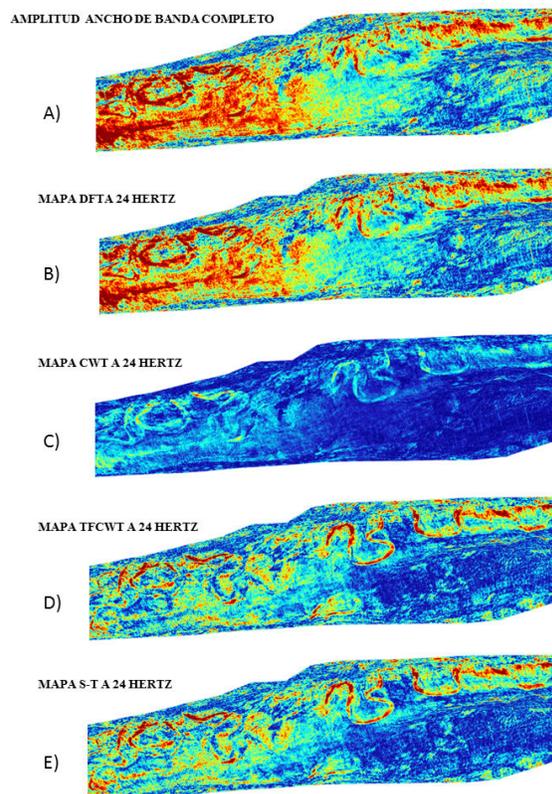


Figura 6. Comparación de resultados entre los mapas de frecuencia a 24 Hertz, mediante la utilización de los distintos métodos de descomposición espectral de frecuencias. De la letra A, a la letra D se muestra el incremento en la definición de rasgos estratigráficos como canales. D y E, muestran similitud, pero ambos son mejores que los otros métodos.

DISCUSIÓN

En los resultados obtenidos en los mapas del atributo de descomposición espectral de frecuencias a 24 Hertz con cualquiera de los métodos, se puede observar que la resolución es mucho mejor que en el mapa de amplitud con ancho de banda completo, esto quiere decir que la entonación se logra mediante la búsqueda de los mejores valores de amplitud en una frecuencia que permita asociar está, a rasgos sedimentarios que puedan estar presentes en el área analizada. Utilizando esta metodología de trabajo es posible interpretar en datos sísmicos de reflexión de baja resolución, ya que los algoritmos se encargan de entonar amplitudes en frecuencias que permitan delinear características geológicas, estructurales y sedimentarias.

CONCLUSIONES

Mediante el análisis de los mapas y de los gathers de frecuencias resultantes de la aplicación de cada transformada y el uso de una frecuencia de sintonía de 24 Hertz, se determinó que los 4 métodos resuelven en mejor manera el contenido de rasgos estratigráficos a nivel de mapas de frecuencia, que un mapa que contempla el ancho de banda de frecuencias completo, aunque el método de descomposición espectral de la Transformada de Ondícula Continua Tiempo-Frecuencia siempre generó la mejor resolución. Un resultado importante de este análisis fue determinar que los mapas de Transformada-S (S-T), proporcionan resultados casi idénticos a los mapas generados con la

aplicación de la Transformada de Ondícula Continua Tiempo-Frecuencia (TFCWT), y además fueron más rápidos para generar, por lo que el método de S-T es la técnica más eficiente para la resolución de los rasgos estratigráficos canalizados en este estudio.

REFERENCIAS

Castagna, J. P., S. Sun, and R. W. Siegfried, 2003, Instantaneous spectral analysis: Detection of low-frequency shadows associated with hydrocarbons: *The Leading Edge*, 22, 120–127.

Castagna, J. P., and S. Sun, 2006, Comparison of spectral decomposition methods: *First Break*, 24, 75–79.

Guo, H., K. Marfurt, and J. Liu, 2009, Principal component spectral analysis: *Geophysics*, 74, no. 4, P35–P43

K. J. Marfurt and R. L. Kirilin, 2001. Narrow-band spectral analysis and thin-bed tuning. *Geophysics*, Vol. 66, No.4, pp. 1274–1283

Liu, J., and K. J. Marfurt, 2007, Instantaneous spectral attributes to detect channels: *Geophysics*, 72, no. 2, P23–P31.

Naseer, T. M., Shazia Asim, Mirza Naseer Ahmad, Farrukh Hussain, Shahid Nadeem Qureshi, 2014. Application of Seismic Attributes for Delineation of Channel Geometries and Analysis of Various Aspects in Terms of Lithological and Structural Perspectives of Lower Goru Formation, Pakistan. *International Journal of Geosciences*, 2014, 5, 1490-1502

Partyka, G., J. Gridley, and J. Lopez, 1999, Interpretational applications of spectral decomposition in reservoir characterization: *The Leading Edge*, 18, 353–360.

Stockwell, R. G., L. Mansinha, and R. P. Lowe, 1996, Localization of the complex spectrum: The S-Transform: *IEEE Transactions on Signal Processing*, 44, 998–1001.

DIFERENCIABILIDAD DE FUNCIONES QUE PRESERVAN LA MÉTRICA

Dr. Miguel López De Luna¹

Dr. Gerardo Delgadillo Piñón²

RESUMEN

La diferenciabilidad de las funciones que preservan la métrica, nos revela algunas propiedades interesantes de dichas funciones. Se logra establecer para toda función en esta clase, la existencia de la derivada (finita o infinita) en el origen. Como una consecuencia de lo anterior, demostraremos que las funciones que preservan la métrica con derivada finita en el origen, son diferenciables en casi todos lados.

INTRODUCCIÓN

El concepto de diferenciabilidad conduce a una partición del conjunto de funciones que preservan la métrica. A saber, si f preserva la métrica entonces $f'(0) < \infty$ ó $f'(0) = \infty$. En el primer caso, probaremos que f es continua en $[0, \infty)$ y diferenciable en casi todas partes de $[0, \infty)$. Mediante el Ejemplo 14 mostramos una función f continua con $f'(0) = \infty$ y no diferenciable en ninguna parte. Observemos que la continuidad de f no es una consecuencia de $f'(0) = \infty$, por ejemplo

$$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x = 0; \\ 1 & \text{si } x \in \mathbb{Q} \cap [0, \infty); \\ 2 & \text{si } x \in \mathbb{Q}^c \cap [0, \infty). \end{cases}$$

La noción de función que preserva la métrica apareció por primera vez en el artículo de Wilson [19] y ha sido investigado desde entonces por muchos autores, ver por ejemplo [1], [2], [6], [7] y [8].

Una función $f: [0, \infty) \rightarrow [0, \infty)$ se llama *flexible* si $f^{-1}(0) = \{0\}$ y f es subaditiva siempre que $f(x + y) \leq f(x) + f(y)$ para todos $x, y \in [0, \infty)$. Una función flexible f *preserva la métrica* (*preserva la métrica fuertemente*) si $f \circ d$ es una métrica (una métrica equivalente a d) para todo espacio métrico (X, d) .

Una *terna triangular* es una terna de reales no negativos (a, b, c) , para los cuales $a \leq b + c$, $b \leq a + c$ y $c \leq a + b$.

OBJETIVOS Y METAS

Extender los resultados obtenidos sobre el estudio acerca de la diferenciabilidad de funciones que preservan la métrica presentados en [2], [8] y [20].

MATERIALES Y MÉTODOS

En el desarrollo de este trabajo se utilizan métodos de análisis matemático en espacios métricos.

RESULTADOS

Empezaremos por enunciar resultados cuyas demostraciones, por ejemplo, se pueden consultar en [20] y que nos serán de gran utilidad en nuestras conclusiones.

Teorema 1. *Sea f una función flexible. Entonces las siguientes proposiciones son equivalentes.*

(i) *f preserva la métrica.*

(ii) *$(f(a), f(b), f(c))$ es una terna triangular siempre que (a, b, c) lo sea.*

(iii) Si (a, b, c) es una terna triangular entonces $f(a) \leq f(b) + f(c)$. \square

Proposición 2. (i) Si f y g preservan la métrica y $m > 0$, entonces $f \circ g$ y mf son funciones que preservan la métrica.

(ii) Si $\{h_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ es una sucesión de funciones que preservan la métrica y convergente puntualmente a una función positiva h , entonces h preserva la métrica. Además, si $\sum_{n=1}^{\infty} h_n$ converge a una función \hat{h} , entonces \hat{h} preserva la métrica. \square

Proposición 3. Si f preserva la métrica, entonces f es subaditiva. \square

Lema 4. Si $f : [0, \infty) \rightarrow [0, \infty)$ es subaditiva entonces $f\left(\frac{x}{2^n}\right) \geq \frac{f(x)}{2^n}$ para todo $x \geq 0$.

Teorema 5. Sea f es una función que preserva la métrica. Si f es discontinua en 0, entonces existe $\varepsilon > 0$ tal que $f(x) > \varepsilon$, para todo $x > 0$.

Teorema 6. Toda función que preserve la métrica y sea continua en 0, es continua en $[0, \infty)$. \square

A continuación expondremos los resultados que apoyan el Teorema principal de este trabajo.

Dada $f : [0, \infty) \rightarrow [0, \infty)$, consideremos el conjunto

$$K_f = \{r > 0 : f(x) \leq rx \text{ para todo } x \geq 0\}.$$

Proposición 7. Si f es continua entonces K_f es cerrado.

Demostración. Sea $g : [0, \infty) \times (0, \infty) \rightarrow [0, \infty)$, definida por $g(x, r) = f(x) - rx$. La hipótesis nos garantiza que g es continua. De este modo, obtenemos que $F = g^{-1}(-\infty, 0]$ es un conjunto cerrado en $[0, \infty) \times (0, \infty)$. Por consiguiente $K_f = p_2(F)$ es cerrado, donde p_2 es la proyección natural sobre el segundo factor. \square

Lema 8. Si f preserva la métrica, entonces $\frac{f(y)}{y} \leq \frac{2f(x)}{x}$ donde $0 < x \leq y$.

Demostración. Escojamos $n \in \mathbb{N}$ tal que $2^{n-1} \leq \frac{y}{x} < 2^n$. Como $\frac{y}{2^{n-1}} < 2x$, tenemos que $(x, x, \frac{y}{2^{n-1}})$ es una terna triangular. Entonces $\frac{f(y)}{2^{n-1}} \leq f\left(\frac{y}{2^{n-1}}\right) \leq 2f(x)$, donde la primera desigualdad se desprende del lema 4. Por consiguiente

$$f(y) \leq 2^{n-1}(2f(x)) \leq \frac{2yf(x)}{x}, \text{ y así } \frac{f(y)}{y} \leq \frac{2f(x)}{x}$$

según lo requerido.

□

Dado $r > 0$, decimos que una función f que preserva la métrica es de r -gradiente acotado en 0, si existe $h > 0$ tal que $f(x) \leq rx$ para todo $x \in (0, h]$. También diremos que f es de gradiente acotado en 0, si existe $r > 0$ de tal forma que f es de r -gradiente acotado en 0.

Proposición 9. Sea f una función que preserva la métrica de r -gradiente acotado en 0, para algún $r > 0$. Entonces $f(x) \leq rx$ para todo $x \geq 0$.

Demostración. La hipótesis garantiza la existencia de un $h > 0$ tal que $f(z) \leq rz$ con $z \in [0, h]$. Sean $x \geq 0$ y $n \in \mathbb{N}$ para los cuales $\frac{x}{2^n} \leq h$. Luego $f\left(\frac{x}{2^n}\right) \leq \frac{rx}{2^n}$. De acuerdo al lema 4 $\frac{f(x)}{2^n} \leq \frac{rx}{2^n}$, de modo que $f(x) \leq rx$. Puesto que x se eligió de forma arbitraria, obtenemos lo deseado.

Lema 10. Sea f una función que preserva la métrica de r -gradiente acotado en 0, para algún $r > 0$. Si en toda vecindad de 0 existe un punto a para el cual $f(a) = ra$, entonces existe un $h > 0$ tal que $f(x) = rx$ para todo $x \in [0, h]$.

Demostración. Tenemos que f es continua. En efecto, sea $\varepsilon > 0$. Por hipótesis existe un número positivo $a < \frac{\varepsilon}{r}$ tal que $f(a) = ra < \varepsilon$. Del teorema 5 se desprende la continuidad de f en 0, y por el teorema 6 concluimos que f es continua en $[0, \infty)$. Ahora, sea $h > 0$ tal que $f(h) = rh$. Supongamos que existe $x \in (0, h)$ con $f(x) \neq rx$. Consideremos el conjunto $A = \{y \in [0, \infty): f(y) = ry\}$. Debido a la continuidad de f , el conjunto $A \cap [0, x]$ es compacto, y por ende existe su máximo, el cual denotaremos por M . De forma similar, existe el mínimo de $A \cap [x, h]$ y lo escribiremos como m .

Supongamos $f(x) > rx$. En virtud de la hipótesis, podemos elegir un $y \in A$ con $0 < y < x - M$. Tomemos $u = y + M$. De la subaditividad de f se desprende

$$f(u) = f(y + M) \leq f(y) + f(M) = ry + rM = r(y + M) = ru.$$

Es decir, se satisfacen $M < u < x$ y $f(u) \leq ru$. La continuidad de f garantiza la existencia de un $z \in [u, x]$ con $f(z) = rz$, con lo cual se contradice la elección de M .

Ahora asumamos la desigualdad $f(x) < rx$. La hipótesis nos garantiza la existencia de un $a \in A$ tal que $0 < a < m - x$. Tomemos $u = m - a > x$. Entonces, al emplear la subaditividad de f (ver proposición 3), logramos $rm = f(m) = f(u + a) \leq f(u) + f(a) = f(u) + ra$. De este modo

$$f(u) \geq r(m - a) = ru.$$

Similarmente al caso anterior, se contradice la elección de m . En consecuencia $f(x) = rx$ para todo $x \in [0, h]$. □

Teorema 11. *Sea f una función que preserva la métrica. Entonces existe $f'(0)$ (en el sentido extendido).*

Demostración. Supongamos $K_f = \emptyset$. Sea $n \in \mathbb{N}$. Luego, podemos elegir un $y > 0$ para el cual $2n \leq \frac{f(y)}{y}$. Del lema 8 logramos $n \leq \frac{f(x)}{x}$ para todo $x \in (0, y]$, y por lo tanto $f'(0) = \infty$.

Ahora probemos que $f'(0)$ existe y es finita siempre que $K_f \neq \emptyset$. En primer lugar mostremos que f es continua. Para ello, sean $\varepsilon > 0$ y $r \in K_f$. Luego, si $0 < z < \frac{\varepsilon}{r}$ entonces $f(z) \leq rz < \varepsilon$, es decir, la función f es continua en 0. Del teorema 6 se desprende que f es continua en $[0, \infty)$. La proposición 7 nos indica que K_f es cerrado. Por consiguiente existe $r_0 = \min K_f$. Verificaremos la igualdad $r_0 = \lim_{x \rightarrow 0} \frac{f(x)}{x}$. Sea $\varepsilon > 0$.

Afirmación 1. Para todo $h > 0$, existe un $x \in (0, h]$ tal que $f(x) > (r_0 - \varepsilon)x$.

Supongamos lo contrario. Luego, existe $h > 0$ de tal manera que si $x \in [0, h]$, se satisface la desigualdad $f(x) \leq r_1 x$, siendo $r_1 = r_0 - \varepsilon$. Es decir, la función f es de r_1 -gradiente acotado. La proposición 9 garantiza $f(x) \leq r_1 x$ para todo $x \geq 0$, que contradice la elección de r_0 .

Afirmación 2. Existe $h > 0$ tal que $f(x) > (r_0 - \varepsilon)x$ para todo $x \in (0, h]$.

Supongamos que para todo $h > 0$, existe un $x \in (0, h]$ tal que $f(x) \leq (r_0 - \varepsilon)x$. Sea $h > 0$. Por la afirmación 1 se desprende la existencia de un $x_1 \in (0, h]$ tal que $f(x_1) > (r_0 - \varepsilon)x_1$. De nuestra suposición, podemos obtener un $x_2 \in (0, h]$ tal que $f(x_2) \leq (r_0 - \varepsilon)x_2$. En consecuencia, debido a la continuidad de f deducimos la igualdad $f(x_3) = (r_0 - \varepsilon)x_3$ para algún $x_3 \in (0, h]$. De acuerdo al lema 10 existe $\hat{h} > 0$ tal que $f(x) = (r_0 - \varepsilon)x$ siendo $x \in (0, \hat{h}]$, lo cual se contradice con la afirmación 1.

Por otro lado, como $r_0 \in K_f$ deducimos $f(x) < (r_0 + \varepsilon)x$ para todo $x > 0$. De esta última desigualdad y de la afirmación 2, concluimos

$$r_0 - \varepsilon < \frac{f(x)}{x} < r_0 + \varepsilon \text{ donde } x \in (0, h] \text{ y algún } h > 0.$$

De esta manera hemos probado lo deseado.

□

Corolario 12. Sea f una función que preserva la métrica. Entonces $f'(0) < \infty$ si y sólo si f es de gradiente acotado en 0.

Demostración. Supongamos $f'(0) < \infty$. Dado $\varepsilon > 0$, existe $h > 0$ tal que $\left| \frac{f(x)}{x} - f'(0) \right| < \varepsilon$ para $x \in (0, h]$. Luego $f(x) < x(f'(0) + \varepsilon)$ con $0 < x \leq h$. Por consiguiente, la función f es de r -gradiente acotado en 0, donde $r = f'(0) + \varepsilon$. Ahora supongamos la existencia de números positivos h y r , para los cuales $f(x) \leq rx$ con $x \in [0, h]$. En consecuencia $\frac{f(x)}{x} \leq r$ siempre que $0 < x \leq h$. El teorema 11 y la desigualdad anterior implican $f'(0) < \infty$, que era lo solicitado.

□

Ahora estamos listos para demostrar el resultado principal de este estudio.

Teorema 13. Supongamos que f es una función que preserva la métrica tal que $f'(0) < \infty$. Entonces f es diferenciable en casi todos lados de $[0, \infty)$.

Demostración. Verifiquemos que f es de variación acotada en todo intervalo $[a, b] \subset [0, \infty)$. Sean $x, y \in [a, b]$. Puesto que $(x, y, |x - y|)$ es una terna triangular, del teorema 1 logramos la desigualdad $|f(x) - f(y)| \leq f(|x - y|)$. Por otro lado, al proceder de forma idéntica que en la primera parte de la demostración del corolario 12 (al remplazar x por $|x - y|$), concluimos que $f(|x - y|) < |x - y|(f'(0) + \varepsilon)$ con $0 < |x - y| \leq h$ para algún $h > 0$ y cualquier $\varepsilon > 0$. Por consiguiente $|f(x) - f(y)| \leq |x - y|f'(0)$, lo cual implica que f es de variación

acotada en $[a, b]$. De esta forma f es diferenciable en casi todos lados de $[0, \infty)$.

□

Ejemplo 14. Existe una función que preserva la métrica, continua y no diferenciable en ninguna parte.

Solución. Sea $h: [0, \infty) \rightarrow [0, \infty)$ definida por

$$h(x) = \begin{cases} x & \text{si } x \leq \frac{1}{2}; \\ \frac{1}{2} + \left| x - \llbracket x \rrbracket - \frac{1}{2} \right| & \text{si } x > \frac{1}{2}, \end{cases}$$

donde $\llbracket x \rrbracket$ denota la parte entera de x . Del teorema 1 se desprende que h preserva la métrica. Dado que $g(x) = 2^n x$ preserva la métrica para todo $n \in \mathbb{N}$, la parte (i) de la proposición 2 nos garantiza que $f_n(x) = \frac{h(2^n x)}{2^n}$ preserva la

métrica. Por otro lado, se satisface la desigualdad $f_n(x) \leq \frac{1}{2^n}$ para todo $x \in [0, \infty)$ y cualquier $n \in \mathbb{N}$. Como $\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2^n} = 1$, por la prueba M de Wiertrass deducimos que la serie $\sum_{n \in \mathbb{N}} f_n(x)$ es uniformemente convergente en $[0, \infty)$, digamos $f(x) = \sum_{n \in \mathbb{N}} f_n(x)$ con $x \in [0, \infty)$. Luego, f es una función continua, y de la proposición 2 (ii), preserva la métrica. Ahora verifiquemos que f no es diferenciable en ningún lado.

Consideremos el caso $x = 0$. Como

$$f_n \left(\frac{1}{2^m} \right) = \frac{h \left(\frac{2^n}{2^m} \right)}{2^n} = \begin{cases} \frac{1}{2^n} & \text{si } n \geq m; \\ \frac{1}{2^m} & \text{si } n < m, \end{cases}$$

obtenemos

$$\frac{f \left(\frac{1}{2^m} \right) - f(0)}{\frac{1}{2^m}} = 2^m \left(\sum_{n=0}^{m-1} \frac{1}{2^m} + \sum_{n=m}^{\infty} \frac{1}{2^n} \right) = 2^m \left(\frac{m}{2^m} + \frac{1}{2^{m-1}} \right) = m + 2.$$

De este modo $\lim_{m \rightarrow \infty} \frac{f \left(\frac{1}{2^m} \right) - f(0)}{\frac{1}{2^m}} = \infty$. De aquí y del teorema 11, se deduce $f'(0) = \infty$. Ahora tomemos $x > 0$. Requeriremos de la siguiente propiedad de la función h :

Para cualquier $p \in \mathbb{N}$ se satisface

$$h(p+x) = \begin{cases} h(x) & \text{si } x > \frac{1}{2}; \\ 1-x & \text{si } x \leq \frac{1}{2}. \end{cases} \quad (*)$$

Por otro lado, existe una única sucesión creciente $\{k_n\}_{n \in \mathbb{N}} \subset \mathbb{N}$, tal que

$$x = p + \frac{1}{2^{k_1}} + \frac{1}{2^{k_2}} + \dots + \frac{1}{2^{k_n}} + \dots, \text{ siendo } p = \begin{cases} \llbracket x \rrbracket & \text{si } x \notin \mathbb{N}; \\ \llbracket x \rrbracket - 1 & \text{si } x \in \mathbb{N}. \end{cases}$$

Dado $n \in \mathbb{N}$, consideremos $u_n = p + \hat{u}_n$ y $v_n = p + \hat{v}_n$, donde

$$\hat{u}_n = \frac{1}{2^{k_1}} + \frac{1}{2^{k_2}} + \dots + \frac{1}{2^{k_n}} \quad \text{y} \quad \hat{v}_n = \hat{u}_n + \frac{1}{2^{k_n}}.$$

Luego $\{u_n\}_{n \in \mathbb{N}} \rightarrow x$ y $\{v_n\}_{n \in \mathbb{N}} \rightarrow x$. Además $u_n \leq x \leq v_n$ y

$$v_n - u_n = \hat{v}_n - \hat{u}_n = \frac{1}{2^{k_n}} \quad \text{para todo } n \in \mathbb{N}. \quad \text{Por consiguiente}$$

$$\frac{f(v_n) - f(u_n)}{v_n - u_n} = 2^{k_n} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{h(2^m(p + \hat{v}_n)) - h(2^m(p + \hat{u}_n))}{2^m}.$$

Para obtener el lado derecho de esta igualdad, observemos que

$$2^m \hat{v}_n \leq \frac{1}{2} \quad \text{y} \quad 2^m \hat{u}_n \leq \frac{1}{2} \quad \text{si y sólo si} \quad m < k_1 - 1.$$

Al emplear lo anterior y la propiedad (*), logramos

$$\begin{aligned} \frac{f(v_n) - f(u_n)}{v_n - u_n} &= (1 - k_1) + 2^{k_n} \sum_{m=k_1-1}^{k_n-1} \frac{h(2^m \hat{v}_n) - h(2^m \hat{u}_n)}{2^m} \\ &= k_n - 2k_1 + 2. \end{aligned}$$

En consecuencia $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{f(v_n) - f(u_n)}{v_n - u_n} = \infty$, y por ende f no es derivable en x .

□

CONCLUSIONES

El Teorema 13 sobre las funciones que preservan la métrica y cuya derivada es finita en el punto cero, garantiza que dichas funciones son diferenciables en casi todos lados del intervalo $[0, \infty)$. Sin embargo, en el Ejemplo 14, se muestra que existen funciones con derivada infinita en el mismo punto, que preservando la métrica, no son diferenciables en ninguna parte. De este hecho, surge la pregunta: ¿Qué condiciones deben satisfacer las funciones f que

preservan la métrica tales que $f'(0) = \infty$ para que sean diferenciables en $[0, \infty)$?
No existe una respuesta rigurosa a esta cuestión que aún permanece abierta.

REFERENCIAS

[1] Borsík, J. and Doboš, J., 1986-88, On metric preserving functions, Real Anal. Exchange 13: 285-293.

[2] Borsík, J., 1981, Functions whose composition with every metric is a metric, Math. Slovaca 31: 3-12 (in Russian).

[3] Billingsley, P., 1982, Van der Waerden's continuous nowhere differentiable function, Amer. Math Monthly 89: 691.

[4] Bruckner, A., 1978, Differentiation of Real Functions, Lecture Notes In Mathematics 659, Springer - Verlag, New York.

[5] Das, P. P., 1989, Metricity preserving transforms, Pattern Recognition Letters 10: 73-76.

[6] Doboš, J., 1996, On modifications of the Euclidean metric on reals, Tatra Mt. Math. Publ. 8: 51-54.

[7] Doboš, J., 1996, The standard Cantor function is subaditive, Proc. Amer. Math. Soc. 124, 3425-6.

[8] Doboš, J., 1995, A survey of metric-preserving functions, Questions Answers Gen. Topology 13: 129-133.

[9] Doboš, J. and Piotrowski, Z., 1997, When distance means money, Internat. J. Math. Ed. Sci. Tech. 28: 513-518.

[10] Doboš, J., 1996, A note on metric-preserving functions, Internat. J. Math. Sci. 19: 199-200.

- [11] Doboš, J., 1993-94, Some remarks on metric-preserving functions, *Real Anal. Exchange* 19: 317-320.
- [12] Ger, R. and Kuczma, M., 1970, On the boundedness and continuity of convex functions and additive functions, *Aequationes Math.* 4: 157-162.
- [13] Jůza, M., 1956, A note on complete metric spaces, *Matematicko-fyzikálny časopis SAV* 6: 143-148 (in Czech).
- [14] Kelley, J., 1955, *General Topology*, Springer-Verlag, New York.
- [15] Pokorný, I., 1993, Some remarks on metric preserving functions, *Tatra Mt. Math. Publ.* 2: 65-68.
- [16] Sreenivasan, T. K., 1947, Some properties of distance functions, *J. Indian Math. Soc. (N. S.)* 11: 38-43.
- [17] Terpe, F., 1992, Some properties of metric preserving functions, *Proc. Conf. Topology, Measure and Fractals, Math. Res.* 66, Akademie-Verlag, Berlin, pp. 214-217.
- [18] Terpe, F., 1984, Metric preserving functions, *Proc. Conf. Topology and Measure IV*, Greifswald, Pp. 189-197.
- [19] Wilson, W. A., 1935, On certain types of continuous transformations of metric spaces, *Amer. J. Math.* 57: 62-68.
- [20] Corazza, P. 1999, Introduction to metric-preserving functions, *Amer. Math. Monthly*, Vol. 104, Number 4: 309-323.

MIGROMANIPULACIÓN ÓPTICA POR CORRIENTES DE CONVECCIÓN INDUCIDAS POR LÁSER

Carlos Mario Custodio Vázquez¹

Ibis Ricardez Varga²

Jorge Mauricio Paulin Fuentes³

José Guadalupe Segovia López⁴

Jorge Alejandro Bernal Arroyo⁵

Resumen

En este trabajo se presenta el estudio de la captura de micropartículas dieléctricas de sílice por medio de un potencial óptico inducido por láser. Dicho potencial genera corrientes de convección cuando el haz de luz incide sobre una micropartícula metálica de Níquel, la cual presenta alto coeficiente de absorción. Las partículas atrapadas quedan acumuladas alrededor de esta. Trabajos similares han sido reportados usando películas delgadas como generador de corrientes de convección. Estas técnicas de captura múltiple tienen grandes ventajas sobre otras técnicas convencionales de atrapamiento, como por ejemplo, las pinzas ópticas de una sola partícula.

Introducción

Actualmente existen muchas técnicas de micromanipulación las cuales han permitido un gran desarrollo en muchas áreas del conocimiento como la física, química y biología. Áreas donde es de gran interés investigar y conocer las propiedades de sistemas a escala muy pequeña. Una de dichas técnicas son las pinzas ópticas, que desde sus inicios en 1970 (Ashkin, 1970), ha destacado como una de las técnicas más populares de micromanipulación debido a la sencillez para elaborar la trampa. Sus aplicaciones fueron de inmediato, permitiendo la captura de materia orgánica como virus y bacterias (Ashkin & Dziedzic, 1987).

Ya existe mucha literatura relacionada con esta técnica y sus aplicaciones, como se puede constatar en (Dholakia, Reece, & Gub, 2007). El principio de las pinzas se ha aplicado para capturar nanopartículas (Dienerowitz, Mazilu, & Dholakia, 2008), llamando aún más la atención debido a que abre aún más el abanico de aplicaciones.

El principio de las pinzas ópticas consiste en hacer incidir un haz láser fuertemente enfocado sobre un punto, lo que permite que la partícula que está a su alrededor experimente una fuerza, llamada fuerza de gradiente (Svoboda, 1994), que conduce hacia el punto focal, permitiendo así la captura. La partícula puede ser manipulada moviendo el haz láser. Existen otras técnicas de captura como las pinzas magnéticas (Gosse & Croquette, 2002) y por dielectroforesis (Pethig, 2010), que a través de un campo magnético externo que interactúa sobre una partícula, la cual puede ser capturada y manipulada.

Estas técnicas traen consigo una amplia gama de aplicaciones como estudiar las características mecánicas de sistemas biológicos como el ADN, la separación selectiva de células o bacterias (Chiou, Ohta, & Wu, 2005), enfriamiento de átomos (Dholakia, Reece, & Gub, 2007), lo que impacta directamente al área de la medicina, física y por supuesto la biología, la cual se ha visto ampliamente favorecida con estas herramientas de manipulación. Es por eso que, siguiendo en esta línea se llevó a cabo un método de captura de micropartículas a través de corrientes de convección inducidas por láser. Trabajos previos a nivel teórico sobre el campo han sido reportados por E. Flores-Flores y colaboradores (Flores-Flores, y otros, 2015). Estas técnicas de captura difieren de las antes mencionadas en el hecho de que nos permiten capturar y manipular un gran número de partículas a la vez con una potencia de haz muy baja.

En este trabajo las corrientes de convección son generadas cuando se hace incidir un haz láser sobre una partícula metálica con alto índice de absorción.

Se observa como las partículas que se encuentran alrededor del punto de incidencia son arrastradas y acumuladas alrededor de la μP de Níquel.

III. Objetivos y metas

Objetivo

Estudiar la dinámica de los procesos de captura y micromanipulación de partículas microscópicas dieléctricas por medio de corrientes de convección generadas por láser.

Metas

- a) Construcción de la trampa óptica.
- b) A través del arreglo óptico (trampa óptica) llevar a cabo la captura de micropartículas usando para ello un haz laser gaussiano enfocado sobre una partícula metálica.

Materiales y métodos

El arreglo experimental que constituye una trampa óptica se muestra en la figura 1. Se empleó un láser en rojo ($\lambda = 632 \text{ nm}$) el cual se hizo incidir a 45° sobre un espejo dicroico (DM) para dirigir el haz. Este haz pasa a través de un objetivo de inmersión de 100X de tal manera que el haz se enfoque fuertemente sobre un punto dentro de la muestra. Dicha muestra consiste en partículas esféricas de Sílice de $3 \mu\text{m}$ de diámetro y Níquel de $5 \mu\text{m}$ de diámetro. Ésta es iluminada con una fuente de luz blanca de tal forma que se pueda ver el proceso de captura en la PC un vez que es captada por una cámara CCD. Se utiliza además una lente (L) para aumentar la imagen y un filtro (F) que deja pasar solo la luz que sale del espejo dicroico. Esto para mejorar la imagen que llega a la CCD.

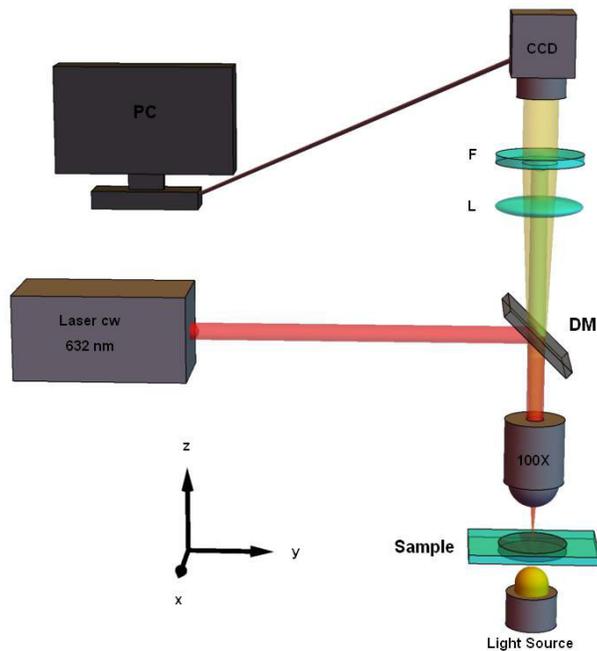


Figura 1. Arreglo experimental de una trampa óptica. El haz láser de onda continua es dirigido hacia el objetivo de microscopio de 100X mediante un espejo dicróico. Las partículas son colocadas en una montura con libertad de movimiento en las tres dimensiones.

Resultados

Cuando se coloca la muestra en la trampa óptica se puede constatar la presencia de 2 partículas de Níquel que se observan perfectamente negras, debido que toda la luz que le incide desde la fuente de luz blanca es totalmente reflejada. De igual manera se observan las partículas de Sílice de 1 micra de diámetro (esferas transparentes). Una vez que el haz láser cae sobre la partícula metálica de inmediato se observa como las micropartículas de Sílice son atraídas y acumuladas alrededor de la μP de Níquel, como en la figura 2. Esto ocurre debido a las corrientes de convección que son generadas al calentar la partícula metálica. Estas corrientes son las responsables de atraer a las partículas de Sílice que se encuentran en una zona cercana e incluso a largas

distancias. Una vez que el haz láser se apaga, el efecto es nulo y las partículas quedan acumuladas y posteriormente se van alejando debido al movimiento Browniano.

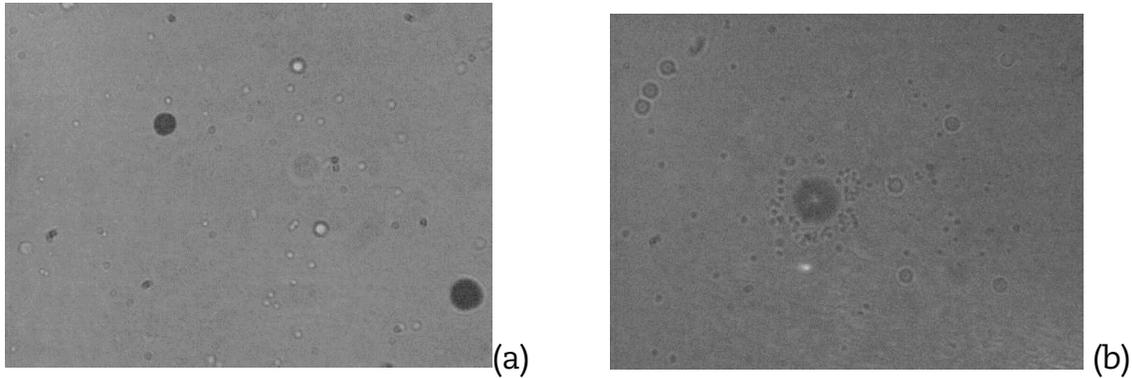


Figura 2. (a). Partículas de Níquel (círculos oscuros) y de Sílice en la muestra. En (b) se aprecia la acumulación de micropartículas de Sílice alrededor de la partícula de níquel.

Tales observaciones son de gran interés en áreas aplicadas como en la biología y medicina, donde el transporte colectivo no invasivo, es requerido. Los modelos teóricos que describen tales fenómenos observados, aunado a los conceptos mencionados de corrientes de convección en la dinámica de fluidos, requieren de la teoría de esparcimiento de radiación a través de partículas en medios acuosos, en lo cual se trabaja actualmente.

Discusión

En la literatura se han reportado mecanismos de captura múltiple de micropartículas a través de corrientes de convección. Yajian Zhen y colaboradores (Zheng, y otros, 2011) reportaron la acumulación de partículas en una burbuja de vapor que se genera cuando un haz láser incide sobre una película de plata. Alrededor de la burbuja se generan corrientes de convección que mueven a las partículas hacia la burbuja. Con esta técnica Yajian Zhen logra generar patrones de micropartículas. Flores-Flores y colaboradores (Flores-Flores, y otros, 2015) logran la captura múltiple haciendo incidir un haz láser sobre una película delgada de silicio amorfo hidrogenado de alto índice de

absorción. Logrando la captura sin la creación de burbujas de vapor. Nuestro método de atrapamiento múltiple se suma a estos trabajos. Donde las micropartículas de Sílice se acumulan alrededor de la μP de Níquel al hacer incidir el láser sobre ésta.

Una de las ventajas de esta técnica es que permite la captura múltiple de partículas usando una potencia muy baja del haz láser, ya que tradicionalmente, las pinzas ópticas funcionan perfectamente para la captura y manipulación de una sola partícula, usando para ello una alta intensidad de luz láser.

Conclusiones

Se han mostrado los resultados preliminares de una técnica de captura múltiple útil y fácil de realizar, empleando para ello una partícula metálica de Níquel a diferencia de trabajos previos donde han empleado películas para generar las corrientes de convección. Actualmente se investigan los métodos para un mejor control grupal de las micropartículas capturadas. Este trabajo queda como antecedentes para las técnicas de micromanipulación, con las potenciales aplicaciones que esto conlleva.

Referencias

Ashkin, A. (1970). ACCELERATION AND TRAPPING OF PARTICLES BY RADIATION PRESSURE. *PHYSICAL REVIEW LETTERS*, 24(4), 157-159.

Ashkin, A., & Dziedzic, J. M. (1987). Optical Trapping and Manipulation of Viruses and Bacteria. *SCIENCE*, 235, 1517-1520.

Chiou, P. Y., Ohta, A. T., & Wu, M. C. (2005). Massively parallel manipulation of single cells and. *Nature*, 436, 370-372.

Dholakia, K., Reece, P., & Gub, M. (2007). Optical micromanipulation. *Chemical Society Reviews*, 37, 42-55.

Dienerowitz, M., Mazilu, M., & Dholakia, K. (2008). Optical manipulation of nanoparticles: a review. *Journal of Nanophotonics*, 2, 1-32.

Flores-Flores, E., Torres-Hurtado, S. A., Páez, R., Ruiz, U., Beltrán-Pérez, G., Neale, S. L., . . . Ramos-García, R. (2015). Trapping and manipulation of microparticles using laser-induced convection currents and photophoresis. *BIOMEDICAL OPTICS EXPRESS*, 6(10), 243082.

Gosse, C., & Croquette, V. (2002). Magnetic Tweezers: Micromanipulation and Force Measurement at the Molecular Level. *Biophysical Journal*, 82, 3314–3329.

Pethig, R. (2010). Dielectrophoresis: Status of the theory,. *BIOMICROFLUIDICS*, 4, 022811.

Svoboda, K. (1994). BIOLOGICAL APPLICATIONS. *Annu. Rev. Biophys. Biomol. Struct.*, 23, 247-285.

Zheng, Y., Liu, H., Wang, Y., Zhu, C., Wang, S., Cao, J., & Zhu, S. (2011). Accumulating microparticles and direct-writing micropatterns using a continuous-wave laser-induced vapor bubble. *Lab Chip*, 11(22), 3816–3820.

NUDOS MATEMÁTICOS

Dr. Jair Remigio Juárez

RESUMEN

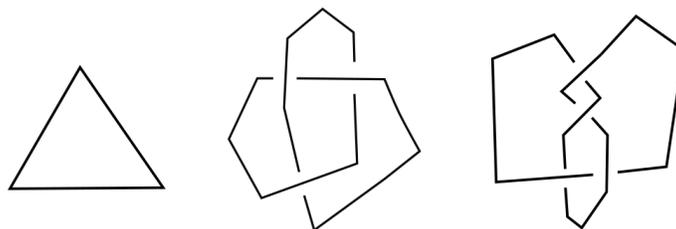
Presentamos ejemplos de como usar los invariantes de nudos para determinar si dos nudos dados son o no son equivalentes.

INTRODUCCIÓN

Un poco de historia. El primer matemático interesado en los nudos matemáticos fue K. F. Gauss en el año de 1833 (Cf. [4]). Su interés se despertó justo cuando estaba haciendo investigación referente a la electrodinámica. Alrededor de 40 años después, Lord Kelvin impulsó una teoría en la cuál se pensaba que las propiedades químicas de la materia corresponden a anudamientos entre los átomos que la conforman. Entre los científicos que se vieron interesados en dicha teoría se encontraban Peter Tait y Carl Little, quiénes en 1900 clasificaron los nudos que tenían 10 cruces o menos. Desafortunadamente, P. Tait y C. Little no pudieron justificar matemáticamente el porqué de su clasificación por la carencia de herramientas matemáticas de esa época.

La teoría de nudos actual se empezó a desarrollar en la primera mitad del siglo pasado y entre sus principales impulsores podemos mencionar a Kurt Reidemeister, James Alexander, John Whitehead y Ralph Fox, entre otros.

◆ **Conceptos básicos.** Un **nudo matemático** es una curva simple cerrada K



en $S^3 = \{x \in \mathbb{R}^4: \|x\| = 1\}$, que es unión de una cantidad finita de segmentos de recta. A pesar de que hay una cantidad enorme de nudos, para la conveniencia del lector, en la Figura 1 podemos observar tres nudos que nos serán útiles posteriormente para dar ejemplos.

Figura 1: Ejemplos de nudos

A los puntos de intersección de los segmentos de recta les llamamos **vértices**. En lo sucesivo para referirnos a un nudo matemático usaremos simplemente la palabra nudo. Decimos que dos nudos K_1 y K_2 son **equivalentes**, si partiendo de K_1 (o K_2), existe una sucesión finita de movidas de triángulo (Ver Figura 2) que nos permite obtener a K_2 (o K_1).

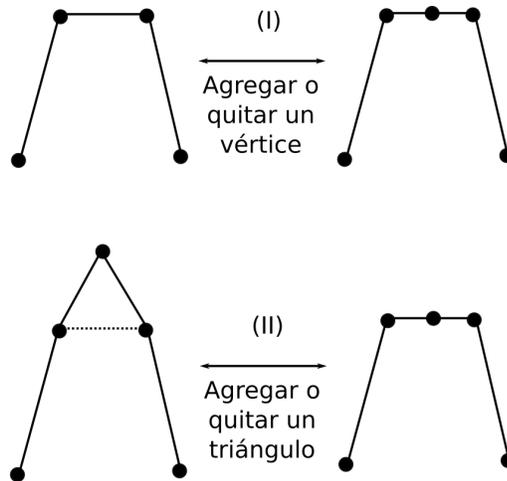


Figura 2: Movidas de triángulo

Un concepto muy útil al estudiar los nudos es el de **Diagrama**. Vagamente hablando, el diagrama de K , denotado D_K , se obtiene proyectando a K sobre \mathbb{R}^2 para obtener una colección de arcos que nos permiten reconstruir el nudo (Ver Figura 3). Es necesario observar en este punto, que el diagrama asociado a un nudo no es único.

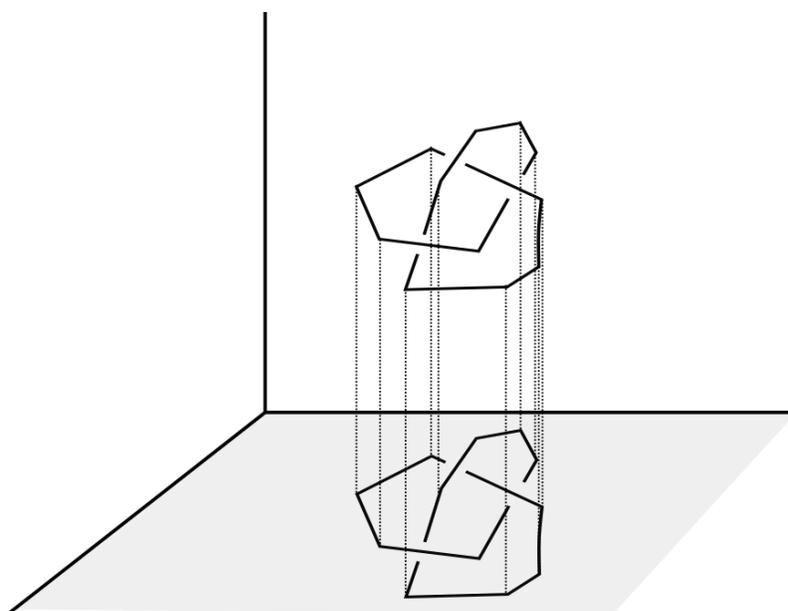


Figura 3: Diagrama de un nudo

Justo como se muestra en la Figura 4, la región donde terminan dos arcos distintos se llama **cruce**. Algo que es muy conocido es que el nudo trivial es el único nudo que admite un diagrama sin cruces, no hay nudos distintos al nudo trivial que admitan diagramas con 1 o 2 cruces, cualquier diagrama del nudo trébol tiene al menos tres cruces y, finalmente, cualquier diagrama del nudo ocho tiene al menos cuatro cruces.

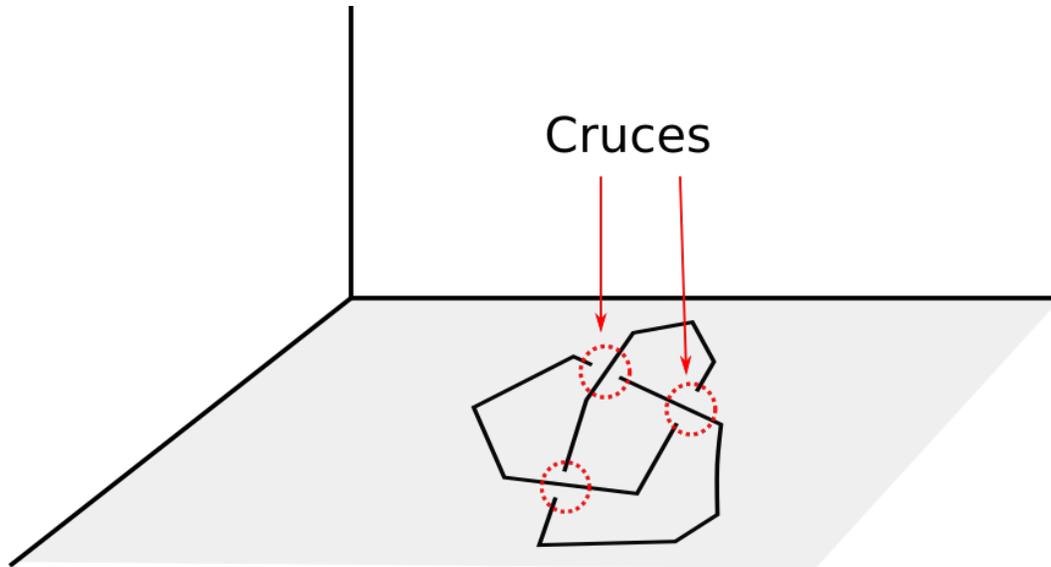
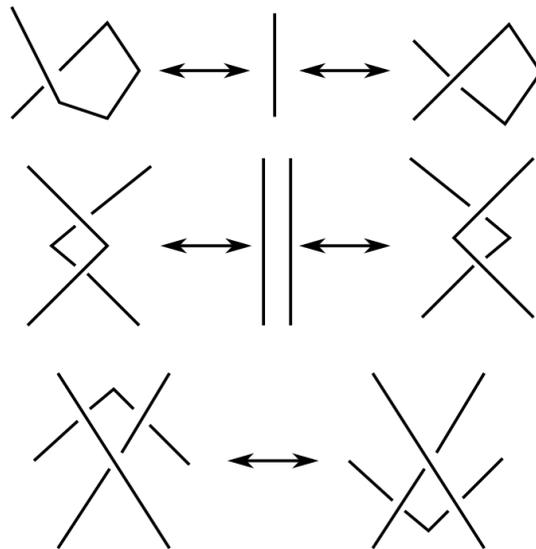


Figura 4. Cruces de un nudo

En 1927, el matemático alemán K. Reidemeister demostró en [3] que dos nudos K_1 y K_2 son equivalentes sí y sólo sí partiendo de D_{K_1} podemos obtener a D_{K_2} , o viceversa, mediante una sucesión finita de lo que hoy en día llamamos **Movidas de Reidemeister**, dicho tipo de movidas son presentadas en la Figura



5. Figura 5: Movidas de Reidemeister

- ◆ **El problema fundamental.** En la teoría de nudos el problema fundamental consiste en decidir si dos nudos dados son equivalentes o no.

OBJETIVOS Y METAS

Nuestro objetivo es divulgar cómo se usan los invariantes de nudos para abordar el problema fundamental de la teoría de nudos.

MATERIALES Y MÉTODOS

Para poder decidir si dos nudos dados son equivalentes o no, se emplean los **invariantes de nudos**, esto es, a cada nudo K se le asigna una propiedad P de tal forma que cualquier otro nudo que sea equivalente a K también tiene dicha propiedad P .

RESULTADOS

Algunos invariantes de nudos son los siguientes:

- *Tricoloreabilidad:* Decimos que un nudo K es **tricoloreable**, si en su diagrama D_K , es posible pintar todos sus arcos con tres colores distintos y en cada cruce aparecen, o bien los tres colores distintos, o bien sólo un color.
- **Teorema 1: La tricoloreabilidad es un invariante de nudos, es decir, si K_1 y K_2 son equivalentes y K_1 es tricoloreable, entonces K_2 también es tricoloreable.**

Demostración: Puesto que el ser tricoloreable es algo que depende exclusivamente del diagrama, basta verificar que la tricoloreabilidad no se ve afectada mediante movidas de Reidemeister, lo cuál es totalmente cierto. En la Figura 6 mostramos algunas de las posibles coloraciones.

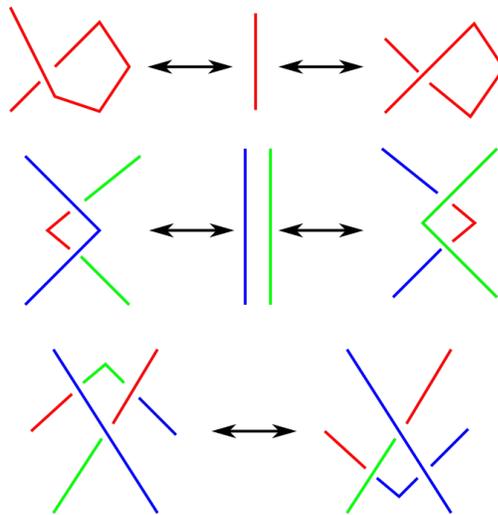


Figura 6: La tricoloreabilidad es invariante bajo movidas de Reidemeister

Ahora que sabemos que la tricoloreabilidad es un invariante de nudos, podemos usarla para determinar la equivalencia de los nudos. En la Figura 7 podemos ver que el nudo trivial no es tricoloreable porque su diagrama no se puede pintar con tres colores distintos; el nudo trébol si es tricoloreable pues su diagrama se pinta con tres colores distintos y en cada cruce aparecen los tres colores; el nudo ocho no es tricoloreable pues aunque uno intente todas las posibles coloraciones siempre habrá cruces donde aparecen únicamente dos colores distintos.

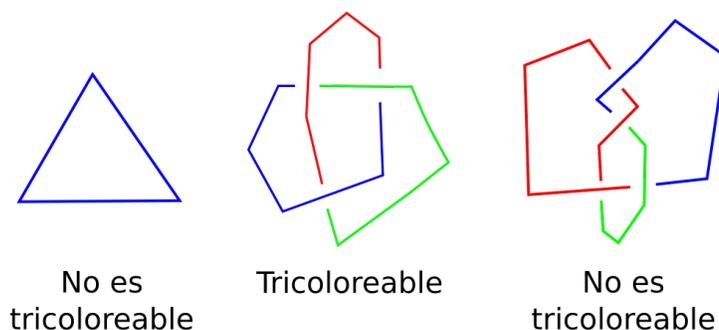


Figura 7: Ejemplos de tricoloreabilidad

De esta forma, el nudo trivial no es equivalente al nudo trébol porque si lo fueran el nudo trivial también tendría que ser tricoloreable como el nudo trébol. Análogamente, el nudo ocho no es equivalente al nudo trébol. En lo que concierne al nudo trivial y al nudo ocho, no podemos asegurar que sean equivalentes porque la implicación del Teorema 1 es en un solo sentido.

- *Mínimo número de cruces:* Sean K un nudo y D_K un diagrama del nudo y denotemos por $c(D_K)$ al número de cruces del diagrama D_K . El **mínimo número de cruces** de K , denotado $c(K)$, se define como $c(K) = \min_{D_K} \{c(D_K)\}$.

Notemos que por definición, el mínimo número de cruces de un nudo se alcanza siempre en un elemento del conjunto $\{c(D_K)\}$, es decir, existe un diagrama \hat{D}_K del nudo K tal que $c(K) = \hat{D}_K$.

Teorema 2: El mínimo número de cruces es un invariante de nudos.

Demostración: Sean K_1 y K_2 dos nudos equivalentes. Supongamos que \widehat{D}_{K_1} y \widehat{D}_{K_2} son diagramas de K_1 y K_2 , respectivamente, para los cuáles se cumple que $c(K_1) = \widehat{D}_{K_1}$ y $c(K_2) = \widehat{D}_{K_2}$. Demostraremos que $c(K_1) = c(K_2)$. Puesto que K_1 y K_2 son dos nudos equivalentes, entonces hay una sucesión finita de movidas de Reidemeister que nos permiten pasar de \widehat{D}_{K_1} a \widehat{D}_{K_2} y viceversa. Así \widehat{D}_{K_2} es un diagrama para K_1 y \widehat{D}_{K_1} es también un diagrama para K_2 y, usando la definición de mínimo número de cruces, obtenemos que $c(K_1) \leq c(\widehat{D}_{K_2}) = c(K_2)$ y $c(K_2) \leq c(\widehat{D}_{K_1}) = c(K_1)$. Por lo tanto, si K_1 y K_2 son equivalentes obtenemos que $c(K_1) = c(K_2)$, es decir, el mínimo número de cruces es un invariante de nudos.

De vuelta a los nudos que hemos estado viendo en nuestros ejemplos, el nudo trivial tiene mínimo número de cruces 0, mientras que para el nudo ocho el mínimo número de cruces es cuatro, de esta forma, como consecuencia del Teorema 2, el nudo trivial y el nudo ocho no son equivalentes.

DISCUSIÓN

Básicamente el problema fundamental que dió origen a la teoría de nudos, que consiste en determinar cuando dos nudos dados son equivalentes o no, aún no ha sido resuelto del todo. Cada que se nos presenta este problema, tenemos que recurrir al uso de invariantes. El problema con los invariantes es que algunas veces no pueden ser aplicados para determinar si dos nudos no son equivalentes, justo como pasó con la tricoloreabilidad aplicada al nudo trivial y al nudo ocho. Entre más invariantes conozcamos es mejor porque justo cuando estemos en la situación de que el invariante que tenemos no detecta nada, bien podríamos usar algún otro que nos saque de apuros.

CONCLUSIONES

En este escrito hemos visto como usar los invariantes de nudos para determinar si dos nudos dados son equivalentes o no, en particular, podemos

concluir que el nudo trivial, el nudo trébol y el nudo ocho son diferentes todos entre sí. Sugerimos a los lectores que estén más interesados en aprender de la teoría de nudos que consulten algunos de los libros que se citan en las referencias.

REFERENCIAS

[1] Adams, C. C. (2004). *The knot book: an elementary introduction to the mathematical theory of knots*. USA: AMS.

[2] Murasugi, K. (1996). *Knot theory and its Applications*. Boston: Birkhäuser.

[3] Reidemeister, K. (1927). Elementare Begründung der Knotentheorie. *Abh. Math. Sem. Univ. Hamburg*, Vol. **5**, pp. 24–32.

[4] Rolfsen, D. (2003). *Knots and links*. USA: AMS Chelsea.

Espinela cromífera como indicador petrogenético en las rocas meta-ultramáficas del basamento del NE de México.

Dra. Sonia Alejandra Torres Sánchez^{1*}

Dra. Carita Augustsson²

Dr. José Rafael Barboza Gudiño³

M.C. Darío Torres Sánchez⁴

Ing. Fidel Parás Martínez⁵

Resumen

Es posible encontrar vestigios de la configuración de Pangea en las rocas metamórficas del Esquisto Granjeno. Esta unidad corresponde a rocas formadas a partir de protolitos sedimentarios (psamitas, pelitas, turbiditas, conglomerado, lutita negra) e ígneos (toba, flujos de lava, lavas almohadilladas y rocas ultramáficas) que fueron metamorfoseadas bajo condiciones de facies de sub-esquistos verdes a esquistos verdes (250-345 °C y 2.5 kbar) durante el Carbonífero Tardío (330±30 Ma). La presencia de rocas meta-ultramáficas indica que durante la configuración de Pangea existieron procesos petrogenéticos asociados con la formación de piso oceánico. Un excelente indicador es el contenido de minerales del grupo de la espinela. Las rocas meta-ultramáficas presentan cromita rica en Al, ferro-cromita y magnetita. La cromita rica en Al tiene valores de #Cr 0.48-0.55 que indican que este mineral fue formado a partir de una fuente tipo MORB y que fue afectada hasta un 18% fusión parcial durante su formación. La ferro-chromita tiene valores de #Cr 0.93-1.00 que indican un origen metamórfico. Lo que sugiere que la formación de rocas meta-ultramáficas estuvo asociada al menos a dos ambientes geológicos distintos.

Introducción

El Esquisto Granjeno forma parte del basamento de la Sierra Madre Oriental, se conforma por intercalaciones de rocas metamórficas de protolitos sedimentarios (psammita, pelita, turbidita, conglomerado, lutita negra) y volcánicos (toba, flujos de lava, lava almohadillada y cuerpos ultramáficos) (Barboza-Gudiño et al., 2011; Ramírez-Ramírez, 1978; Ramírez-Ramírez, 1992; Torres Sánchez 2009; Torres Sánchez et al., 2013,). Estas rocas son relacionadas con el cinturón Granjeno-Acatlán de edad paleozoica (Barboza-Gudiño et al., 2011). Este basamento cristalino representa la porción rocosa más antigua del noreste de México y además del Esquisto Granjeno, el basamento comprende unidades tales como: (a) rocas precámbricas correspondientes a la unidad del Gneis Novillo, y que son potencialmente correlacionables con el orógeno Grenvilleano (Patchett & Ruiz, 1987), b) secuencia clástico-pelítico-carbonatada fuertemente deformada, depositada en una cuenca antepaís de edades que comprenden desde el Silúrico al Pérmico, y c) un cuerpo tonalítico de edad Paleozoica (Zhou et al., 2006). En su conjunto estas unidades brindan información útil para reconocer los procesos geológicos que tuvieron lugar durante la evolución paleozoica de la porción noreste del país (Figura 1).

Las rocas ultramáficas que forman parte del Esquisto Granjeno presentan minerales del grupo de la espinela. Esta especie mineral es de origen ígneo, su composición puede variar, dependiendo de las condiciones de cristalización y de los procesos posteriores de reequilibrio (Martos et al., 2010). Por tanto, la espinela se considera un indicador petrogenético de las rocas ultramáficas a las que se asocia (Martos et al., 2010). Así que el estudio de estos minerales que forman parte de las rocas ultra-máficas del Esquisto Granjeno, brinda la oportunidad de obtener datos que permitan conocer sobre eventos geológicos más antiguos al cierre de la Pangea.

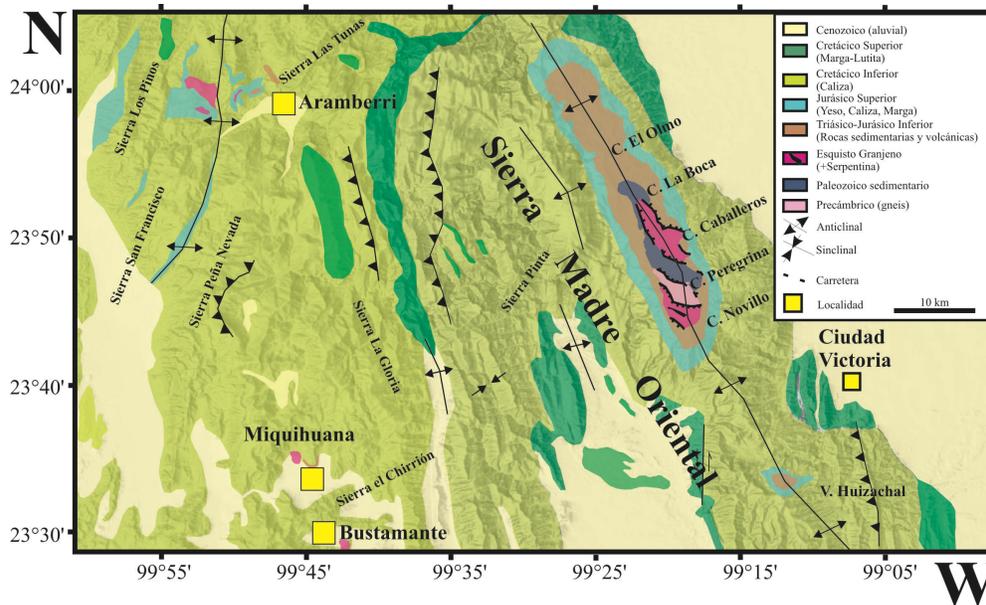


Figura 1 Mapa geológico del área de estudio. Modificado de (Barboza-Gudiño et al., 2011)

OBJETIVOS Y METAS

Este trabajo tiene como objetivo principal aportar nuevos datos petrogenéticos, útiles para generar una interpretación geodinámica acerca del origen de las rocas meta-ultramáficas del Esquisto Granjense. Aportando así nuevos conocimientos sobre la evolución geológica del noreste de México, en el marco de la configuración continental de Pangea.

MATERIALES Y MÉTODOS

Se llevaron a cabo campañas de campo, a fin de caracterizar las litologías y efectuar muestreos representativos. Para esto se consideraron las cartas geológicas del INEGI Ciudad Victoria F14-2, a escala 1:250,000. Se tomaron 15 muestras las cuales se trataron para obtener láminas delgadas según los procedimientos estándar del laboratorio de preparación de la Facultad de Ciencias de la Tierra (UANL) y la Universidad Friedrich-Schiller en Jena,

Alemania (Tucker, 1996). El análisis petrográfico de las láminas delgadas se efectuó con microscopios de luz polarizada marca Leica DMLSP y Carl Zeiss Axioplan 2, para estudiar las texturas de las rocas y las propiedades de cada mineral. El análisis de química mineral se realizó en 6 muestras utilizando un equipo de microsonda electrónica (EMPA), modelo JEOL JXA8230, en el Instituto de Mineralogía de la Universidad Friedrich-Schiller. Se utilizaron estándares de silicatos y óxidos con condiciones de voltaje de excitación de 15.0 kV, un haz de corriente de 15 nA y de diámetro de 2.3 μm (10 μm para análisis de albita).

Resultados

5.1 Petrografía

Las rocas meta-ultramáficas consisten de los minerales metamórficos serpentina, clorita, anfíbol, granate y talco; fases opacas como cromita, magnetita y pentlandita y clinopiroxeno relicto.

Las rocas de serpentinita presentan textura pseudomórfica como a) textura acicular que consiste de lizardita fibrosa y clorita (0.25mm), b) textura de malla o enrejado con bastita de hasta 1 mm de diámetro. La bastita es bordeada por cristales de crisotilo y clorita (0.3mm; (Figura 2a), c) textura de malla fibrosa que consiste de lizardita acicular entrecruzada con una matriz de antigorita (Figura 2b), d) textura de malla o enrejado con listones de lizardita (Figura 2c) El núcleo del listón es reemplazado por carbonatos y/o talco. Además de estas texturas la serpentinita también presenta texturas no pseudomórficas donde la serpentina está orientada, definiendo la foliación. Presenta escamas interpenetradas definiendo una textura en llama. Los constituyentes más habituales de esta textura son la antigorita, y en menos casos el crisotilo (Figura 2d). Además de las texturas descritas se reconocen texturas vetiformes, donde las vetillas son rellenas por cristales de crisotilo y estichtita. En todas las muestras es posible reconocer fases minerales opacas. Estas fases opacas

consisten de cristales fracturados de cromita, magnetita y pentlandita de hábito granular (0.4mm; Figuras 2e y f).

El metacumulato presenta textura pseudomórfica cumulítica con sectores de textura granular. Se compone por porfidoclastos fuertemente deformados con macla curvada de diópsido relicto de hasta 6mm. Cristales de diópsido recrystalizado, anfíbol tabular y grosularia poligonal (Figuras 2g y h) inmersos en una matriz de clorita

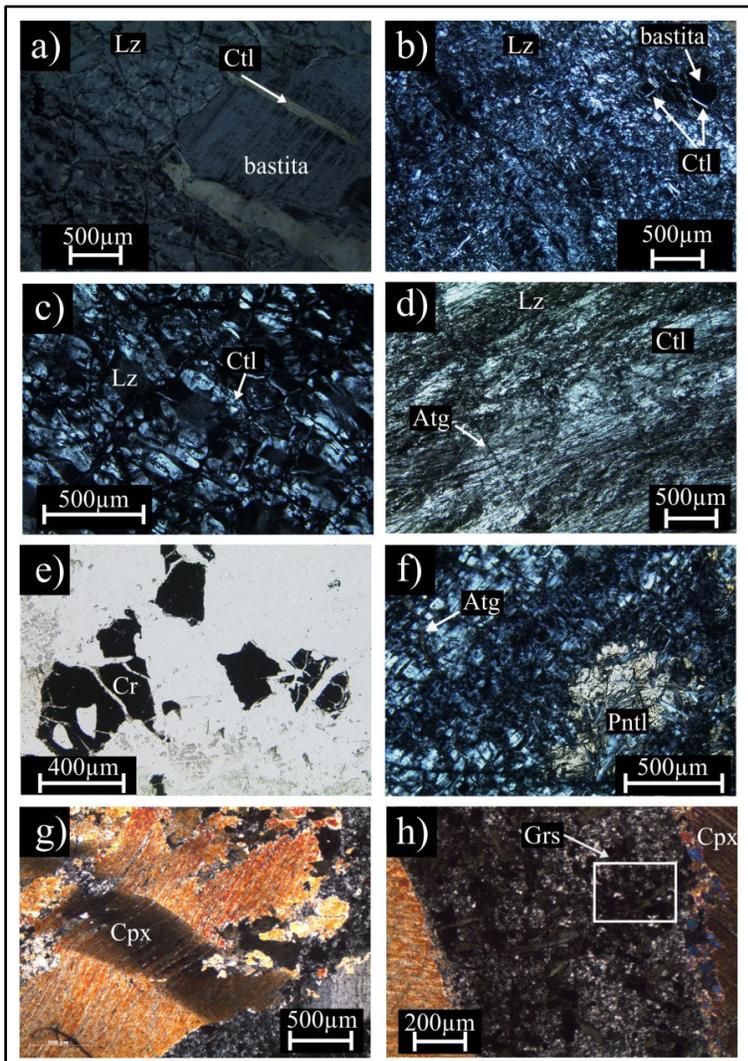


Figura 2 Microfotografías representativas de las rocas ultramáficas. a) Textura de malla con bastita en serpentinita, b) textura de malla fibrosa, c) textura de malla con listones de lizardita, d) textura no pseudomórfica, e) cromita xenomórfica en serpentinita, f) cristal xenomórfico de pentlandita con antigorita, g) textura pseudomórfica cumulítica

con sectores de textura granular, h) cristales de diópsido recristalizado y grosularia poligonal.

5.2 Mineraloquímica

Espinela

La cromita ocurre como cristales con hábitos protogranulares y amoeboidales. Se reconocieron tres tipos de espinela a) espinela zonada con núcleos de tonalidad rojiza y bordes de tonalidad oscura que corresponden a ferro-cromita (Figura 3a), b) cristales de hábito granular de ferro-cromita y c) cristales de tonalidad rojiza que corresponden a cromita pura.

De acuerdo a los valores de $\text{Cr}^{3+} = \leq 0.53$ apfu, de $\text{Fe}^{3+} = 0.46-0.93$ apfu y de $\text{Al}^{3+} = \leq 0.04$ apfu la composición de espinela corresponde a ferro-cromita (Figura 3c). El número de cromo ($\#Cr$ ($Cr/Cr+Al$)) presenta valores de 0.93-1.00, el número de magnesio ($\#Mg$ ($Mg/Mg+Fe^{2+}$)) presenta valores de 0.01-0.52 y de TiO_2 0.16-0.59 wt%, similar a los valores de espinela metamórfica (Aswad et al., 2010).

El núcleo de los cristales de espinela preservan la composición de la espinela primaria y presentan valores de $\#Cr$ ($Cr/Cr+Al$) de 0.48-0.55, valores altos de $\#Mg$ de 0.57 de 0.71 y bajo valores de $\text{TiO}_2 < 0.37$ wt%. De acuerdo a los datos obtenidos por Ehrlicke (1998), el contenido de $\text{Cr}^{3+} = 0.64-0.65$ apfu, de $\text{Fe}^{3+} = 0.33-0.53$ apfu y de $\text{Al}^{3+} = 0.01$ apfu, la cromita corresponde a cromita rica en Al.

Magnetita

Los cristales de magnetita ocurren como bordes de zonación en cromita y ferrocromita y como cristales de hábito granular irregular (Figura 3b). De acuerdo al contenido de $\text{Cr}^{3+} = \leq 0.33$ apfu, de $\text{Fe}^{3+} = 0.67-0.99$ apfu y el bajo contenido de Al^{3+} estos cristales se pueden clasificar como magnetita pura y magnetita enriquecida en cromo. El valor de $\#Cr$ ($Cr/Cr+Al$) varía entre 0.99 y

1.00; el valor de #Mg ($Mg/Mg+Fe^{2+}$) varía entre 0.02 y 0.25; el contenido de TiO_2 varía entre 0.01 y 0.20 wt%.

Pentlandita

La pentlandita ocurre como cristales fracturados irregulares (Figura 4; **Error! No se encuentra el origen de la referencia.**), en presencia de lizardita y antigorita. Presenta valores de $FeO\%=34.92$ wt% y $NiO\%=33.33$ wt%.

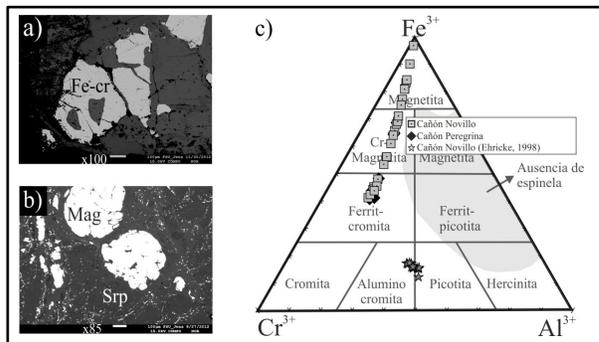


Figura 3 a) Imagen SEM retrodispersada de ferrocromita (Fe-cr: ferrocromita), b) Imagen retrodispersada de magnetita granular (Mag: magnetita, Srp: serpentina), c) clasificación de espinela según (Dick & Bullen, 1984).

Magma parental

De acuerdo a la ecuación de Maurel & Maurel (1982) y Pagé & Barnes (2009); los magmas que generaron los protolitos de las serpentinitas tienen un contenido de Al_2O_3 que varía entre 14.7%-16% y un contenido de TiO_2 que varía entre 0.32% y 0.54%. De acuerdo a la ecuación de Hellebrand (2001), los protolitos de las serpentinitas fueron afectados por un porcentaje de fusión parcial del 17% hasta 18%.

DISCUSIÓN

Distintos eventos de serpentización son asumidos por la presencia de minerales del grupo de la serpentina y clorita, que sustituyeron el contenido mineral original de los protolitos. La lizardita es la fase mineral metamórfica más común en la serpentina. El crisotilo es la fase que ocurre en venas y está asociada con la lizardita. Ambas fases minerales pueden ser reemplazadas por antigorita. La fase de antigorita es escasa y se presenta solamente en venas, así como en zonas de cizalla. Otras fases de alteración incluyen cromita, magnetita, pentlandita, talco, clorita, tremolita - actinolita y calcita. Pseudomorfos de piroxeno conocidos como bastita, están presentes en algunas rocas de serpentina. En las muestras no se detectó la presencia de brucita. La ausencia de este mineral parece ser común en serpentinitas oceánicas más que en serpentinitas continentales (Aumento & Loubat, 1971).

La presencia de cromita en las rocas de serpentinita refleja cambios en la evolución metamórfica. El contenido de Cr en las cromitas aumenta con respecto al grado metamórfico, p.ej. a facies de anfibolita (Evans & Frost, 1975). En facies de anfibolita, la cromita conserva su química ígnea original (Barnes, 2000). De acuerdo al contenido de Fe^{3+} , Cr y Al tanto de la cromita original y la cromita alterada, se sugiere que la serpentización se llevó desde facies de esquistos verdes hasta la parte más baja de las facies de anfibolita (Barnes & Roeder, 2001; Evans & Frost, 1975).

El contenido de ferrocromita en la serpentinita es el producto de alteración de espinela rica en aluminio. Se genera por la reacción entre Cr-espinela y el contenido de clorita en las rocas (Hébert, 1990). La formación de ferrocromita aumenta el contenido de cromo disuelto que junto con el contenido de fierro, resulta en la precipitación de magnetita durante la serpentización de dunita y harzburgita (Coleman 1971; Page, 1968; Wicks, 1969). Moody (1976) propuso que la formación de magnetita está relacionada con el aumento de la temperatura. La ferrocromita se encuentra asociada con antigorita, clorita, tremolita y diópsido en las serpentinitas de todas las áreas. Esta asociación mineral indica serpentización en condiciones de alta presión y temperatura,

en facies de esquistos verdes a anfibolita (Evans & Frost, 1975; Springer, 1974; Ashley, 1975; O'Hanley et al., 1992).

La presencia de grosularia en el metacumulato indica rodingitización por metasomatismo de calcio. Según Bucher (2011), Hernández & Barra (1997) y O'Hanley, y la formación de rodingita se lleva a cabo durante eventos de serpentización aproximadamente a 300 °C. Las fases accesorias como la pentlandita puede ser un indicador para estas condiciones de temperatura. Este mineral se forma como resultado de la recristalización de sulfuros primarios a temperaturas de hasta 450 °C durante procesos de serpentización. La presencia de carbonatos ocurre principalmente en venas y matriz. Este mineral no está en equilibrio con los minerales de serpentina y corresponde a etapas de cristalización posteriores.

Conclusiones

La composición de la cromita indica dos ambientes tectónicos de formación: a) la cromita rica en Al que cristalizó en un ambiente de dorsal. Estas cromitas ocurren en los niveles más someros del manto superior, en la denominada Zona de Transición, cercana a la secuencia de gabro y en donde ocurrió el primer evento de serpentización, b) mientras que la cromita de origen metamórfico pudo haberse formado en ambiente de arco continental donde ocurrió el segundo evento de serpentización

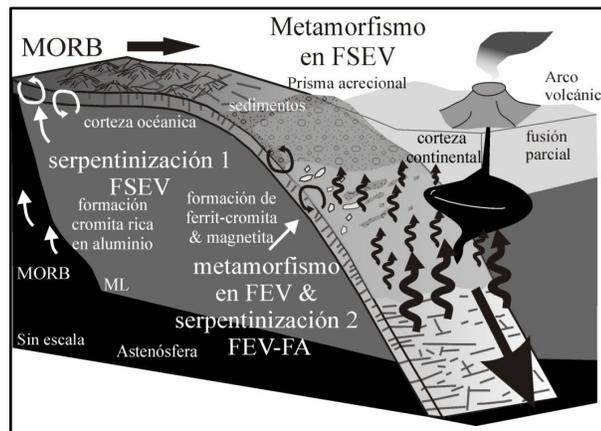


Figura 4 Modelo de metamorfismo y serpentización del Esquisto Granjeno. FA: facies de anfibolita, FSEV: facies de sub-esquistos verdes, FEV: facies de esquistos

verdes, ML: manto litosférico, MORB: basalto de dorsal oceánica.

Referencias

Ashley, P. M., 1975, Opaque mineral assemblage formed during serpentinization in the Coolac ultramafic belt, New South Wales, *Journal of the Geological Society of Australia*, vol. 22, p. 91-102.

Aswad, K. J., Aziz, N. R., Koyi, H. A., 2011, Cr-spinel compositions in serpentinites and their implications for the petrotectonic history of the Zagros Suture Zone, Kurdistan Region, Iraq, *Geological Magazine*, vol. 148, no. 5, p. 802-818.

Aumento, F., & Loubat, H., 1971, The Mid-Atlantic ridge near 45° N. XVI. Serpentinized ultramafic intrusions, *Canadian Journal of Earth Sciences*, vol. 8, no. 6, p. 631-663.

Barboza-Gudiño J.R., Ramírez Fernández, J.A. Torres Sánchez, S.A. y Valencia, V.A., 2011, Geocronología de circones detríticos del Esquisto Granjeno en el Noreste de México: Implicaciones tectónicas, *Boletín de la Sociedad Geológica Mexicana*, vol. 63, no. 2, p. 201-216.

Barnes, S.J. & Roeder, P.C., 2001, The range of spinel composition in terrestrial mafic and ultramafic rocks, *Journal of Petrology*, vol. 42, p. 2279–2302.

Barnes, S.J., 2000, Chromite in komatiites, II. Modifications during greenschist to mid-amphibolite facies metamorphism, *Journal of Petrology*, vol. 41, p. 387–409.

Bucher, K., Grapes, R., 2011, *Petrogenesis of Metamorphic Rocks*, Springer Berlin Heidelberg, p. 21-56.

Coleman, R. G., & Keith's, T. E., 1971, A chemical study of serpentinization - Burro Mountain California, *Journal of Petrology*, vol.12, no. 2, p. 311-328.

Dick, H.J.B. & Bullen, T., 1984, Chromian spinel as a petrogenetic indicator in abyssal and alpine-type peridotites and spatially associated lavas, *Contributions to Mineralogy and Petrology*, vol. 86, p. 54-76.

- Ehricke, C., 1998, Mafische und ultramafische Gesteine des Novillo-Canyons, Sierra Madre Oriental, Mexiko, Tesis de Diploma, Institut für Mineralogie, Petrologie und Geochemie der Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, p. 93.
- Evans, B.W. & Frost, B.R., 1975, Chrome-spinel in progressive metamorphism a preliminary analysis, *Geochimica et Cosmochimica Acta*, vol. 39, p. 959-972
- Hébert, H. K., 1990, P-T estimates estimates of metamorphism of palaeo-pacific oceanic crust, western New England, New South Wales, En *Pacific Rim Congress 87: An international congress on the geology, structure, mineralization, and economics of the Pacific Rim, 26-29 August 1987, Gold Coast, Queensland, Australia*, vol. 3, p. 153.
- Hellebrand, E., Snow, J. E., Dick, H. J., & Hofmann, A. W. 2001, Coupled major and trace elements as indicators of the extent of melting in mid-ocean-ridge peridotites, *Nature*, vol. 410, no. 6829, p. 677-681.
- Hernández, L., & Barra, F., 1997, Hidrogrosularia-uvarovita, vesuvianita y perovskita: productos de rodingitización de rocas ultramáficas del área de La Cabaña, En *Congreso Geológico Chileno*, no. 8, p. 1309-1313.
- Martos, R., Ortega, L., Gervilla, F., Monterrubio, S., Piña, R., Albert, H., Lunar, R., 2010, Composición de las Cromo-espinelas Ofiolíticas de Calzadilla de los Barros (Badajoz): Implicaciones Petrogenéticas, *Macla*, no. 13, p. 151-152.
- Maurel, C. & Maurel, P., 1982, Étude expérimentale de la distribution de l'aluminium entre bain silicatè basique et spinelle chromifère, Implications pètrogènètiques: teneur en chrome des spinelles. *Bulletin de Minèralogie*, vol. 105, p. 197-202.
- Moody, J. B., 1976, Serpentinization: a review. *Lithos*, vol. 9, no. 2, p. 125-138.
- O'Hanley, D. S., Schandl, E. S., Wicks, F. J., 1992, The origin of rodingites from Cassiar, British Columbia, and their use to estimate T and P (H₂O) during serpentinization, *Geochimica et Cosmochimica Acta*, vol. 56, no. 1, p. 97-108.
- Page, N. J., 1968, Chemical differences among serpentine polymorphs. *American Mineralogist*, vol. 53, no. 1-2, p. 201.

- Pagé, P., & Barnes, S. J., 2009, Using trace elements in chromites to constrain the origin of podiform chromitites in the Thetford Mines ophiolite, Québec, Canada. *Economic Geology*, vol. 104, no. 7, p. 997-1018.
- Patchett, P. J., & Ruiz, J., 1987, Nd isotopic ages of crust formation and metamorphism in the Precambrian of eastern and southern Mexico, *Contributions to Mineralogy and Petrology*, vol. 96, no. 4, p. 523-528.
- Ramírez-Ramírez, C., 1978, Reinterpretación tectónica del Esquisto Granjeno de Ciudad Victoria, Tamaulipas, Tesis de Maestría, Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Ingeniería.
- Ramírez-Ramírez, C., 1992, Pre-Mesozoic geology of Huizachal-Peregrina anticlinorium, Ciudad Victoria, Tamaulipas, and adjacent parts of eastern Mexico, Tesis de Doctorado, Universidad de Texas, Austin, 318.
- Springer, R. K., 1974, Contact metamorphosed ultramafic rocks in the Western Sierra Nevada foothills, California, *Journal of Petrology*, vol. 15, p. 160-195.
- Torres Sánchez, S.A., 2009, Petrología e Interpretación Geodinámica del Esquisto Granjeno en el Cañón de Caballeros, Anticlinorio Huizachal-Peregrina, NE de México: Universidad Autónoma de Nuevo León. Tesis de licenciatura, Linares, Nuevo León, México, p. 186.
- Torres Sánchez, S.A., Augustsson, C., Ramirez Fernandez, J.A., Barboza Gudiño, J.R., Jenchen, U., Abratis, M., 2013, Geochemistry and metamorphism of the Paleozoic metasedimentary basement of the Sierra Madre Oriental, NE Mexico. Possible paths from their depositional environment?, *Geological Society of America Abstract with programs*, vol. 45, no. 3, p. 60.
- Tucker, M.E., 1996, *Methoden der Sedimentologie*, Ed. Enke, 366 p.
- Wicks, F. J., 1969, X-ray and optical studies on serpentine minerals, Tesis Doctoral, University of Oxford.
- Zhou, Y., Murphy, M. A., Hamade, A. 2006, Structural development of the Peregrina-Huizachal anticlinorium, Mexico, *Journal of structural geology*, vol. 28, no. 3, p. 494-507.

FOTODEGRADACIÓN DE DIURÓN Y DE METIL PARATIÓN UTILIZANDO PELÍCULAS DELGADAS DE TiO₂-CeO₂

Est. Evaristo Salaya Gerónimo¹

Dr. José Gilberto Torres Torres²

Dra. María Teresa Gamboa Rodríguez³

M.C. Juan Carlos Arévalo Pérez⁴

Dr. José Adrián Carbajal Domínguez⁵

RESUMEN

En el presente proyecto se planteó el diseño de un fotocatalizador a base de TiO₂ dopado a diferentes concentraciones de CeO₂, el cual promueve la actividad catalítica hacia la región del espectro visible, para la fotocatalisis heterogénea de plaguicidas como el metil paratión (50 ppm) y el diurón (40 ppm), mediante el uso de radiación solar simulada.

Los contenidos planteados de CeO₂ en las películas fueron 0.3 ,0.5, 1, 3 y 5 % en peso. Se preparó la mezcla del butóxido de titanio y nitrato de cerio bajo condiciones establecidas para formar un sol-gel el cual se aplicó cuidadosamente mediante la técnica de recubrimiento hilado para fijar la capa sobre las placas de vidrio. Se dio tratamiento térmico a 500 °C para obtener las fases cristalinas deseadas del sistema TiO₂-CeO₂.

Las películas delgadas obtenidas se caracterizaron por Microscopía de Fuerza Atómica y Espectroscopía UV-Vis. La reacción fotocatalítica se llevó a cabo bajo radiación solar simulada. Los resultados obtenidos de las caracterizaciones se relacionan con la actividad fotocatalítica de los materiales sobre la molécula a degradar, donde la película delgada de dos capas de TiO₂-CeO₂ 5 % peso (182 nm) muestra una mayor actividad catalítica para ambos plaguicidas.

INTRODUCCIÓN

Cuando los plaguicidas entran en contacto con el ambiente, éstos son absorbidos y transportados principalmente por medio acuático. Se absorben en

sistemas biológicos (en donde son transformados a otros compuestos, ya sean tóxicos o no tóxicos) y hasta pueden entrar en la cadena trófica. Lo más preocupante de este proceso son los efectos biológicos de los plaguicidas o derivados de éstos en la salud humana, pues las personas pueden estar expuestas a los plaguicidas por inhalación, por absorción a través de la piel (contacto dérmico) o por ingestión de los mismos (Manahan, 2009).

Los plaguicidas como el diurón y metil paratión son utilizados en el Estado de Tabasco para el control de plagas en cultivos, estos plaguicidas contienen moléculas altamente tóxicas a dosis muy bajas, actuando a nivel del sistema nervioso. Debe tenerse mucho cuidado mientras se manipulan, pues penetran por simple contacto con la piel (Liu *et al.*, 2016).

Por tal razón es necesario probar sistemas de degradación de estos contaminantes utilizando métodos avanzados de oxidación como la fotocatalisis heterogénea utilizando luz solar como fuente de irradiación empleando catalizadores a base de TiO_2 y TiO_2 dopado con CeO_2 a diferentes concentraciones preparados en el laboratorio por el método sol-gel y depositados en películas delgadas sobre vidrio mediante la técnica de recubrimiento hilado. Dado que Tabasco es una región de alta radiación solar es interesante aplicar métodos de tratamiento aprovechando la radiación solar para que el tratamiento sea efectivo y de bajo costo.

OBJETIVOS Y METAS

3.1 OBJETIVO GENERAL

Evaluar la degradación fotocatalítica de plaguicidas en medio acuoso usando luz solar simulada utilizando películas delgadas de $\text{TiO}_2\text{-CeO}_2$ soportadas en vidrio a diferentes concentraciones de CeO_2 .

3.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

1. Depositar películas delgadas en vidrio de $\text{TiO}_2\text{-CeO}_2$ a concentraciones 0.3, 0.5, 1, 3 y 5 % en peso de CeO_2 utilizando el método spin-coating (recubrimiento hilado).

2. Caracterizar por métodos fisicoquímicos las películas delgadas depositadas en vidrio: Microscopía de Fuerza Atómica (AFM) y Espectroscopía UV-Vis.
3. Evaluar la degradación fotocatalítica de diurón y metil paratión en medio acuoso usando luz solar simulada utilizando las películas delgadas de $\text{TiO}_2\text{-CeO}_2$ a concentraciones diferentes de CeO_2 .
4. Correlacionar las caracterizaciones fisicoquímicas de las películas con la efectividad de los catalizadores en la degradación fotocatalítica.

I. MATERIALES Y MÉTODOS

4.1 Síntesis del gel mixto $\text{TiO}_2\text{-CeO}_2$

Las películas delgadas de $\text{TiO}_2\text{-CeO}_2$ soportadas en vidrio a diferentes concentraciones de CeO_2 se prepararon utilizando un sol-gel del sistema $\text{TiO}_2\text{-CeO}_2$. Este sistema se obtuvo a partir de la hidrólisis del butóxido de titanio ($\text{Ti}(\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3)_4$) y del nitrato de cerio ($\text{Ce}(\text{NO}_3)_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$) en *n*-butanol mediante agitación mecánica constante a temperatura ambiente durante 24 horas. Se prepararon contenidos de CeO_2 en las películas de 0.3, 0.5, 1, 3 y 5 % del peso total, respectivamente. De igual manera, se preparó un sistema sin contenido de CeO_2 para su comparación.

4.2 Preparación de las películas delgadas

A las placas de vidrio (5 x 2 x 0.1 cm) limpias se les aplicó por medio de la técnica de recubrimiento hilado (spin-coating), de manera cuidadosa, una capa del sol-gel $\text{TiO}_2\text{-CeO}_2$ formado usando un método de dos pasos, el primero a 500 rpm con la finalidad de fijar las películas, y el segundo a 1500 rpm para el secado de las mismas.

Se continuó con el método antes descrito hasta formar 2 capas de película sobre las placas. Después, se sometieron a un proceso de calcinación durante 4 horas a 500°C (utilizando una rampa de temperatura de 2 °C/min), para obtener las fases cristalinas deseadas del sistema.

Las películas delgadas sintetizadas fueron nombradas de acuerdo a su porcentaje peso de cerio y el número de capas depositadas: TiO_2 , TiCe0.3\% 1c ,

TiCe0.3% 2c, TiCe0.5% 1c, TiCe0.5% 2c, TiCe1% 1c, TiCe1% 2c, TiCe3% 1c, TiCe3% 2c, TiCe5% 1c y TiCe5% 2c.

1.3 Caracterización

Las películas de TiO₂-CeO₂ depositadas en vidrio obtenidas se caracterizaron por medio de las siguientes técnicas:

Microscopía de Fuerza Atómica (AFM)

Con los datos obtenidos por este tipo de instrumento es posible obtener medidas de rugosidad, evaluar si hay formación de agregados, micro-dureza y en algunos casos es posible hasta observar contornos cristalinos a escala nanométrica. El microscopio empleado en este proyecto es un Q-Scope™ 250/400 Nomad™ fabricado por Ambios Technology Corporation.

Espectroscopía UV-Vis

Mediante esta técnica se puede obtener las señales de transmisión (T) de la luz a través de una película dieléctrica en la región de la transparencia es suficiente para determinar las partes real e imaginaria del índice refractivo complejo, conocido como grosor.

Las lecturas se realizaron en un espectrofotómetro UV-Vis modelo Cary 300 fabricado por Varian, el cual tiene un rango de 800 a 200 nm, con una lámpara de tungsteno.

4.4 Evaluación de la actividad catalítica

La actividad fotocatalítica de las películas dentro del rango de la luz solar se realizó en un reactor con luz solar simulada en un simulador modelo SUNTEST CPS+ fabricado por Atlas.

El reactor de 200 mL fue acondicionado de tal manera que las placas quedaran colocadas en forma de alberca. El sistema se mantuvo en agitación constante y con suministro de aire. El tiempo de reacción fue de 180 minutos; tomando muestras en los intervalos de tiempo de 30, 60, 90, 120, 150 y 180 minutos.

Se preparó una solución acuosa de diurón a 40 ppm y otra de metil paratión a 50 ppm para ser utilizadas como plaguicidas contaminantes. La degradación

del diurón y del metil paratión se determinaron por espectroscopía UV-Vis a 250 nm (diurón) y 275 nm (metil-paratión). La degradación de los plaguicidas se utilizó para determinar la eficiencia de las películas de $\text{TiO}_2\text{-CeO}_2$ en la degradación fotocatalítica de los plaguicidas en medio acuoso para poder correlacionar estos resultados con sus propiedades fisicoquímicas.

RESULTADOS

5.1 Caracterizaciones de las películas delgadas

Con la finalidad de conocer su topografía, las películas se analizaron por Microscopía de Fuerza Atómica (AFM). La Figura 1, correspondiente a la morfología de la película TiCe0.3\% 1c , revela una superficie muy rugosa (presenta la formación de canales) y un espesor de 138.5 nm; mientras la película TiCe5\% 1c (Figura 10.b) muestra que el espesor de la película aumentó a 228.8 nm. Se visualiza una superficie poco rugosa, con una formación de gránulos que no se encuentran distribuidos de manera uniforme.

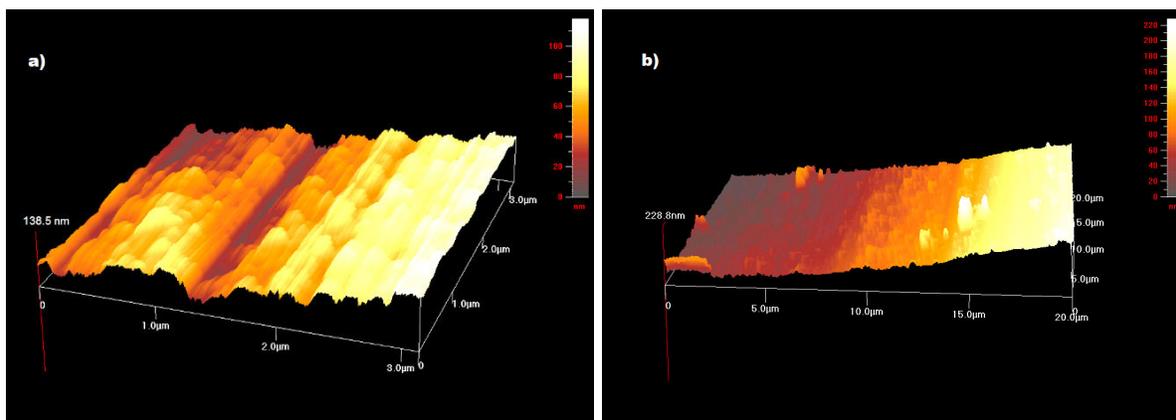


Figura 1. Micrografía AFM en tres dimensiones de las películas delgadas a) TiCe0.3\% 1c $3 \times 3 \mu\text{m}$ y b) TiCe5\% 1c $20 \times 20 \mu\text{m}$.

Al depositarse una segunda capa, se observa que la distribución de las partículas de la película es más uniforme, como se muestra en la Figura 2.a para la película TiCe0.5\% 2c , donde se visualiza la formación de finos aglomerados alargados y poca rugosidad. La película TiCe5\%2c (Figura 2.b), en cambio, revela una superficie más rugosa, con formación de largos aglomerados. El espesor de las películas fue de 132.3 y 182.3 nm, respectivamente. Cabe destacar que el espesor de las películas disminuye,

contrario a que se esperaría que aumentara, atribuyéndose esto al reordenamiento que presentan las partículas de la película al ser calcinadas a 500 °C.

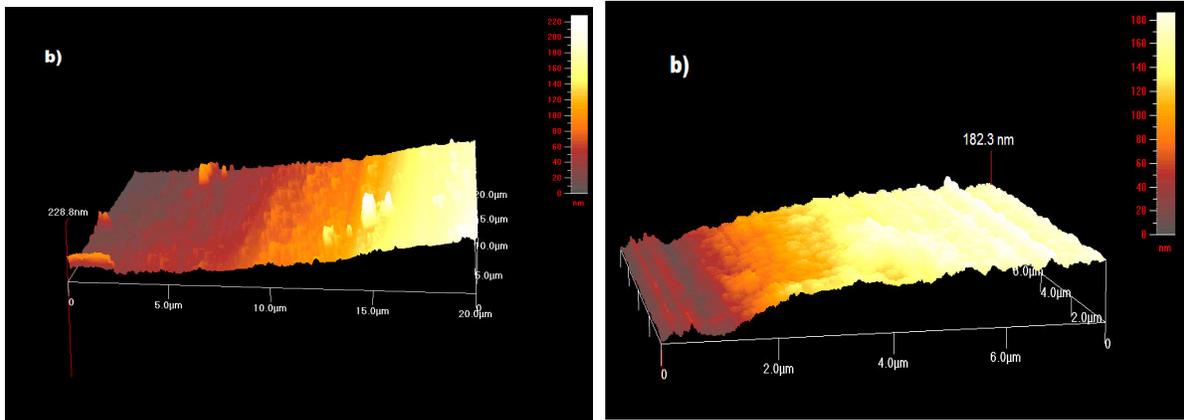


Figura 2. Micrografía AFM en tres dimensiones de las películas delgadas a) TiCe0.5% 2c 8 x 8 μm y b) TiCe5% 2c 8 x 8 μm.

En la Figura 3.a se presentan los cambios en las señales de la banda de transmisión de las películas de TiO₂ dopadas con CeO₂ de una capa. Se aprecia el pico mayor de la banda de la película TiCe5% 1c que se encuentra en la región de 589 nm, mientras que el pico de la película de TiO₂ se encuentra a los 513 nm. Igualmente, se muestra el comportamiento de las películas con 2 capas (Figura 3.b), donde la película TiCe5% 2c describe un comportamiento similar a la película con una capa, registrando su pico mayor en la región de 543 nm. Se aprecia una relación inversamente proporcional entre el ancho de los picos de las bandas de transmisión emitidas por las películas y el espesor de las películas, ya que entre más ancho es la amplitud del pico, más delgada es la película.

Con los datos obtenidos de las señales de transmitancia se calcularon los espesores promedio de las películas. Se obtuvo un espesor promedio de 159 nm para la película de TiO₂, la cual destaca con mayor espesor sobre las películas dopadas con CeO₂, a excepción de las que contienen 5%, tanto de una como de dos capas depositadas, con un espesor promedio de 230 y 182 nm, respectivamente.

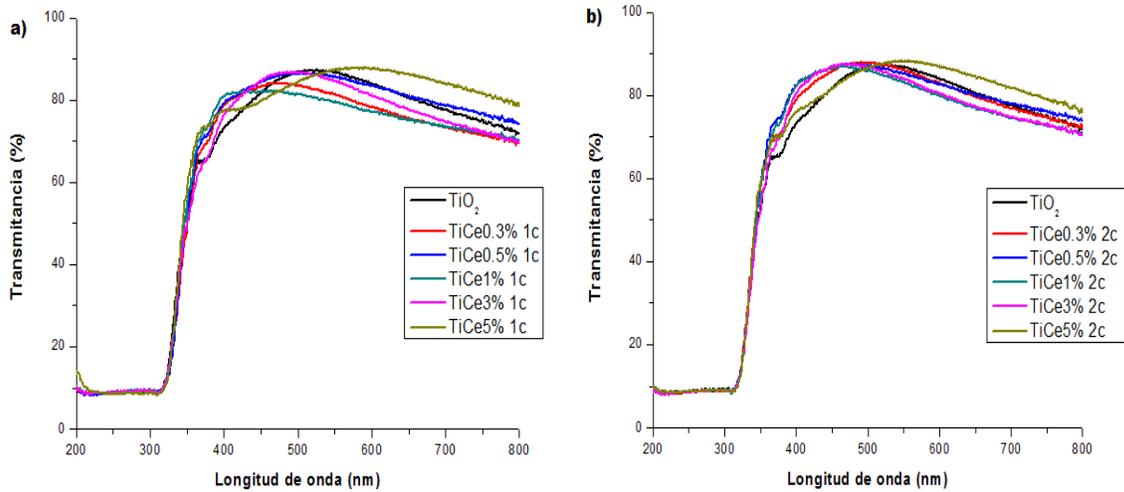


Figura 3. Bandas de transmisión de las películas delgadas con a) una y b) dos capas depositadas.

5.2 Degradación fotocatalítica del Diurón

La actividad fotocatalítica de las películas se determinó mediante la degradación de diurón bajo irradiación de luz solar simulada durante 3 horas. En la Figura 4.a se muestra la actividad fotocatalítica de las películas delgadas de TiO₂-CeO₂ de una capa en comparación al TiO₂. Se observa que el catalizador con 5% peso de CeO₂ sobresale de los demás catalizadores, tanto de los demás catalizadores, como con respecto a la película de TiO₂, con una degradación de 18% y mayor actividad en la primera hora.

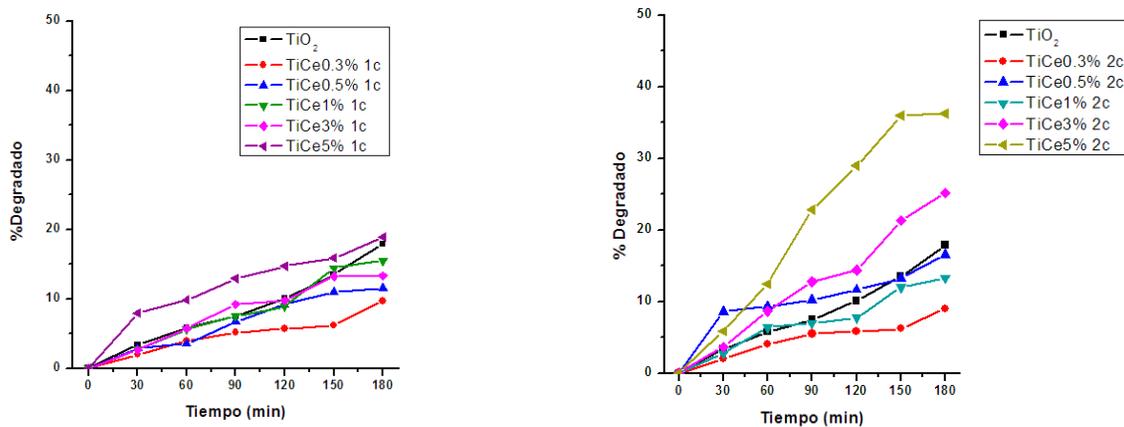


Figura 4. Porcentaje de degradación de diurón con películas delgadas de TiO₂-CeO₂ de a) una capa y b) dos capas en un tiempo de 180 minutos.

La actividad fotocatalítica de las películas de TiO₂-CeO₂ con dos capas se muestra en la Figura 4.b, donde se observan dos grupos de catalizadores, al compararlos con la película de TiO₂. El primer grupo, con baja actividad son los catalizadores con un porcentaje en el peso de CeO₂ menor a 1%; el segundo grupo se compone por los catalizadores con 3% y 5% de CeO₂, con una degradación de 25% y 36% respectivamente.

Los cambios de absorción de la mezcla de reacción, determinados por espectroscopia UV-vis, durante la fotodegradación del diurón usando las películas TiCe5% 1c son presentados en la Figura 5; en donde se aprecia claramente que la intensidad de la banda de absorción a 250 nm asignada al diurón decrece conforme aumenta el tiempo de irradiación solar. Dentro de la misma banda de absorción se observan pequeños picos que corresponden a la formación de intermediarios de degradación. La banda de absorción que aparece a 280 nm corresponde a la molécula de 3,4-dicloroanilina (Malato et al., 2003); la intensidad de esta banda aumenta en los primeros 30 minutos de reacción. Sin embargo, se observa que no presenta un aumento gradual en las siguientes horas de exposición a la luz solar simulada. La intensidad de esta banda disminuye a partir de los 120 minutos de reacción como consecuencia de la oxidación de los grupos funcionales que propician la formación de este intermediario de reacción.

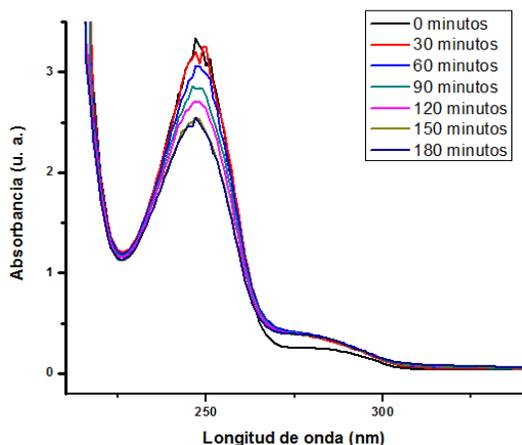


Figura 5. Bandas de absorción del diurón a través del tiempo de reacción.

5.3 Degradación fotocatalítica del Metil Paratión

Como segunda evaluación de la actividad fotocatalítica de las películas delgadas, se determinó la degradación de metil paratión bajo irradiación de luz solar simulada durante 3 horas. En la Figura 6.a se muestra la actividad fotocatalítica de las películas delgadas de $\text{TiO}_2\text{-CeO}_2$ de una capa en comparación al TiO_2 . Se observa que el catalizador con 5% peso de CeO_2 destaca de los demás catalizadores al mostrar una mejor actividad fotocatalítica, tanto de los demás catalizadores, como con respecto a la película de TiO_2 , con una degradación de 47% de la concentración inicial. La actividad fotocatalítica de las películas de $\text{TiO}_2\text{-CeO}_2$ con dos capas se muestra en la Figura 6.b, donde se puede observar tres grupos de catalizadores, al compararlos con la película de TiO_2 . El primer grupo, con baja actividad son los catalizadores con un porcentaje peso de CeO_2 de 1% y 3%; el segundo grupo se compone por los catalizadores con 0.3% y 0.5% de CeO_2 con una degradación similar a la película de TiO_2 ; finalmente, se destaca la película TiCe5\% 2c con una degradación de 44% de la concentración inicial.

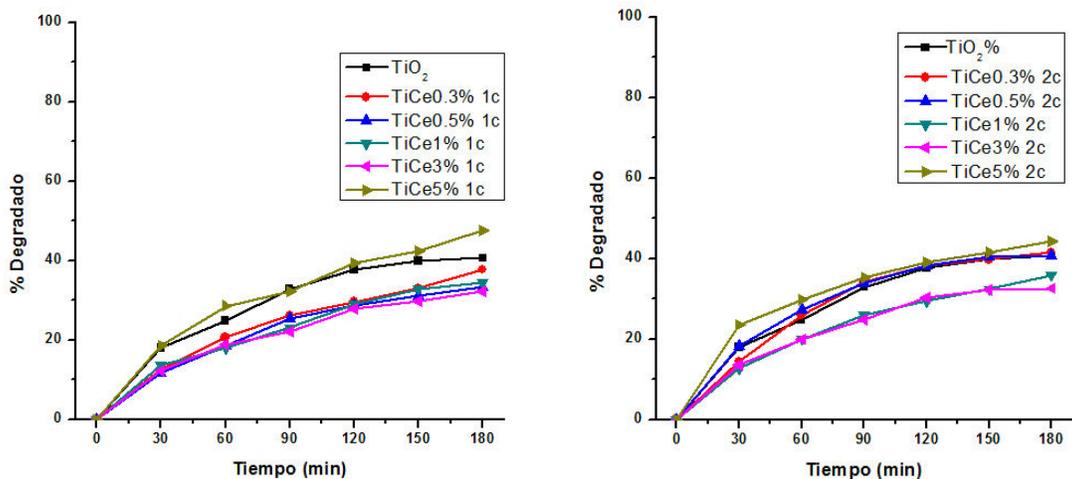


Figura 6. Porcentaje de degradación de metil paratión con películas delgadas de TiO₂-CeO₂ de a) una capa y b) dos capas en un tiempo de 180 minutos.

Los cambios de absorción de la mezcla de reacción, determinados por espectroscopia UV-vis, durante la fotodegradación del diurón usando las películas TiCe5% 2c son presentados en la Figura 7. Se aprecia claramente que la intensidad de la banda de absorción a 250 nm asignada al metil paratión decrece conforme aumenta el tiempo de irradiación solar. No se observa la presencia de picos que correspondan a la formación de intermediarios de degradación.

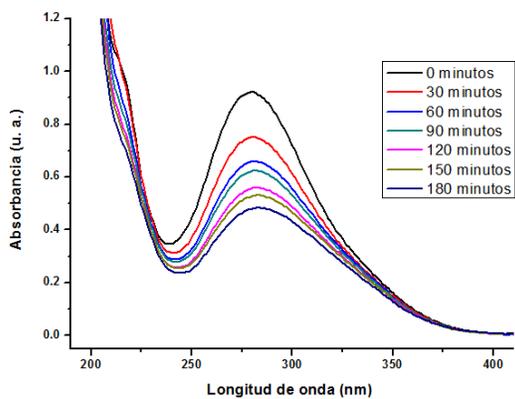


Figura 7. Bandas de absorción del metil paratión a través del tiempo de reacción.

DISCUSIÓN

Las películas delgadas del sistema TiO_2 logran degradar las moléculas contaminantes pues aprovechan el 5% de la luz UV disponible en la radiación solar que incide sobre la superficie de la tierra (Zhongchen *et al.*, 2015). Al ser dopadas con CeO_2 se espera que un mayor rango de la luz solar sea especialmente aprovechado (Abdullah *et al.*, 2015). Se presume que el sistema presenta la mayor degradación cuando la película es más gruesa, por lo que hay contacto suficiente con la molécula (López-Cuellar *et al.*, 2015).

Con las imágenes AFM y las señales de transmitancia obtenidas se infiere que la rugosidad de las películas disminuye con el aumento de CeO_2 , al ser aplicada una capa. Mientras que, al depositarse la segunda capa, la rugosidad aumenta conforme aumenta la concentración de CeO_2 (Park *et al.*, 2014). Esto se atribuye al reacomodo que sufren las partículas al ser sometidas a tratamiento térmico (Zheng *et al.*, 2015).

En el caso de la degradación fotocatalítica del diurón, se obtuvo que se produce una saturación en la superficie de las películas debido a la concentración del contaminante, bloqueando parcialmente la transferencia de electrones entre el catalizador y la molécula (Klongdee *et al.*, 2015). Esto propicia la presencia de intermediarios como la 3,4-dicloroanilina, que está reportada como altamente tóxica (Solís *et al.*, 2016).

La ruta de degradación del metil paratión es clave para conocer el comportamiento dependiendo del grupo funcional que sea atacado. En estudios reportados, se plantean concentraciones iniciales relativamente bajas del contaminante (Sharma *et al.*, 2012). En este proyecto, las películas delgadas mostraron ser altamente fotoactivas durante la primera hora, con una concentración inicial de 50 mg/L.

CONCLUSIONES

Se logró sintetizar y depositar películas delgadas de $\text{TiO}_2\text{-Ce}_2$ sobre vidrio mediante la técnica de recubrimiento hilado (spin-coating). Esta técnica

favorece el aumento de la rugosidad y la formación de canales entre los espacios de los largos aglomerados que presentan las películas, lo que incrementa la superficie efectiva de contacto entre la película y el contaminante orgánico, esto se ve reflejado en el aumento en la actividad fotocatalítica.

El porcentaje en peso de Cerio agregado más favorable fue de 5%, para una y dos capas, presentando una degradación de los compuestos contaminantes mayor a la de las películas de TiO₂ sin dopar, ya que aumenta su grosor y ayuda a la absorción en una región más amplia dentro del espectro de luz solar. Así mismo, se observó que la concentración inicial de la molécula a degradar influye en la actividad fotocatalítica, debido a que se produce una saturación en la superficie de las películas; por lo que se propone bajar la concentración de los compuestos a degradar, para evaluar la actividad fotocatalítica, aún sin ajustar el pH a medio ácido, para comprobar la eficiencia de las películas a bajo costo.

REFERENCIAS

Abdullah, H., Khan, M. R., Pudukudy, M., Yaakob, Z., & Ismail, N. A. (2015). CeO₂-TiO₂ as a visible light active catalyst for the photoreduction of CO₂ to methanol. *Journal of Rare Earths*, 33(11), 1155–1161.

Klongdee, J., Petchkroh, W., Phuempoosathaporn, K., Praserttham, P., Vangnai, A. S., & Pavarajarn, V. (2005). Activity of nanosized titania synthesized from thermal decomposition of titanium (IV) n-butoxide for the photocatalytic degradation of diuron. *Science and Technology of Advanced Materials*, 6(3–4 SPEC. ISS.), 290–295.

- Liu, Y.-Y., Chen, F.-F., Li, C.-X., Luo, X.-J., Chen, Q., Bai, Y.-P., & Xu, J. H. (2016). Improved efficiency of a novel methyl parathion hydrolase using consensus approach. *Enzyme and Microbial Technology*, 93–94, 11–17.
- López Cuellar, E., Martínez-De La Cruz, A., Cávez Torres, N., & Olicares Cortez, J. (2015). Deposition of BiOBr thin films by thermal evaporation and evaluation of its photocatalytic activity. *Catalysis Today*, 252, 2–6.
- Malato, S., Cáceres, J., Fernández-Alba, A. R., Piedra, L., Hernando, M. D., Agüera, A., & Vial, I. (2003). Photocatalytic treatment of diuron by solar photocatalysis: Evaluation of main intermediates and toxicity. *Environmental Science and Technology*, 37(11), 2516–2524.
- Manahan, S. E. (2009). *Environmental Chemistry* (9th ed.). USA: CRC Press.
- Park, J. H., Kim, W. S., Jo, D. H., Kim, J. S., & Park, J. M. (2014). Effect of Ce conversion underlayer coating on the photo-catalytic activity of TiO₂ sol-gel film deposited on hot-dip GI. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 20(4), 1965–1972.
- Sharma, A. K., Tiwari, R. K., & Gaur, M. S. (2012). Nanophotocatalytic UV degradation system for organophosphorus pesticides in water samples and analysis by Kubista model. *Arabian Journal of Chemistry*. Solís, R. R., Rivas, F. J., Martínez-Piernas, A., & Agüera, A. (2016). Ozonation, photocatalysis and photocatalytic ozonation of diuron: Intermediates identification. *Chemical Engineering Journal*, 292, 72–81.
- Zheng, G., Shang, W., Xu, L., Guo, S., & Zhou, Z. (2015). Enhanced photocatalytic activity of ZnO thin films deriving from a porous structure. *Materials Letters*, 150, 1–4.
- Zhongchen, Y., Song, W., Lu, H., Zhuan, L., & Yuanlin, N. (2015). Photocatalytic Property of Nanostructured S Doped TiO₂ Films Prepared by the Micro Plasma Method. *Rare Metal Materials and Engineering*, 44(7), 1629–1632.

**EFECTO DE TRATAMIENTO POST-DEPÓSITO EN PELÍCULAS ABSORBEDORAS
 $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ DESARROLLADAS POR LA TÉCNICA DE CO-EVAPORACIÓN.**

Est. Noé de la Cruz Santiago¹

Dr. Omar Sarracino Martínez²

Dr. Cristino Ricárdez Jiménez³

Dr. Erik Ramírez Morales⁴

Dr. Germán Pérez Hernández⁵

I. RESUMEN

En este trabajo se sintetizan películas delgadas de $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ (CZTS) en fase kesterita para aplicación como capa absorbadora en celdas solares. Las películas se prepararon por evaporación térmica combinando los compuestos CuS, ZnS y SnS, controlando la estequiometría mediante el ajuste de la razón de depósito de los materiales, de manera independiente. Las propiedades de las películas fueron evaluadas usando las técnicas de RAMAN y UV-Vis. Los estudios ópticos indican que la banda de energía prohibida E_g de las películas

muestran una clara tendencia a disminuir en un rango de 2.0 a 1.7 eV con una reducción en el contenido de Cu_2S . Con tratamientos térmicos realizados a temperaturas de 350 a 450 °C, con un tiempo de 5 min. en atmosfera de azufre, encontramos las condiciones adecuadas para obtener películas con banda de energía prohibida óptima y picos de espectroscopia de dispersión Raman, muy cercanos a desplazamientos característicos del CZTS.

INTRODUCCIÓN

Los materiales semiconductores juegan un papel importante en la celda solar, y existen distintos materiales que comúnmente son usados tales como: CIGS ($\text{Cu}(\text{In},\text{Ga})\text{Se}$), CdTe y el Silicio. Estos presentan un especial estatus debido a que absorben la mayor parte del espectro visible, a la variedad de técnicas que presentan para su depósito así como el prometedor crecimiento observado en la industria fotovoltaica, sin embargo desde el punto de vista ambiental, este tipo de tecnologías presentan desventajas que disminuyen su atractivo, por ejemplo, en su estructura se encuentran metales pesados (lo cuales son tóxicos para los seres humanos) como el Se, Cd y Te, por otra parte en los procesos de manufactura se generan materiales contaminantes, como en el caso de las celdas de silicio, en el que en la producción industrial se genera Tetracloruro de Silicio como producto de desecho, esta sustancia al contacto con el agua disminuye el pH y en consecuencia el agua se vuelve tóxica para los seres vivos; por último, los materiales que lo componen tienen baja abundancia tales como el In, Cd, Te y Se [1,2].

Existen otros tipos de semiconductores, tal como el cristal tipo kesterita el cual es un material cuaternario, formado por Cu, Zn, Sn y S, $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$, conocido también como CZTS (por sus siglas en inglés). Las recientes investigaciones lo mantienen como un candidato prometedor para su uso en las celdas solares debido a las propiedades fotovoltaicas que posee, además, los elementos que lo componen son menos tóxicos y abundantes en la corteza terrestre,

comparados con los materiales fotovoltaicos comerciales usados hasta ahora. Las películas delgadas de CZTS usualmente son policristalinas y el tipo de cristal que forma es tetragonal (grupo espacial I-4), el cual se encuentra representada en la figura 1 [3,4].

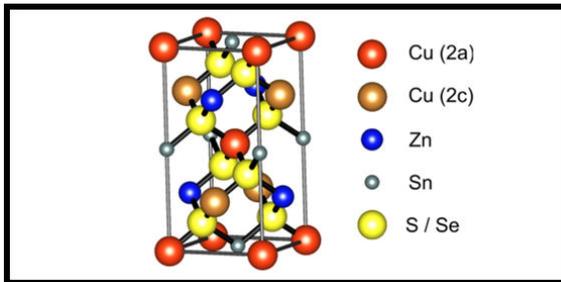


Figura 1. Representación de la estructura tipo kesterita, donde se observa el arreglo de los átomos.

En 1980, Ito y Nakazawa demostraron las prometedoras propiedades ópticas del CZTS (coeficiente de absorción de luz alto en el orden de 10^{-4} cm, band gap que se encontraba en alrededor de 1.5 eV) y obtuvieron un voltaje V_{oc} de circuito abierto de 165 mV [5]. Por otro parte, se tienen reportes teóricos que el CZTS puede lograr altas eficiencias de conversión mejores a las del CIGS. Parag y Tara mencionan en su reporte que Loferski calculó un límite teórico de eficiencia para una homo-unión de celda solar en 23%; éste fue un primer cálculo del límite teórico de la eficiencia de los materiales tipo kesterita que tiempo después, Wang et al, mencionaron en su reporte que Shockley et al calcularon un nuevo límite que aumentó hasta 32.2%, por lo cual el CZTS es un buen candidato para sustituir al CIGS [6-8].

Actualmente, existen distintos métodos de depósitos que han tenido buen coeficiente de absorción tales como: co-evaporación térmica, evaporación multi-etapas, spray pyrolysis, electrodeposición, sol-gel, co-sputtering reactivo y Ink printing [9-12]. De los métodos que se han obtenido buenos resultados para la obtención de kesterita con propiedades fotovoltaicas, el que ha brindado mayores eficiencias de conversión de luz es el método de co-

evaporación térmica; Fella et al reportaron que la eficiencia de conversión por el método de evaporación térmica ha sido de 9.15% (obtenido por una variante de kesterita que contiene Selenio, CZTSe) mientras que el compuesto kesterita libre de Selenio (CZTS) fabricado por el mismo método ha alcanzado 4.1% obtenido por Schubert et al [13-17].

OBJETIVOS Y METAS

3.1 Objetivo

Obtener películas de $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ con propiedades fotovoltaicas adecuadas mediante el empleo de tratamientos post-depósito para su aplicación como material absorbedor en el desarrollo de celdas solares.

3.2 Metas

- Sintetizar películas delgadas de $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ (CZTS) a partir de la co-evaporación de compuestos binarios.
- Estudiar los efectos de los tratamientos post-depósitos en las películas de $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$, tratadas en diferentes atmósferas (sulfurantes, oxidantes, reductoras e inertes) para el mejoramiento de sus propiedades fotovoltaicas (ópticas, eléctricas y morfológicas).
- Caracterizar las películas mediante las técnicas: Estructural, Óptica, Eléctrica, Morfológica y Composición) y con ello lograr un mejor entendimiento de las propiedades que presenta el CZTS bajo los diferentes tratamientos post-depósitos.

MATERIALES Y MÉTODOS

4.1. Materiales y equipo

Los materiales y equipos de laboratorio y de caracterización que se usaron para el presente trabajo de investigación fueron facilitados por la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, a través del Cuerpo Académico: Materiales y

Dispositivos Semiconductores (UJAT-CA-257) y por la Universidad Popular de la Chontalpa (UPCH).

Entre los materiales se mencionan los reactivos SnS, ZnS y CuS de Sigma Aldrich, cada uno con 99.99% de pureza, así como los demás componentes de laboratorio. Así mismo, se usó el equipo de la evaporadora INTERCOVAMEX TE12 que alcanza un nivel de vacío del orden de 10^{-4} a 10^{-5} Torr, con la cual se realizaron los depósitos de las películas; la mufla para los tratamientos térmicos y el equipo de UV-VIS. También se usaron equipos de nueva adquisición, como el perfilómetro y el equipo de espectroscopía Raman.

4.2. Metodología

Para sintetizar las películas delgadas de $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ (CZTS) mediante la co-evaporación de compuestos binarios, el procedimiento consiste en que los compuestos binarios (CuS, ZnS y SnS) son calentados hasta alcanzar su temperatura de evaporación; luego, la mezcla de vapores se condensan en un sustrato (vidrio Corning) y forman la aleación del compuesto cuaternario $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ en forma de película delgada. Este proceso de evaporación se realizó con el evaporador térmico INTERCOVAMEX TE12.

Posteriormente, cuando se han formado las películas delgadas del cuaternario se caracterizan por las técnicas de: perfilometría y espectroscopías RAMAN y UV-VIS. Esta parte del procedimiento se realiza con el propósito de verificar el espesor de la película formada, la confirmación de que el compuesto cuaternario se ha formado en dicha película y estudiar sus propiedades ópticas, respectivamente.

RESULTADOS

En la Tabla 1 se presentan los porcentajes de los compuestos binarios usados para la síntesis de tres muestras de películas delgadas del cuaternario CZTS usando la técnica de evaporación térmica. Después de haberse sintetizado, las

películas fueron sometidas a tratamientos térmicos (TT) en atmósfera de azufre variando la temperatura de tratamiento en 300, 350, 400 y 450°C, con diferentes tiempos de residencia.

Tabla 1. Porcentaje de precursores usados para sintetizar películas delgadas de CZTS y su respectiva energía de banda prohibida de acuerdo a las condiciones de tratamientos térmicos (TT).

Películas delgadas fabricadas.	Precursores binarios (% masa)				Banda de Energía prohibida E_g (eV)	
	CuS.	ZnS.	SnS.	S.	Sin TT	Con TT (450°C)
M32	21	35	35	9	2.1	1.9
M38	25	32	43	0	2.2	1.5
M43	20	26	34	20	2.2	1.7

Análisis de espectrofotometría UV-vis.

En las espectrografías que se muestran a continuación se presentan los resultados de tres películas delgadas preparadas por evaporadora térmica, teniendo cada una de estas diferentes composiciones, tal como se muestra en la tabla 1. De las películas tratadas, la película M38 (figura 2) presentó mejores resultados mejorando su banda de energía prohibida con los tratamientos térmicos (figura 3), en la cual se calculó una E_g de 1.52 eV después de realizarle tratamiento térmico a 450°C con 10 minutos de residencia.

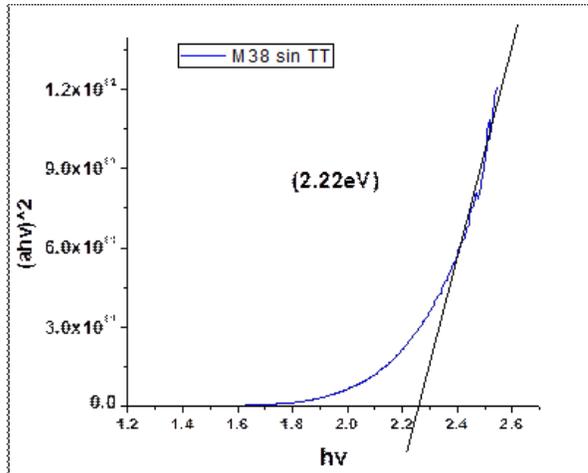


Fig 2. Banda de Energía prohibida de la película M38 sin tratamiento térmico sintetizada con las condiciones que se muestran en la tabla 1.

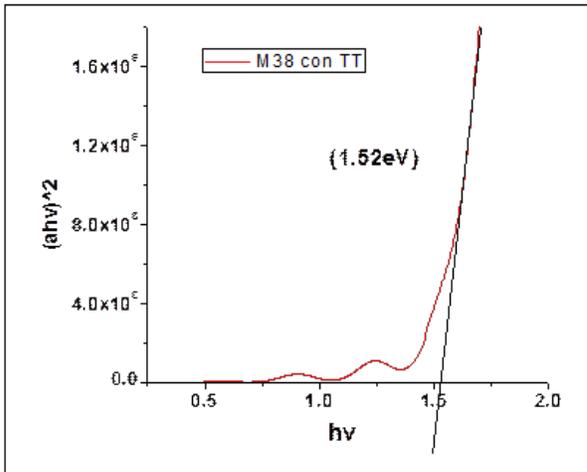


Fig. 3. Se realizaron tratamientos térmicos a las películas en atmósfera de azufre a 450°C durante 10 minutos dando como resultado una E_g de 1.52 eV.

Análisis de espectroscopia Raman.

En la tabla 2 se presentan los datos estándar referente a los picos Raman del cuaternario CZTS [15]. En la figura 4 se muestra el espectro de la muestra M38 con tratamiento térmico a 450°C , en la cual podemos observar que al compararse con la línea roja estándar ubicada en el punto 339 cm^{-1} , el resultado de esta película es bastante aproximado.

Tabla 2. Se muestran los picos característicos del CZTS en fase Kesterita en la espectrometría Raman.

Picos característicos de la Fase Kesterita del Cuaternario CZTS

137, 254, 266, 282, 288, 307, 339, 362, 368 y 662

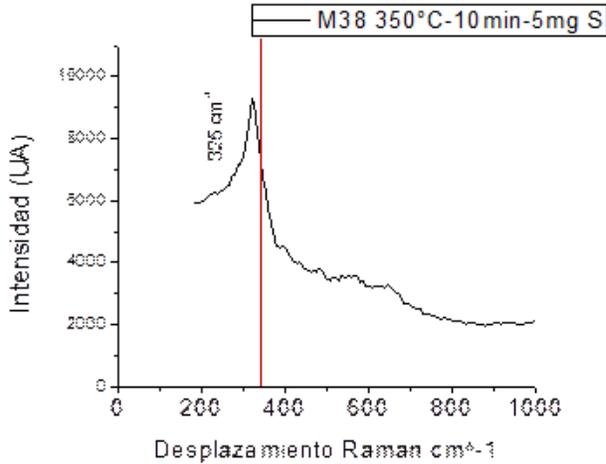


Fig. 4. Espectroscopía Raman de la película M38 con tratamiento térmico a 450°C.

DISCUSIÓN

En relación a los resultados experimentales anteriores, se ha podido apreciar que la formación del cuaternario CZTS depende del porcentaje de masa de cada compuesto binario (CuS, SnS, ZnS) usado durante cada proceso de preparación de la película. De acuerdo con lo anterior, se han obtenido diversos resultados siendo las muestras M32, M38 y M43 las que han tenido valores representativos, según el objetivo que se planteado y cuyas composiciones y resultados de banda de energía prohibida se muestran en la tabla 1.

Antes del tratamiento térmico se puede observar que los valores de banda de energía prohibida son muy semejantes (~2.2 eV). Como se ha mencionado, el tratamiento térmico permite el reordenamiento de los átomos dentro de la película delgada conduciendo a una mejor cristalización del cuaternario. En este trabajo se ha encontrado que la temperatura a la cual los átomos se reordenan es de 450°C, observándose que en las películas donde se añade exceso de azufre (S) durante el proceso de depósito la banda de energía

prohibida es más alta que cuando no se añade azufre (M38), por lo que se puede inferir que el azufre añadido afecta la cristalinidad del material pudiéndose formar fases secundarias en la película [14].

La figura 4 muestra el espectro Raman de la película M38 la cual obtuvo valores de banda de energía cercanos al de la fase Kesterita, en dicho espectro se puede observar la formación del pico Raman muy cercano al pico característico de la fase deseada (339 cm^{-1}) [17]. Por lo tanto, del conjunto de muestras analizadas esta película corresponde a las mejores condiciones de crecimiento como demuestran los resultados obtenidos muy cercanos a los valores estándar de banda de energía prohibida y pico de espectroscopía Raman.

CONCLUSIONES

Se prepararon películas de CZTS con diferentes composiciones de precursores binarios depositadas por la técnica de evaporación y tratadas térmicamente en un ambiente de azufre, las cuales fueron analizadas con UV-Vis, observándose valores de banda de energía prohibida muy semejantes entre ellas ($\sim 2.2\text{ eV}$), presentando una buena aproximación a la E_g del CZTS, indicando propiedades ópticas adecuadas.

La película M38 presentó valores de banda de energía cercanos al de la fase Kesterita y se observa la formación del pico Raman muy cercano al pico característico de la fase deseada (339 cm^{-1}). Por lo tanto, esta película corresponde a las mejores condiciones de crecimiento que presentan semejanza a los valores estándar de banda de energía prohibida y pico de espectroscopía Raman del cuaternario CZTS.

Se requiere continuar con el estudio de los tratamientos térmicos a diferentes temperaturas y tiempos bajo una atmósfera de azufre para obtener películas de CZTS con propiedades óptimas de cristalización y libre de fases secundarias.

REFERENCIAS

- [1] G. B. Mundial. *Consumo de energía procedente de combustibles fósiles (% del total)*, Vol. **2013**.
- [2] K. Hironori, I. Naoya, I. Takeshi and S. Kotoe, *Japanese Journal of Applied Physics* **2001**, 40, 500-504.
- [3] J. T. S. a. J. M. S. S. R. Hall, *Canadian Mineralogist* **1978**, 16, 131-137.
- [4] S. Delbos, *EPJ Photovolt.* **2012**, 3, 35004.
- [5] H. Katagiri, *Thin Solid Films* **2005**, 480–481, 426-432.
- [6] P. S. Vasekar and T. P. Dhakal, *Thin Film Solar Cells Using Earth-Abundant Materials*, **2013**, p.
- [7] W. Wang, H.-L. Shen, J.-L. Jin, J.-Z. Li and Y. Ma, *Chinese Physics B* **2015**, 24, 056805.
- [8] W. Shockley and H. J. Queisser, *Journal of Applied Physics* **1961**, 32, 510-519.
Photovoltaics: Research and Applications **2013**, 21, 72-76.
- [9] B.-A. Schubert, B. Marsen, S. Cinque, T. Unold, R. Klenk, S. Schorr and H.-W. Schock, *Progress in Photovoltaics: Research and Applications* **2011**, 19, 93-96.
- [10] T. Tanaka, A. Yoshida, D. Saiki, K. Saito, Q. Guo, M. Nishio and T. Yamaguchi, *Thin Solid Films* **2010**, 518, S29-S33.
- [11] A. Weber, H. Krauth, S. Perlt, B. Schubert, I. Kötschau, S. Schorr and H. W. Schock, *Thin Solid Films* **2009**, 517, 2524-2526.
- [12] V. G. Rajeshmon, C. S. Kartha, K. P. Vijayakumar, C. Sanjeeviraja, T. Abe and Y. Kashiwaba, *Solar Energy* **2011**, 85, 249-255.
- [13] S. M. Pawar, B. S. Pawar, A. V. Moholkar, D. S. Choi, J. H. Yun, J. H. Moon, S. S. Kolekar and J. H. Kim, *Electrochimica Acta* **2010**, 55, 4057-4061.
- [14] M. Kazuya, T. Kunihiro, N. Yuya and U. Hisao, *Japanese Journal of Applied Physics* **2011**, 50, 05FB08.
- [15] F. Liu, Y. Li, K. Zhang, B. Wang, C. Yan, Y. Lai, Z. Zhang, J. Li and Y. Liu, *Solar Energy Materials and Solar Cells* **2010**, 94, 2431-2434.
- [16] W. Wang, H. Shen, F. Jiang, X. He and Z. Yue, *Journal of Materials Science: Materials in Electronics* **2013**, 24, 1813-1817.

[17] C. M. Fella, Y. E. Romanyuk and A. N. Tiwari, *Solar Energy Materials and Solar Cells* **2013**, 119, 276-277.

SÍNTESIS DE β -HIDROXICETONAS POR QUÍMICA VERDE

L.Q. José del Carmen Méndez Moreno¹

Dra. Nancy Romero Ceronio^{2*}

Dr. Carlos E. Lobato García³

Dr. Cuauhtémoc Alvarado Sánchez⁴

Dr. Miguel Ángel Vilchis Reyes⁵

RESUMEN

Se presenta la síntesis de β -hidroxicetonas por condensación aldólica en medio hidroalcohólico, como primer punto se exploraron las condiciones de reacción para establecer la concentración de NaOH que favoreciera la formación de las

β -hidroxicetonas. Posteriormente se estudió el alcance de las condiciones establecidas, para ello se realizó la condensación del 2-nitrobenzaldehído (**1a**) y 4-nitrobenzaldehído (**1b**) con acetofenona (**2**) (figura 1). Las β -hidroxicetonas correspondientes (compuestos **3a** y **3b**), se obtuvieron con rendimientos mayores al 90%.

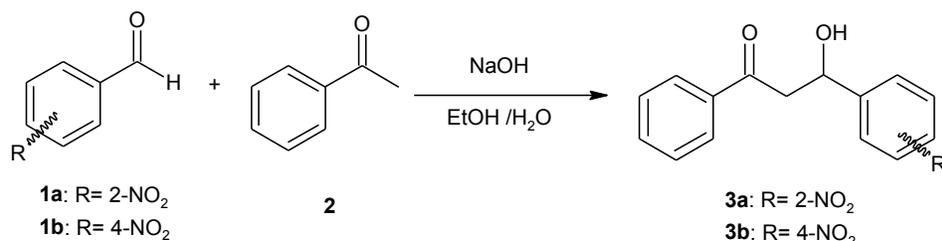


Figura 1. Esquema de reacciones empleado

INTRODUCCIÓN

Uno de los 12 principios de la química verde es la incorporación de medios acuosos para realizar las transformaciones químicas tradicionales (Li & Chan, 2007). Dentro de este contexto la condensación aldólica es una reacción ampliamente estudiada que permite la incorporación de aspectos metodológicos relacionados con este principio (Mestres, 2011).

La reacción aldólica descubierta por Wurtz en 1872 (previamente Kane había descrito lo que hoy conocemos como condensación aldólica), constituye una de las reacciones orgánicas más antiguas. En este proceso se forma un enlace C-C por reacción de un compuesto carbonílico enolizable que actúa como nucleófilo con otro compuesto carbonílico que hace el papel de electrófilo, dando lugar a compuestos β -hidroxicarbonílicos conocidos como aldoles. Cuando el aldol sufre un proceso posterior de deshidratación para generar el compuesto carbonílico α,β -insaturado la reacción se conoce como condensación aldólica. (March, 2007)

Se han reportado diferentes rutas para la síntesis de β -hidroxicetonas tanto enantioselectivas como racémicas, por ejemplo: en el año 2014 Alarcón y colaboradores realizaron la síntesis de β -hidroxicetonas a partir de 2-nitrobenzaldehído y acetofenona empleando una reacción de condensación aldólica, empleando como base NaOH y como medio de reacción una mezcla de H₂O/EtOH, en agitación constante por un tiempo de 2 horas a temperatura ambiente, obteniéndose rendimientos del 90%. (Alarcón, 2014) Esquema 2.

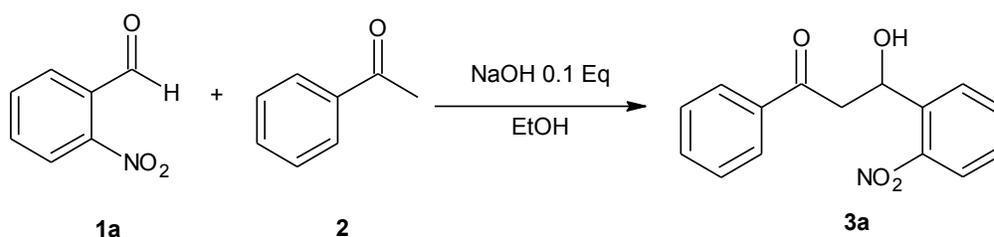


Figura 2. Esquema de reacción para la obtención del compuesto **3a**

OBJETIVOS Y METAS

Sintetizar productos aldólicos de tipo β -hidroxicetonas a partir de la condensación entre la acetofenona y el 2-nitrobenzaldehído (*o*-nitrobenzaldehído) o el 4-nitrobenzaldehído (*p*-nitrobenzaldehído).

Estudiar el alcance las condiciones de reacción propuestas.

MATERIALES Y MÉTODOS

De acuerdo con la literatura consultada, la síntesis de la 2-nitro- β -hidroxicetona **3a** consistió en una reacción aldólica entre el aldehído sustituido **1a** y la correspondiente acetofenona **2** en presencia de una solución acuosa al 0.02 M de NaOH y 3 mL de etanol, siendo adicionada a los reactivos en un lapso de 20 minutos, conteniendo el matraz de reacción en un baño de hielo. Terminada la adición de la solución básica, se dejó la reacción por un tiempo de 2.5 a 3.0 horas con agitación vigorosa dejando que el baño de hielo llegase a

temperatura ambiente por sí solo. La reacción se monitoreó por cromatografía en capa fina (CCF) cada 30 minutos, en contraste con la materia prima en donde se observó la presencia de un solo producto y el consumo total de la materia prima. El crudo de reacción se purificó por recristalización de par de disolventes (hexano:diclorometano). Probada la metodología para la obtención del compuesto **3a**, se procedió hacer la reacción aldólica de la acetofenona **2** y el aldehído **1b**, bajo las mismas condiciones y proceso de purificación. Los productos de reacción fueron caracterizados por RMN de ^1H en un equipo Bruker Advance III HD-600, empleando como disolvente CDCl_3 y refiriendo los desplazamientos químicos a TMS.

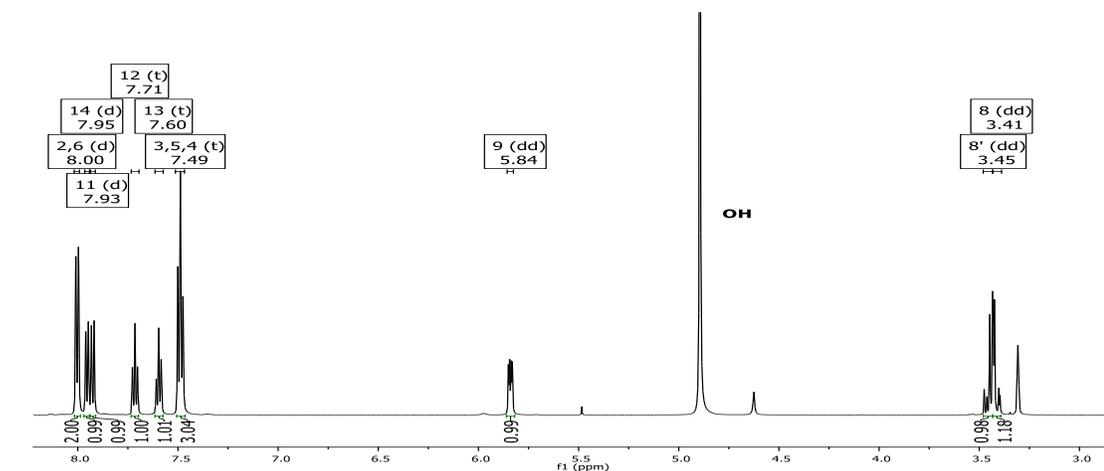
RESULTADOS

En la Tabla 1, se muestran los resultados obtenidos para la síntesis de las b-hidroxicetonas **3a** y **3b**. Se establecieron las condiciones de reacción usando como sistema modelo a la síntesis del compuestos **3a**.

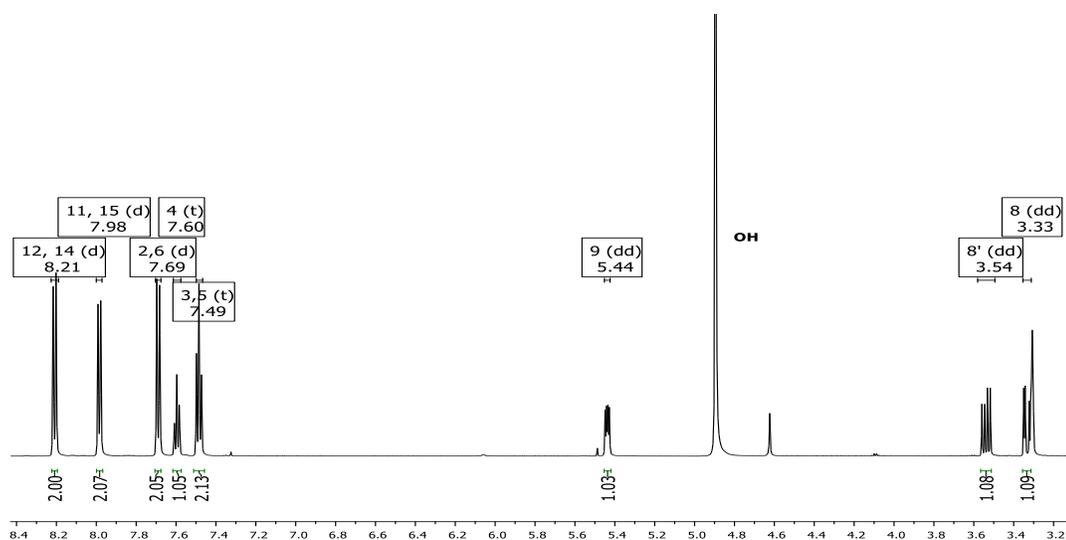
Tabla 1. Variaciones en las condiciones de reacción probadas para la condensación aldólica del compuesto **3a**

Experimento	[NaOH] m/L	Rendimiento (%) 3a	Rendimiento (%) 3b	Tiempo de adición (minutos)
1	0.050	50	50	5
2	0.020	98	90	20
3	0.015	87	11	20

Los productos se caracterizaron por RMN- ^1H , en la figura 3 se muestran los espectros obtenidos:



a)



b)

Figura 3. Espectros de RMN de ^1H (600 MHz, CDCl_3) de: a) b-hidroxicetona **3a**, y b) b-hidroxicetona **3b**

DISCUSIÓN

Las condiciones de reacción en medio hidroalcohólico permitieron la obtención de los productos de reacción aldólica entre la acetofenona y aldehídos aromáticos nitrosustituídos, la reacción se detuvo en el intermediario de b-hidroxicetona, sin que la reacción procediera hasta el producto de deshidratación. Dentro de las características estructurales de los compuestos

obtenidos, es necesario hacer notar que el proceso de síntesis generó un centro estereogénico; sin embargo, dado que no hubo un medio asimétrico dentro de las condiciones de reacción, los productos **3a** y **3b** se obtuvieron como mezclas racémicas.

Las señales de RMN de ^1H de los dos productos de reacción son consistentes con las estructuras esperadas. Se observó la distribución de señales en la región de los protones aromáticos (entre 7.49 y 8.20 ppm) atribuidas a los dos anillos aromáticos de ambas estructuras. En 5.84 ppm (compuesto **3a**) y 5.44 ppm (compuesto **3b**) se encontraron señales con una multiplicidad de doble de dobles y que fueron asignadas respectivamente al hidrógeno de la posición b al carbonilo de cada uno de los dos compuestos. En ambos espectros, se observó en 4.90 ppm una señal intensa atribuida al hidrógeno del grupo hidroxilo. Como era de esperarse, en los dos espectros analizados, los hidrógenos del metileno de la posición a al carbonilo se ubicaron en frecuencias relativamente más bajas (entre 3.60 y 3.30 ppm).

Al analizar la posición del grupo nitro dentro de los aldehídos aromáticos empleados en las condensaciones, se encontró que no influye directamente en el rendimiento de la reacción, ya que ambos compuestos fueron obtenidos con rendimientos mayores al 90%.

CONCLUSIONES

Se comprobó que la metodología propuesta, utilizando un sistema hidroalcohólico como disolvente, es efectiva en la reacción aldólica entre la acetofenona y aldehídos aromáticos, llevando a la obtención de b-hidroxicetonas, sin que la reacción prosiga hasta el producto de deshidratación. El reto consiste ahora en generar condiciones asimétricas para el proceso de la

reacción, de tal manera que se logre la obtención estereoselectiva de los productos.

REFERENCIAS

Alarcón, E. (2014). *Síntesis y Exploración de la Adición tipo Michael en Enonas y Determinación de la Actividad Antiinflamatoria de Nitrochalconas*. Tesis. Maestría en Ciencias con Orientación en Química Orgánica. Universidad Juárez Autónoma de Tabasco. Cunduacán, Tabasco.

Li, C. J., & Chan, T. H. (2007). *Comprehensive organic reactions in aqueous media* (2nd. Ed). Hoboken, NJ: John Wiley & Sons.

Mestres, R. (2011). *Química Sostenible*. Madrid: Editorial Síntesis.

March, J. (2007). *Advanced organic chemistry: reactions, mechanisms, and structure* (6th. Ed.) Hoboken NJ: John Wiley & Sons.

CURVA DE CALIBRACIÓN PARA SUELO CONTAMINADO POR HIDROCARBUROS

M.C. Candelario Méndez Olán¹

Dr. Carlos Mario Morales Bautista²

Dra. Maricela de J. Alor Chávez³

Dr. Lucas López Segovia⁴

RESUMEN

El propósito de este trabajo es ajustar una curva de calibración para un conjunto de datos generados al medir el grado de absorbancia de muestras de suelo contaminados por los hidrocarburos diesel, gasóleo y extrapesado en partes por millón. Debido a la curvatura del grado de absorbancia en función de las partes por millón, se propusieron los modelos de regresión no lineal: Michaelis-Menten, Exponencial Asintótica y Gompertz. Los criterios para seleccionar el mejor modelo fueron: la suma de cuadrados de los errores (sce), el coeficiente de determinación (R^2) y el criterio de información de Akaike (AIC). Al realizar el análisis estadístico mediante el software R project, los resultados mostraron que el modelo exponencial asintótica es el que mejor se ajusta a los datos de absorbancia seguido por el de Michaelis-Menten.

INTRODUCCIÓN

El petróleo es una mezcla de hidrocarburos que se presenta de forma natural (crudo) en depósitos de roca sedimentaria y solo en los lugares donde hubo

mar. La destilación del petróleo se basa en sus diferentes volatilidades. De esta manera, los derivados pueden ser destilados y crudos; el resto es considerado como residuo, su disposición final está apegada a normas de protección ambiental (Obayori *et al*, 2009). De manera general, los crudos son clasificados de acuerdo a su densidad específica determinada a 60 °F mediante distintos métodos ASTM (Adams *et al*, 2008). De este modo, se pueden clasificar los productos en destilados como el diesel y gasóleo mientras que extrapesado se considera crudo.

En química, la absorbancia es la cantidad de intensidad de luz que absorbe una muestra; mientras que partes por millón es una unidad de medida con la que se mide la concentración de alguna sustancia (Jurelevicius *et al*, 2012; Lambert *et al*, 2001). Para el presente estudio, la concentración es medida en mg de hidrocarburo por cada kg de suelo (mg/kg). En este contexto, muchos trabajos de determinación de hidrocarburos en suelos, basan la determinación en los métodos especificados en las normas ambientales mexicanas como la NOM-138-SEMARNAT-SSA1-2012 (Obayori *et al*, 2009), otras técnicas similares citadas en la agencia americana de protección al medio ambiente (EPA). Sin embargo, comúnmente son empleadas dos de ellas referidas en ambas legislaciones, la primera se basa en la extracción continua por método soxhlet mediante la selectividad del solvente y posteriormente la determinación gravimétrica; y segunda, la extracción continua con hexano sobre una columna de silica y la posterior determinación gravimétrica del extracto, en ambos casos, pueden presentarse errores asociados a volatilidad o incompatibilidad del solvente con algunas fracciones de hidrocarburos, principalmente las presentes en petróleo crudo (Orozco-Soto *et al*, 2014). Para evitarlo, se toman los extractos y son rediluidos en solventes clorados que no son absorbidos en infrarrojo, posteriormente, se corren test de factores de dilución en un equipo Infracal TOG/TPH *analyzer* y se extrapola la concentración real del extracto (n=3). La autoridad ambiental generalmente establece que deben de establecerse curva patrones para cada tipo de derivado del petróleo, sin embargo, algunos trabajos

refieren que el equipo solo lee en un rango de 1600-3300 nm, por lo que no es necesario tener una base de datos. Bajo esta hipótesis, se realizaron curvas patrones (o calibración) de absorbancia de diferentes derivados del petróleo (diesel, gasóleo y extrapesado) y se validó una sola curva patrón (Adams *et al*, 2013; Orozco-Soto *et al*, 2014).

OBJETIVOS Y METAS

Determinar cual de los modelos de regresión no lineal: Michaelis-Menten, Exponencial Asintótica y Gompertz genera la mejor curva de calibración o patrón que se ajusta a la tendencia curva del diagrama de dispersión del grado de absorbancia en función de las partes por millón (ppm) de los tipos de hidrocarburos diesel, gasóleo y extrapesado. De esta forma, manejar sólo un modelo que sirva para pronosticar valores de absorbancia de cada uno de estos tipos de petróleo en función de ppm.

MATERIALES Y MÉTODOS

Para medir el grado de absorbancia de cada sustancia se utilizó el instrumento de medición infraCal 2. El InfraCal 2, es una nueva generación de analizadores infrarrojos portátiles, que aumentan el campo de acción de cómo, cuándo y dónde, realizar las pruebas analíticas. Este instrumento realiza pruebas analíticas sencillas de práctica en el campo tales como detección de aceite en agua en sub-ppm, entre otras.

La Figura 1 muestra que la relación de la absorbancia en función de las partes por millón de hidrocarburos de petróleo tipo diesel, gasóleo y extrapesado no es lineal; debido a la tendencia curva de los datos se propusieron los modelos de regresión no lineales: Michaelis-Menten, Exponencial Asintótica y Gompertz para modelar el comportamiento de la absorbancia en función de las ppm, cuyas componentes sistemáticas se describen en el Tabla 1. En todos los modelos se consideró el residual aleatorio con distribución normal e independiente. Los análisis se realizaron con el paquete nlstools (Baty *et al*,

2015) [7] del software estadístico R project (R Core Team, 2017) y se comparó el ajuste de los modelos con base en los criterios siguientes: 1) La suma de cuadrados debido al error

$$sce = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$$

(1)

donde \hat{y}_i es el valor estimado mediante el modelo de la observación y_i , 2) El coeficiente de determinación múltiple R^2 dado por

$$R^2 = 1 - sce/sct \quad (2)$$

estimado con base en la suma de cuadrados del error (sce) y la suma total de cuadrados corregida (sct); mide la variabilidad total explicada por el modelo ajustado (Montgomery *et al*, 2005; Weisberg, 1985), y 3) el Criterio de Información de Akaike (AIC) (Faraway, 2005; Ritz *et al*, 2008) con el planteamiento

$$AIC = -2 \ln(\hat{L}) + 2k \quad (3)$$

donde \hat{L} es el máximo valor de la función de verosimilitud para el modelo estimado y k es el número de parámetros en el modelo. El modelo con el valor menor se consideró como de mejor ajuste.

Tabla 1. Componentes sistemáticos de los modelos no lineales utilizados para describir el comportamiento de la absorbancia.

Modelo	Ecuación
Michaelis-Menten	$y = a * ppm / (b + ppm)$
Exponencial asintótica	$y = a * (1 - e^{-b*ppm})$
Gompertz	$y = a * e^{-b * e^{-c*ppm}}$

RESULTADOS

En la Tabla 2 se muestran los valores de las estimaciones de los parámetros de cada modelo; así como los correspondientes valores de los criterios que se utilizan para la comparación de dichos modelos. De acuerdo al coeficiente de determinación, todos los modelos explicaron más del 97% de la variabilidad de

la absorbancia siendo mejor el exponencial asintótico con R^2 igual a 98.09%. Análogamente, el modelo exponencial asintótico también fue mejor bajo el criterio de información de Akaike y la suma de cuadrados de errores ya que tiene los menores valores. En la Figura 2 se muestran las curvas de calibración o patrón de los tres modelos comparados.

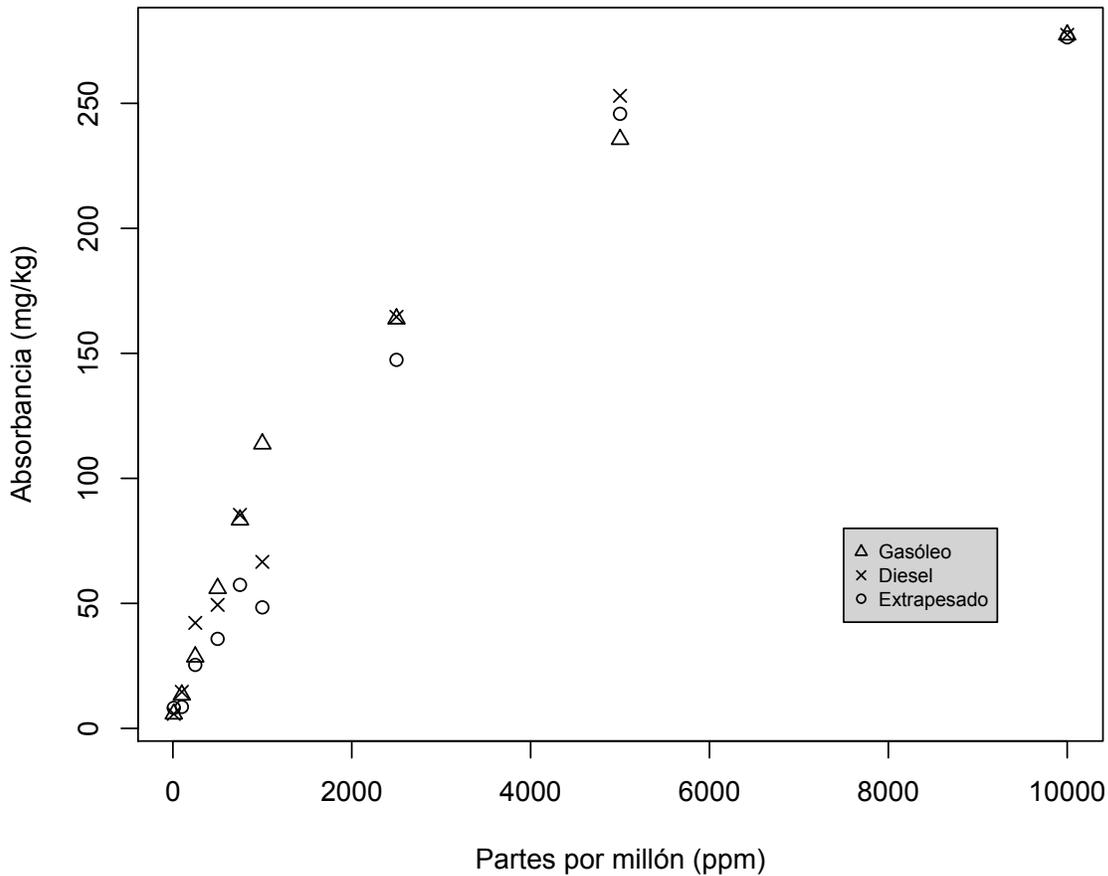


Figura 1. Diagrama de dispersión de absorbancia versus ppm de petróleo gasóleo, diesel y extrapesado.

Tabla 2. Valores de los parámetros estimados y valores de los criterios utilizados para la comparación de modelos.

Modelo	a	b	c	sce	R^2	AIC
--------	---	---	---	-----	-------	-----

Michaelis-Menten	379.43	3305.85		5281.79	0.9784	225.079
Exponencial Asintótica	288.7	0.00034		4681.57	0.9809	221.822
Gompertz	274.7	2.53	0.00063	6006.68	0.9755	230.552
			9	6		

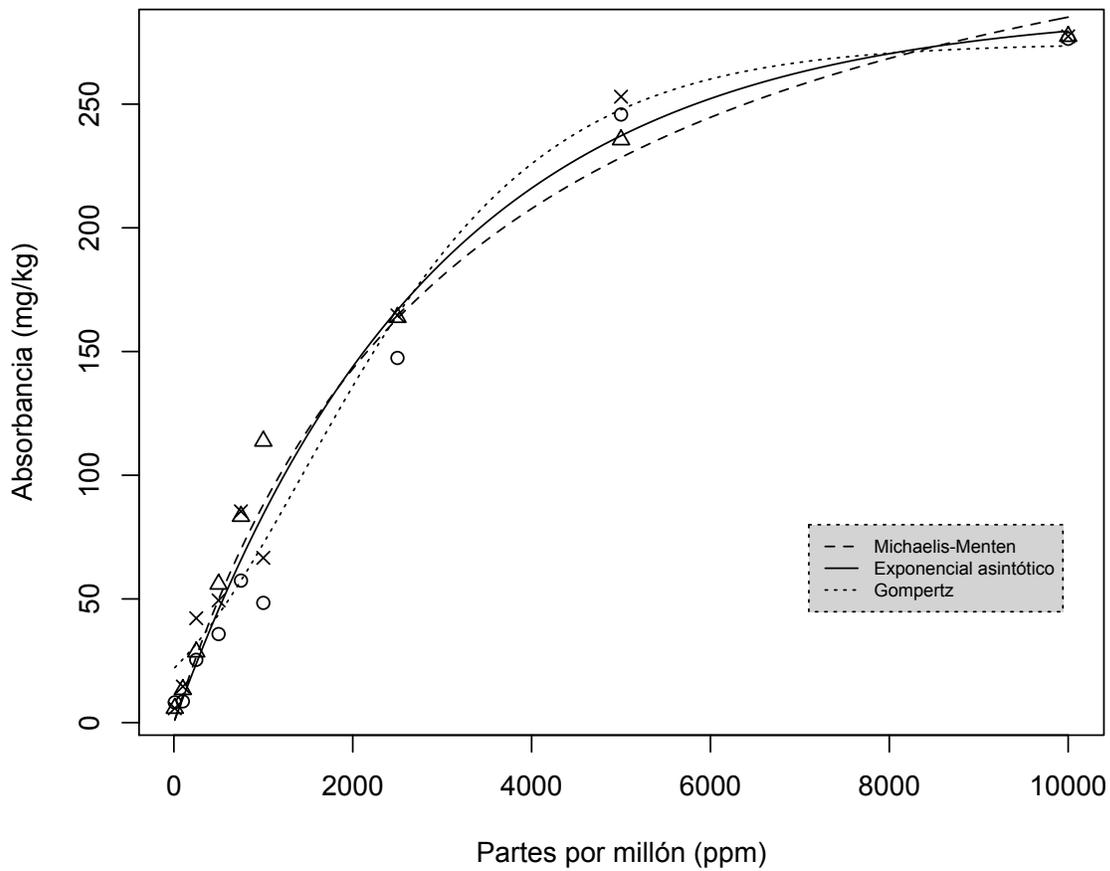


Figura 2. Curvas de calibración de los tres modelos comparados.

DISCUSIÓN

En química, la absorbancia es la cantidad de intensidad de luz que absorbe una muestra y es directamente proporcional a la concentración de la especie (en este caso gasóleo, diesel y extrapesado) que absorbe la luz en la muestra. Los resultados obtenidos en este trabajo (Tabla 2), sugieren que este fenómeno puede ser explicado por cualquiera de los modelos ajustados aquí, ya que la variabilidad explicada supera un 97% ($R^2 > 0.97$). Sin embargo, cuando las partes por millón de petróleo son nulas en la muestra, entonces la absorbancia es cero, esta particularidad hace que el modelo Gompertz no haga un buen ajuste para concentraciones pequeñas como se muestra en la Figura 2. Por otro lado, para concentraciones mayores a 2000 se observa que el modelo de Michaelis-Menten no hace un buen ajuste (sobrestima y subestima el grado de absorbancia). Finalmente, el modelo Exponencial Asintótico hace un mejor ajuste en todo el rango de las partes por millón estudiadas.

CONCLUSIONES

Bajo los criterios suma de cuadrados de los errores (sce), coeficiente de determinación (R^2) y el criterio de información de Akaike (AIC), el modelo Exponencial Asintótico generó la mejor curva de calibración para describir y predecir el comportamiento de la absorbancia en función de las partes por millón de los tipos de petróleo gasóleo, diesel y extrapesado; el modelo queda expresado de la siguiente manera:

$$absorbancia = 288.7(1 - e^{-0.000344ppm})$$

Este trabajo sugiere que en la modelación de la absorbancia con demasiadas concentraciones pequeñas, el modelo de Gompertz no debe usarse, y el modelo de Michaelis-Menten debe usarse con cuidado.

REFERENCIAS

Adams, R. H., Osorio, F. G., & Cruz, J. Z. (2008). Water Repellency in Oil Contaminated Sandy and Clayey Soils. *International Journal of Environmental Science & Technology*, 5(4), 445-454.

- Adams, R. H., Kanga-Leyva, K., Guzmán-Osorio, F. J., & Escalante-Espinosa, E. (2013). Comparison of Moisture Management Methods for the Bioremediation of Hydrocarbon Contaminated Soil. *African Journal of Biotechnology*, 10(3), 394-404.
- Baty, F., Ritz, C., Charles, S., Brutsche, M., Flandrois, J.P. & Delignette-Muller, M.L. (2015). A Toolbox for Nonlinear Regression in R: The Package nlstools. *Journal of Statistical Software*, 66(5), 1–21. URL <https://www.jstatsoft.org/v66/i05/>.
- Faraway, J. (2005). *Linear Models with R*. New York: Chapman & Hall/CRC.
- Jurelevicius, D., Cotta, S. R., Peixoto, R., Rosado, A. S., & Seldin, L. (2012). Distribution of Alkane-Degrading Bacterial Communities in Soils From King George Island, Maritime Antarctic. *European Journal of Soil Biology*, 51, 37-44.
- Lambert, P., Fingas, M., & Goldthorp, M. (2001). An Evaluation of Field Total Petroleum Hydrocarbon (TPH) Systems. *Journal of Hazardous Materials*, 83(1), 65-81.
- Montgomery, D. C., Peck, E. A. & Vining, G. G. (2005). *Introducción al Análisis de Regresión Lineal*. (3a ed.) México: CECOSA.
- Obayori, O. S., Adebusoye, S. A., Adewale, A. O., Oyetibo, G. O., Oluyemi, O. O., Amokun, R. A., & Ilori, M. O. (2009). Differential Degradation of Crude Oil (Bonny Light) by Four Pseudomonas Strains. *Journal of Environmental Sciences*, 21(2), 243-248.
- Orozco-Soto, M., Gutiérrez-Rojas, M., & Peralta-Pérez, M. D. R. (2014). Efecto de la Composición de una Mezcla de Hidrocarburos en la Respuesta Fenotípica y la Acumulación de Azúcares por *Bouteloua Curtipendula* Michx. *Torr en cultivos in vitro*. *Polibotánica*, (38), 159-172.
- R Core Team (2017). *R: A Language and Environment for Statistical Computing*. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. URL <https://www.R-project.org/>.
- Ritz, C. & Streibig, J. C. (2008). *Nonlinear Regression with R*. New York: Springer.
- Weisberg, S. (2005). *Applied Linear Regression*. (3a ed.) New Jersey: John Wiley & Sons.

Los MOOC'S: aprendizaje gratuito

MC. Abel Cortazar May ^{1*}

MC. Roberto E. Alberto Lira ²

MC. Luis Alberto Jiménez Pérez ³

RESUMEN

Actualmente, el avance tecnológico en todas las áreas de la sociedad han permitido acercarnos a la información y este acercamiento se ha dado gracias al internet. Entonces, el internet nos ha traído la información y esta se ha diversificado, llegando así a la era del conocimiento. Por lo tanto, este conocimiento ha permitido que surjan un sin fin de cursos, posgrados, diplomados, etc; de los cuales algunos son gratuitos u otros de paga. En esta misma línea surgieron los MOOC'S como una oportunidad para el aprendizaje gratuitos en diversas áreas del conocimiento. Este aprendizaje gratuito se da

como un impulso de universidades que han desarrollado un sin fin de cursos para sus estudiantes y estos mismos son propuestos en las plataformas MOOC's.

INTRODUCCIÓN

Los MOOC's [1] (Massive Open Online Courses) ponen su énfasis en la creación de conocimiento por parte de los estudiantes, en la creatividad, la autonomía, y el aprendizaje social y colaborativo. Hoy día, no tan solo alumnos, sino que también profesores han desarrollado cursos que se ofertan en línea. Existen plataformas donde se ofertan cursos totalmente gratis y a esa oferta gratuita entra los MOOC's. Plataforma como Miriadax, OpenClassrooms, EdX, etc. Ofrecen cursos totalmente gratis.

Los MOOC: Son Cursos en línea dirigidos a un amplio número de participantes a través de internet según el principio de educación abierta y masiva. Aunque sus características no están completamente definidas, algunas de ellas son:

Acceso de miles de estudiantes o usuarios de todo el mundo interesados en un tema específico.

Acceso libre y abierto.

Acceso gratuito.

Interacción entre alumnos

Su estructura promueve el aprendizaje autónomo de los estudiantes

Contenidos desarrollados por los docentes

Una de las clasificaciones más amplias de categorías de MOOC es la formulada por Clark [4], que identifica siete tipos:

- transferMOOCs (consisten en tomar los cursos existentes en las Universidades de *e-learning* y transferirlos a una plataforma MOOC).
- madeMOOCs (a diferencia de los anteriores incorporan elementos de vídeo, hacen hincapié en la calidad de la creación de tareas que deben realizar los estudiantes, potencian el trabajo entre iguales y la coevaluación).

- synchMOOCs (los cursos presentan fechas específicas de comienzo y de finalización, así como de realización de las evaluaciones). asynchMOOCs (sin fechas límites).
- adaptiveMOOCs (utilizan algoritmos adaptativos para presentar experiencias de aprendizaje personalizadas, basadas en la evaluación dinámica y la recopilación de datos del curso).
 - groupMOOCs (elaborados para grupos específicos).
 - connectivistMOOCs (los propuestos por Siemens).
 - miniMOOCs (de cortos números de contenidos y plazos de desarrollo).

Diferencia entre los MOOC's y E-Learning

MOOC:

- Se sigue un diseño tecnológico que facilita la diseminación de la actividad de los participantes mediante el uso de una o varias plataformas.
- Acceso gratuito
- Participación masiva
- Apoyo de la comunidad y del equipo docente
- Diversidad de herramientas de comunicación, que incluyen el uso de las redes sociales.
- Énfasis en el procedimiento de aprendizaje más que en la evaluación y la acreditación.
- Según la plataforma, se abren sesiones periódicamente (con una frecuencia de pocas semanas)

E-LEARNING:

- Se desarrolla en una plataforma de e-learning (LMS) con unas funcionalidades y una estructura muy acotadas y diseñadas para la interacción directa con el profesor.
- Entorno cerrado
- Acceso por pago previo de matrícula
- Grupo limitado
- Apoyo mayoritario del profesor
- Comunicación mediante foros de debate.
- Orientado a la evaluación y la acreditación.
- Se ofrecen en momentos muy puntuales del curso académico

Estas comparaciones entre estos dos tipos cursos que se ofrecen, están bien marcadas con respecto a los tiempos, es importante notar que no tan solo existe estas plataformas o modelos de curso, sino que hay otros tipos pero son las que tienen características bien marcadas.

Fortalezas de los MOOC's

La necesidad de adaptación de las metodologías docentes a las características de una sociedad en red.

La redefinición de los roles.

El uso de estrategias de evaluación que otorgan al estudiante un papel activo.

La flexibilidad y adaptabilidad de la oferta académica.

La cooperación entre los distintos actores (docentes y participantes).

El acceso libre a una amplia oferta formativa de carácter internacional.

El desarrollo de herramientas tecnológicas para apoyar el proceso de enseñanza-aprendizaje.

Estas fortalezas como parte medular del aprendizajes dentro de las plataformas, permiten a cada participante de los cursos aprender al ritmo de cada estudiantes en cuanto a su aprendizaje, pues existen varios estilos de aprendizajes dentro de cada grupo de estudiantes y con los MOOC's ayudan reducir estas brechas del aprendizaje significativo.

Planificar y Diseñar un MOOC

Cada plataforma MOOC's tiene ciertas características, es decir no todos los MOOC's poseen las mismas debido a que no hay un estándar para llevar a cabo cursos en dichas plataformas, sino que cada una de ellas desarrolla sus propias características. En la educación es importante contar con alguna plataforma que nos ayude al aprendizaje de los alumnos [2]

A continuación damos unas características de manera general para poder planificar y diseñar un MOOC:

- Definir objetivos y destinatarios (¿Quién?, ¿Qué? ¿Cómo? ¿Cuánto?)
- Definir y diseñar contenidos: Vídeo o vídeos, Ejercicios, Fichero PDF con las diapositivas del curso. Materiales complementarios (artículos, otros vídeos,...).
- Ejercicio final de evaluación.

Si un curso cuenta con varios módulos es necesario tener una estructura tal como se menciona a continuación:

- Estructura de cada módulo
 - Introducción
 - Conclusión.
 - Desarrollo.

Planificar.

Es importante llevar a cabo una buena planificación para cada curso ya que de eso dependerá en gran medida el éxito del aprendizaje de cada participante. Cabe mencionar algunos han propuesto desarrollos para reutilizar los cursos que durante mucho tiempo se han dado por lo cual lean un matiz diferente [3].

Es importante mencionar que para llevar a cabo un curso se debe plasmar lo siguiente:

- Duración del curso: determinar inicio y duración del mismo.
- Temario.
- Planificar el desarrollo en base a vídeos, ejercicios de evaluación semanales y examen final (si aplica)
- Política de evaluación.

Herramientas de evaluación. Se debe contar con herramientas automatizadas para la aplicación de la evaluación así tener varios instrumentos que nos ayuden a evaluar el aprendizaje de cada alumno.

Presentación del curso o carátula del curso nos ayuda a crear el interés en los cibernautas.

A continuación mencionamos algunas características tomadas de los cursos de COURSERA⁴, son las siguientes:

- Nombre del curso.
- Listado de los profesores: nombre completo y dirección de correo electrónico con la que están (o estarán) dados de alta a Coursera.
- Lengua/s de impartición del curso.
- Categoría temática del curso, puede ser más de una.
- Logo o imagen del curso. Imagen que cumpla los requisitos de derechos de autor.
- Vídeo introductorio/promocional del curso.
- Tiempo estimado de duración del curso, en semanas.
- Destinatarios: a quién va dirigido el curso.
- Descripción breve del contenido del curso.

⁴ <https://es.coursera.org/>

- Objetivos del curso.
- Breve currículum de los profesores, incluyendo fotografías.
- Informaciones adicionales de los profesores que se pueden incluir; perfil profesor en facebook, twitter y LinkedIn, página web del profesor.
- Programa por semanas del curso.
- Formato del curso.
- Conocimientos previos requeridos.
 - Lecturas recomendadas.
 - Faqs.

Producción y edición de vídeos

Materiales como PC, soft, tableta, micrófono y webcam, si es necesario.

Grabación de vídeos y uso de la plataforma,

- Realizar la edición de los vídeos,
- Resolver dudas y problemas y,
- Gestionar las incidencias técnicas.

Un MOOC admite tipologías de vídeos muy diferentes. Algunos ejemplos son:

- imagen del profesor + presentación en PowerPoint en segundo plano. El profesor apoya sus explicaciones con una presentación en PowerPoint. La imagen del profesor se proyecta en una ventana pequeña sobre el fondo de las diapositivas del PowerPoint.

- imagen del profesor + tableta gráfica. El profesor explica los contenidos de manera dinámica (dibujando, escribiendo, haciendo esquemas) con la ayuda de una tableta gráfica.

- presentación a cámara. El profesor explica directamente a cámara sin apoyo de elementos externos.

- conceptos destacados. El profesor explica directamente a cámara y aparecen remarcados conceptos clave.

- demostración del temario o programario. El profesor explica mientras se va mostrando una grabación de la pantalla del ordenador.
- reportaje. Visión sobre uno o diversos temas, presentados por el profesor o por un invitado.

Elementos a tener en cuenta:

Se recomienda que los vídeos tengan una duración de entre 5 y 10 minutos.

Poner la duración de los vídeos.

Cronograma: es importante marcar los tiempos de cada curso.

Herramientas de Comunicación: Foros, Hangouts on Air' (YouTube Live), Redes sociales

Funciones y perfiles de un curso MOO

Derechos de autor

Recomendaciones generales:

- Cita siempre la fuente y el nombre del autor de los pequeños fragmentos o imágenes que se emplean.
- La proporción de uso de una obra citada tiene que ser mínima respecto a vuestra obra.
- Evita usar imágenes/fotos que no provengan de la fuente oficial.

CONCLUSIÓN

Como parte de la digitalización del conocimiento o de la era del conocimiento existe un gran acercamiento de la información gracias al internet, donde existe un infinidad de cursos de diversa indole, algunos se ofertan con poco contenido u otros con demasiado contenido, por eso es importante diseñar cursos que lleven al aprendizaje de cada participante o alumno inscrito estas

plataformas MOOC's, ya que de eso dependerá el éxito o fracaso de la plataforma. Por eso en documento hemos mencionados la manera de como estructurar un portal o sitio para el diseño de los MOOC's. En el caso de la División Académica de Ciencias Básicas, se ofertan diversos curso de diversa áreas de cada licenciatura y que muchas veces este material queda aislado o solo queda en papeles pero que no se le ha dado una difusión a estos curso para que otros puedan aprender este conocimiento.

REFERENCIAS

- [1] cNkuyubwatsi, B. (2013). Evaluation of massive open online courses (MOOCs) from the learner's perspective. Paper presented at the 12th European Conference on eLearning ECEL 2013, Sophie Antipolis, France.
- [2] Hodgkinson-Williams, C. (2014). *Degrees of ease: Adoption of OER, open textbooks and MOOCs in the global South*. Symposium conducted at 2nd Regional Symposium on Open Educational Resources: Beyond Advocacy, Research and Policy, OER Asia 2014, Penang, Malaysia.
- [3] Piedra, N., Chicaiza, J., López, J., & Tovar, E. [2013]. An architecture based on linked data technologies for the integration and reuse of OER in MOOCs context. *Open Praxis*, 6(2), 171–187.
- [4] Poy, Raquel; Gonzales-Aguilar, Audilio. «Factores de éxito de los MOOC: algunas consideraciones críticas». *RISTI - Revista Ibérica de Sistemas e Tecnologias de Informação (SPE1)*: 105-118. [ISSN 1646-9895. doi:10.4304/risti.e1.105-118](https://doi.org/10.4304/risti.e1.105-118). Consultado el 22 de junio de 2016.

ESTUDIO BIODIRIGIDO PARA EL AISLAMIENTO Y CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL DE CHALCONAS PRESENTES EN *Haematoxylum campechianum*

M.C. Armando Escobar Ramos¹

Dr. Carlos Ernesto Lobato García²

Dr. Manasés González Cortazar³

Dra. Nancy Romero Ceronio⁴

Dr. Luis Fernando Roa de la Fuente⁵

RESUMEN

Se realizó un estudio biodirigido del extracto metanólico del duramen de *Haematoxylum campechianum*, aislándose las chalconas: sappanchalcona (**1**) y 3-deoxisappanchalcona (**2**). Se empleó el modelo *in vitro* de íleon aislado de cobayo para determinar la actividad espasmolítica tanto del extracto, como de fracciones cromatográficas y los compuestos aislados. Se encontró un buen porcentaje de inhibición en el extracto metanólico (84.7±4 %) a una dosis de 400 mg mL⁻¹ y en los dos compuestos puros a una dosis de 100 mg mL⁻¹ (47.76±9.8 y 49.60±9.19 % respectivamente). Las estructuras de las dos chalconas fueron confirmadas por estudios de Resonancia Magnética Nuclear (RMN) de ¹H y ¹³C, empleando experimentos unidimensionales y de correlación bidimensional homo y heteronuclear.

INTRODUCCIÓN

Haematoxylum campechianum es un árbol nativo de la región sureste de México y Centroamérica. En nuestro país es conocido como “palo tinto” o “palo de

Campeche” en virtud de que fue en este estado de la República Mexicana en donde primero se encontró (Durán & Méndez, 2010). El nombre científico de esta planta significa “madera que sangra” y hace referencia a la presencia de pigmentos de color rojo intenso y que se liberan del duramen del tronco de la planta al macerarlo en agua (Masuda *et al*, 1991). Dentro de la medicina tradicional, el palo tinto se ha empleado para el tratamiento de la depresión, problemas renales y cardíacos, así como para aliviar el dolor de muelas, la fiebre, la diarrea y las hemorroides (Maldonado, 2005; Martínez, 2005).

Los estudios fitoquímicos y de actividad biológica realizados en esta planta han llevado al aislamiento de diversos compuestos, de los cuales el más representativo es la hematoxilina y sus derivados como la hemateína, la brasilina, el hematoxilol A y el epihematoxilol B. (Norton, 1996; Namikoshi *et al*, 1987), para este grupo de compuestos se ha reportado actividad inhibitoria de la enzima tirosina quinasa (Lin *et al*, 2008; Liu *et al*, 2014). Así mismo, se han aislado del duramen de *H. campechianum*: la sappanchalcona (**1**) y la 3-deoxisappanchalcona (**2**) cuyas estructuras se muestran en la figura 1 (Masuda *et al*, 1991; Masahiro *et al*, 1986); la sappanchalcona mostró actividad antiinflamatoria en un modelo de artritis reumatoide en ratones (Jung *et al*, 2015).

En este trabajo se presenta el reporte del estudio biodirigido para el aislamiento de la sappanchalcona y la 3-deoxisappanchalcona, evaluando la actividad espasmolítica del extracto metanólico, las fracciones cromatográficas y los compuestos puros aislados del duramen de *H. campechianum*, además de realizar la caracterización estructural por Resonancia Magnética Nuclear de ^1H y ^{13}C (Escobar, *et al*, 2017).

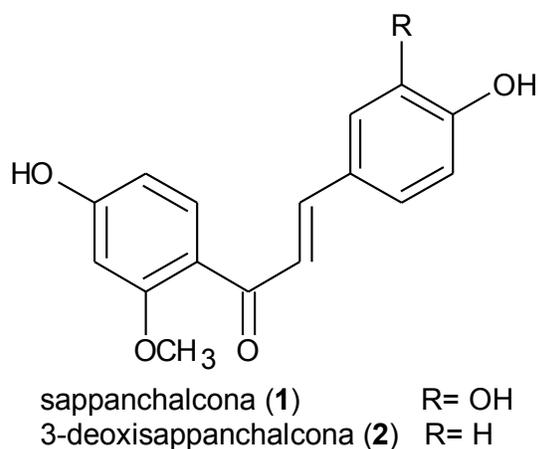


Figura 1. Estructuras de la sappanchalcona (1) y 3-deoxisappanchalcona (2)

OBJETIVOS Y METAS

Realizar un estudio biodirigido para aislar compuestos con actividad espasmolítica a partir del duramen de *H. campechianum*, empleando como modelo *in vitro* el sistema de íleon aislado de cobayo.

Efectuar la caracterización estructural de los compuestos aislados mediante experimentos de Resonancia Magnética Nuclear unidimensionales y de correlación homo y heteronuclear de ^1H y ^{13}C .

MATERIALES Y MÉTODOS

4.1 Obtención y procesamiento del material vegetal

Se recolectó el duramen de *H. campechianum*, en el municipio de Cunbucán, Tabasco, en el mes de febrero de 2016. Un espécimen de la planta fue depositado en el Herbario de la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco (número de identificación: 35455). El material vegetal se secó y pulverizó con molino eléctrico, posteriormente se maceró por 24 horas con metanol (Merck). Repitiéndose el proceso de extracción dos veces más. El extracto obtenido fue concentrado mediante destilación al vacío empleando un rotoevaporador (Heidolph G3), el residuo obtenido fue utilizado en las pruebas de actividad biológica y en la separación cromatográfica.

4.2 Separación del extracto metanólico y purificación de los compuestos (1) y (2)

En todas las separaciones cromatográficas, los disolventes empleados fueron grado HPLC (Merck). En la obtención final de los compuestos puros, la determinación del punto de fusión se realizó por el método de tubo capilar y los puntos de fusión no están corregidos.

El extracto metanólico del duramen de *H. campechianum* se separó por cromatografía en columna, empleando como fase estacionaria sílice (70/230, Merck) y como fase móvil un gradiente de diclorometano:metanol. En las fracciones obtenidas se determinó la presencia de flavonoides por revelado selectivo en cromatografía en capa fina (Merck).

Las fracciones positivas a flavonoides fueron sometidas a un proceso de separación cromatográfica, empleando en primer término una fase estacionaria de sílice y un sistema de elución de diclorometano:metanol, las sub-fracciones recolectadas que dieron positivo el revelado para flavonoides, fueron purificadas mediante cromatografía en fase reversa, empleando como fase estacionaria RP-18 (40/63, Merck) y un gradiente de agua:acetonitrilo como fase móvil para lograr el aislamiento de las chalconas (1) y (2).

4.3 Pruebas de actividad espasmolítica

Para las pruebas de actividad espasmolítica se empleó el modelo *in vitro* de íleon aislado de cobayo estimulado eléctricamente (Lozoya *et al*, 1990). El manejo de los animales se realizó de acuerdo con los criterios éticos de la Asociación Veterinaria Americana y las especificaciones técnicas para la producción, cuidado y uso de los animales de laboratorio establecidas en la Norma Oficial Mexicana NOM-062-ZOO-1999. Cobayos con un peso entre 250 y 500 g fueron sacrificados y el íleon removido de la cavidad abdominal se

mantuvo en cajas Petri con solución Tyrode y aireación constante de una mezcla de CO₂ (95%) y O₂ (5%). Porciones de 1.5 cm de intestino se colocaron en la cámara de registro que contenía 25 mL de solución Tyrode a 37 °C con aireación constante. Un extremo del intestino se fijó al fondo de la cámara y el otro extremo se unió a un transductor conectado a un sistema de adquisición de datos (PanLab, BIOPAC Systems, USA). Después de 30 minutos de adaptación, se procedió a estimular eléctricamente el tejido (25 V, 5mS, 1 Hz, 5 S, cada 2 minutos) con un estimulador de Grass y mediante electrodos de tungsteno colocados al extremo del tejido. Las contracciones así inducidas se registraron y se mantuvieron hasta obtener una respuesta homogénea. Sobre el sistema ya estabilizado se aplicaron dosis de las muestras a probar (extracto metanólico, fracciones cromatográficas y compuestos puros), las cuales fueron diluidas previamente en solución Tyrode a la concentración deseada. Se midió la inhibición en la fuerza de la contracción por efecto de la adición de la muestra, expresándola como porcentaje de inhibición. Se empleó un blanco de disolvente como control negativo. Las pruebas de actividad espasmolítica se realizaron por triplicado a efecto de calcular el promedio y la desviación estándar.

4.3 Caracterización estructural de los compuestos (1) y (2)

Las chalconas (1) y (2) aisladas del extracto metanólico de *H. campechianum* fueron caracterizadas por Resonancia Magnética Nuclear, empleando un equipo Bruker Advance III HD-600, a una frecuencia de 600 MHz para los experimentos de ¹H, NOESY, ¹H-¹H COSY, HSQC y HMBC; y a una frecuencia de 150 MHz para los experimentos de ¹³C y DEPT. Como disolvente se empleó metanol intercambiado con deuterio (CD₃OD) y los desplazamientos químicos se reportaron en ppm, tomando al tetrametilsilano (TMS) como referencia.

RESULTADOS

El procesamiento de 7.5 kg de duramen de *H. campechianum* con 42 L de metanol (divididos en tres porciones de 14 L cada una), permitió la obtención de 300 g de extracto que se presentó como una resina viscosa de color verde oscuro.

Para la separación cromatográfica, se emplearon 200 g del extracto metanólico, obteniéndose nueve fracciones al ir aumentando el gradiente de polaridad en el eluyente por la adición secuencial de metanol. Se tomaron alícuotas de cada fracción y mediante cromatografía en capa fina se reveló la presencia de flavonoides por exposición a cloruro de aluminio e irradiación con luz UV. En la tabla 1 se resume la cantidad obtenida para cada fracción, el gradiente de elución empleado y se indica cuáles fueron las fracciones que dieron positiva a la identificación de flavonoides.

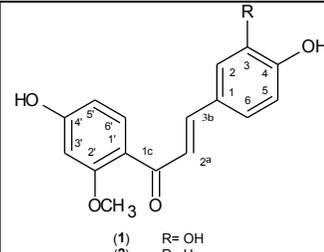
Tabla 1. Fracciones obtenidas por separación cromatográfica del extracto metanólico de *H. campechianum*

Fracción	Gradiente de elución (diclorometano:metanol)	Cantidad de fracción recolectada	Identificación de flavonoides
F1	100:0	1.5 g	Negativo
F2	90:10	3.8 g	Negativo
F3	80:20	5.2 g	Negativo
F4	70:30	3.5 g	Negativo
F5	60:40	6.0 g	Negativo
F6	50:50	13.57 g	Positivo
F7	40:60	5.0 g	Positivo
F8	30:70	17.67 g	Positivo
F9	0:100	12.0 g	Negativo

Las fracciones F6-F8 fueron sometidas a un proceso de purificación en cromatografía en columna, inicialmente en fase normal y posteriormente en fase reversa. Con ello se aislaron dos compuestos puros: se obtuvieron 48.3 mg del compuesto (**1**) como un polvo de color naranja con punto de fusión de 166.5

°C. Además, se purificaron 50.6 mg del compuesto (**2**) como un polvo de color naranja con un punto de fusión de 242 °C. La asignación de las señales de los espectros de RMN de ^1H y ^{13}C para los compuestos (**1**) y (**2**) se resume en la tabla 2.

Tabla 2. Asignación de las señales de los espectros de ^1H (300 MHz) y ^{13}C (150 MHz) para los compuestos (**1**) y (**2**). (Temperatura ambiente, disolvente CD_3OD)



Posició n	Compuesto (1)		Compuesto (2)	
	^{13}C d(ppm)	^1H , d(ppm), m, J(Hz)	^{13}C d(ppm)	^1H , d(ppm), m, J(Hz)
2α	124.8	7.37, d, 15.7	125.2	7.40, d, 15.7
3β	144.2	7.49, d, 15.7	144.2	7.55, d, 16.5
1c	192.5		193.2	
1'	121.8		121.8	
2'	162.5		162.6	
3'	99.8	6.52, d, 2.2	100.3	6.51, d, 2.2
4'	164.4		164.6	
5'	108.7	6.46, dd, 2.2, 8.4	109.0	6.45, dd, 2.2, 8.4
6'	133.4	7.57, d, 8.4	134.1	7.57, d, 8.4
1	128.7		128.2	
2	114.9	7.11, d, 2.2	131.5	7.49, dd, 1.8, 8.4
3	146.8		117.0	6.81, dd, 1.8, 8.4
4	149.6		161.3	
5	116.2	6.79, d, 8.0	117.0	6.81, dd, 1.8, 8.4
6	123.0	6.99, dd, 2.2, 8.0	131.5	7.49, dd, 1.8, 8.4
OCH_3	55.87	3.9, s	56.28	3.88, s

Se determinó la actividad espasmolítica sobre el íleon de cobayo *in vitro* tanto del extracto metanólico, como de las fracciones F6-F8 y de los compuestos **(1)** y **(2)**. Para el caso del extracto metanólico y de las fracciones cromatográficas, se probaron las siguientes dosis: 100, 200 y 400 mg mL⁻¹; para los compuestos aislados, las dosis empleadas fueron: 25, 50, 100 y 200 mg mL⁻¹. Las figuras 2, 3 y 4 presentan el comportamiento espasmolítico mostrado en las pruebas mientras que la tabla 3 resume los porcentajes máximos de inhibición encontrados. Es relevante hacer notar que no se encontraron reportes previos para esta actividad biológica de *H. campechianum*.

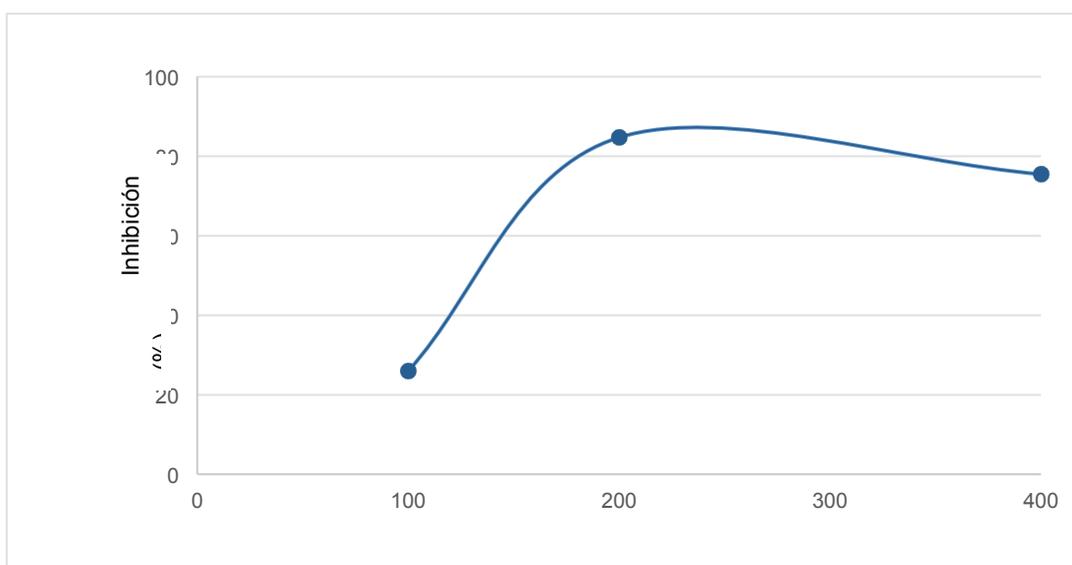


Figura 2. Actividad espasmolítica del extracto metanólico de *H. campechianum*

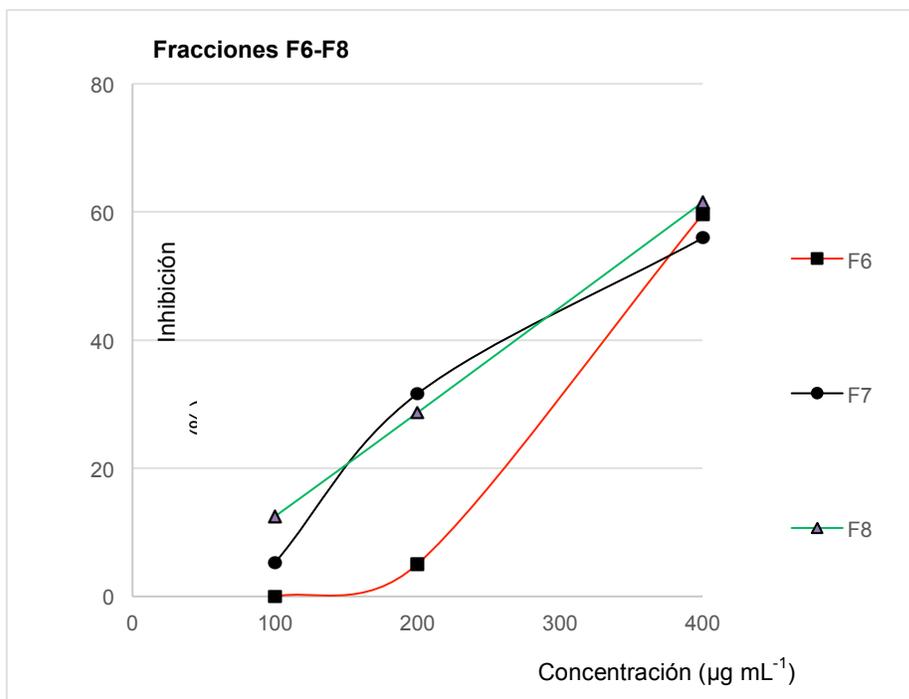


Figura 3. Actividad espasmolítica de las fracciones cromatográficas F6-F8 del extracto metanólico de *H. campechianum*

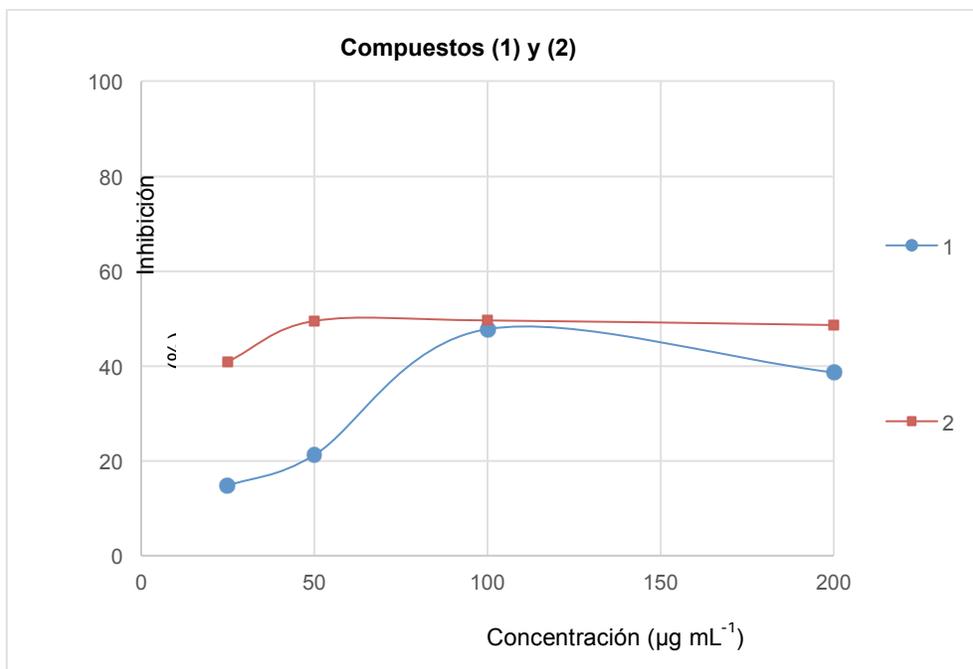


Figura 4. Actividad espasmolítica de los compuestos (1) y (2) aislados del extracto metanólico de *H. campechianum*

Tabla 2. Porcentaje máximo de efecto espasmolítico del extracto metanólico de *H. campechianum*, fracciones cromatográficas y los compuestos aislados (1) y (2)

Prueba	Dosis (mg mL ⁻¹)	% de Inhibición (promedio ± desviación estándar)
Extracto metanólico	200	84.7 ± 4.0
F6	400	59.6 ± 10.3
F7	400	55.9 ± 3.7
F8	400	61.51 ± 3.7
Compuesto (1)	100	47.76 ± 9.8
Compuesto (2)	100	49.60 ± 9.19

DISCUSIÓN

La prueba de actividad espasmolítica en íleon aislado *in vitro*, dirigió la búsqueda de compuestos bioactivos a partir del extracto metanólico del duramen de *H. campechianum*. Dado que este extracto mostró una buena actividad inhibitoria en las contracciones del íleon de cobayo, se prosiguió el proceso de separación cromatográfica, en donde las fracciones aisladas en donde se detectó la presencia de flavonoides continuaron mostrando esta actividad biológica, dirigiendo la búsqueda de compuestos activos puros que dio como resultado el aislamiento de las chalconas (1) y (2).

En el análisis del espectro de RMN de ¹H del compuesto (1) se encontraron tres sistemas de señales: uno correspondiente a un sistema de carbonilo a,b insaturado con señales en 7.37 ppm (d, 15.7 Hz, H-2a) y 7.49 ppm (d, 15.7 Hz, H-3b), un sistema aromático ABX con señales en 7.11 ppm (d, 2.2 Hz, H-2), 6.79 ppm (d, 8 Hz, H-5) and 6.99 ppm (dd, 2.2,8 Hz, H-6) y otro sistema aromático ABX con señales en 6.52 ppm (d, 2.2 Hz, H-3'), 6.46 ppm (dd, 2.2, 8.4 Hz, H-5') y 7.57 ppm (d, 8.4 Hz, H-6'). Además se encontró la presencia de un singulete asignado para un metoxilo en 3.9 ppm (s, OCH₃). La posición de este grupo éter se asignó sin ambigüedad debido a la correlación HMBC entre los hidrógenos del metoxilo y el carbono de la posición 2' (figura 5).

Para el caso del compuesto (2), se encontraron similitudes en las señales al compararlas con el primer compuesto, excepto para uno de los sistemas ABX, que en (2) se presentó como un sistema AB en 7.49 ppm (dd, 1.8, 8.4 Hz, H-2, H-6) y 6.81 ppm (dd, 1.8, 8.4 Hz, H-3, H-5).

Por otro lado, la asignación de señales carbono-hidrógeno de ambos compuestos se realizó con el experimento HSQC, mientras que las correlaciones a dos y tres enlaces proporcionadas por el experimento HMBC, permitieron la asignación exacta de las posiciones de los sustituyentes en los anillos aromáticos como se muestra en la figura 5.

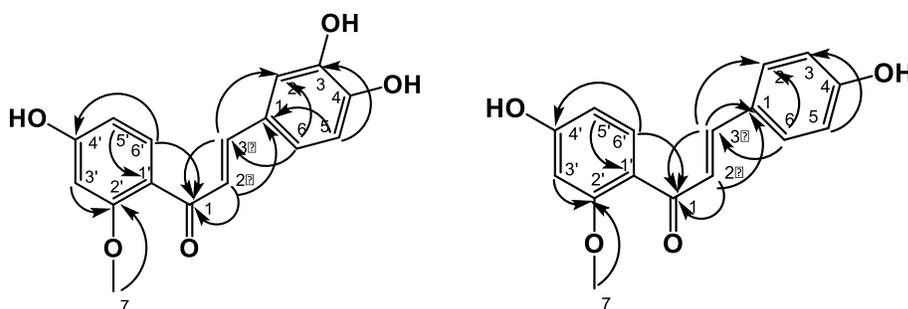


Figura 5. Correlaciones encontradas en los espectros HMBC de los compuestos (1) y (2)

Cabe señalar que la comparación directa de los datos espectroscópicos con los reportados previamente en la literatura (Namikoshi *et al*, 1987), indicaron que los compuestos (1) y (2) correspondían respectivamente a la 2'-metoxi-3,4,4'-trihidroxichalcona (sappachalcona) y a la 2'-metoxi-4,4'-dihidroxichalcona también conocida como 3-deoxisappanchalcona.

CONCLUSIONES

Se realizó un estudio biodirigido buscando compuestos con actividad espasmolítica en el duramen de *Haematoxylum campechianum*. La combinación

de pruebas de actividad biológica con procedimientos analíticos de separación y caracterización estructural permitió el aislamiento e identificación de dos chalconas: sappachalcona y 3-deoxisappachalcona las cuales mostraron actividad inhibitoria en la contracción del íleon de cobayo en condiciones *in vitro*.

REFERENCIAS

- Durán, R., Méndez, M., 2010. *Biodiversidad y Desarrollo Humano en Yucatán*. México: CICY-CONABIO. 372 pp.
- Escobar-Ramos A., Lobato-García C.E., Zamilpa A., Gómez-Rivera A., Tortoriello J. González-Cortazar M., 2017, Homoisoflavonoids and Chalcones Isolated from *Haematoxylum campechianum* L., with Spasmolytic Activity, *Molecules*, 2017, 22(9), 1405-1414.
- Jung, E.G.; Han, K.I.; Kwon, H.J.; Patnaik, B.B.; Kim, W.J.; Hur, G.M.; Namm, K.W.; Han, M.D., 2015, Anti-inflammatory activity of sappanchalcone isolated from *Caesalpinia sappan* L. in a collagen-induced arthritis mouse model. *Arch. Pharm. Res.*, 38, 973–983.
- Lin, L.G.; Xie, H.; Li, H.L.; Tong, L.J.; Tang, C.P.; Ke, C.Q.; Liu, Q.F.; Lin, L.P.; Geng, M.Y.; Jiang, H.; 2008, Naturally occurring homoisoflavonoids function as potent protein tyrosine kinase inhibitors by c-Src-based high-throughput screening. *J. Med. Chem.*, 51, 4419–4429.
- Liu, L.G.; Liu, Q.Y.; Ye, Y., 2014, Naturally occurring homoisoflavonoids and their pharmacological activities. *Planta Med.*, 80, 1053–1066.
- Lozoya, X.; Becerril, G.; Martínez, M., 1990, Modelo de perfusión intraluminal del íleon del cobayo *in vitro* en el estudio de propiedades antidiarréicas de la guayaba (*Psidium guajava*). *Arch. Investig. Méd.*, 21, 155–162.
- Maldonado, F., 2005. *Flora Medicinal del Estado de Tabasco: Uso, Manejo y Conservación*. Villahermosa: UJAT, 97 pp.
- Martínez, M., 2005. *Las Plantas Medicinales de México Tomo 1*. Séptima Edición. México: Editorial Botas. 386 pp.

Masahiro, N., Seiji, N., Shu-Mei, L., Ikuyo, E., Ken-Ichi, K., 1986. Protosappanin A, a Novel Biphenyl Compound from Sappan Lignum. *Chem. Pharm. Bull.*, 34(1), 1-6.

Masuda, H., Ohtani, K., Mizutani, K., Ogawa, S., Kasai, R., Tanaka, O., 1991. Chemical Study on Haematoxylum campechianum: a sweet Principle and New Dibenz[b, d]oxocin Derivates. *Chem. Pharm. Bull.* 39(6), 1382-1384.

Namikoshi, M., Nakata, H., Nuno, M., Ozawa, T., Saitoh, T., 1987. Homoisoflavonoid and Related Compounds. Ill. Phenolic Constituents of Caesalpinia Japonica SIEB. *Chem. Pharm. Bull.*, 35(9), 3568-3575.

Norton, S., 1996. The useful plants of dermatology. II. Haematoxylum and hematoxylin. *Journal of the American Academy of Dermatology*, 149-151.

Las baterías de ion sodio

Carlos R. Beltrán Moha^{1*}

RESUMEN

La tecnología de almacenamiento de energía ha recibido una significativa atención por parte de los fabricantes y desarrolladores de dispositivos electrónicos portátiles, vehículos eléctricos, en las centrales eléctricas para la generación de electricidad y su almacenamiento y también para la nivelación de la carga de fuentes de energía alternas como la energía solar y la energía eólica. Las baterías de iones de litio han dominado la mayoría de las dos primeras aplicaciones. Sin embargo, en los dos últimos casos, y moviéndonos más allá de las baterías de litio al elemento que se encuentra debajo, el sodio, se presenta ante nosotros una alternativa que ofrece sostenibilidad y rentabilidad. Esto requiere una evaluación de la ciencia que sustenta a estas baterías, incluyendo el descubrimiento de nuevos materiales, su electroquímica, y una mayor comprensión de la movilidad iónica basada en métodos computacionales. Este escrito considera algunos de los aspectos científicos actuales que sustentan a las baterías de iones de sodio.

INTRODUCCIÓN

El almacenamiento de energía se ha convertido en una preocupación desde décadas pasadas como resultado del aumento de la demanda de energía, combinada con incrementos en el precio de los combustibles fósiles y las consecuencias ambientales de su uso. Esto ha traído consigo un aumento de la demanda de fuentes de energía alternas amigables con el ambiente, tanto para la generación como para su almacenamiento. Las tecnologías que son adecuadas para el almacenamiento de energía a gran escala, como los sistemas hidroeléctricos dominan actualmente, siendo el aire comprimido el segundo sistema más utilizado. Sin embargo, las tecnologías de almacenamiento de energía electroquímica (EES), como las baterías, están empezando a mostrarse como una promesa considerable, resultado de muchos avances en los últimos años.

Sus características más atractivas incluyen alta eficiencia de energía y características energéticas para satisfacer diferentes funciones, larga vida útil del ciclo y bajo mantenimiento. Las baterías, en particular, representan una tecnología de almacenamiento la integración de energías renovables que proporcionen servicios intermitentes a la energía que suministra las estaciones eléctricas. Estas incluyen la energía solar de la energía fotovoltaica y la energía eólica. El tamaño compacto de los sistemas de baterías los hace adecuados para almacenar y redistribuir energía eléctrica que se produce a gran escala mediante paneles solares, para cargar un vehículo eléctrico / híbrido eléctrico (EV/HEV), suministrar energía para uso residencial, o permitir la electrificación de comunidades rurales apartadas.

El almacenamiento de energía para las redes eléctricas se ha centrado en el ion de litio (ion Li), el flujo redox y las baterías a alta temperatura hasta ahora. De estos, el ion Li es sin duda el gran contendiente.

Sin embargo, la demanda por baterías de ion Li como fuente de energía principal en dispositivos electrónicos portátiles y vehículos eléctricos, está aumentando rápidamente. Las celdas de ion Li son hoy, la principal fuente de energía para vehículos eléctricos y para los híbridos también, y continuarán siendo el principal sistema de almacenamiento de energía para las próximas generaciones [1].

Ante la creciente demanda de los recursos mundiales de litio disponibles, existe una gran preocupación en estos mercados, por el posible aumento de los costos y de su disponibilidad. Las reservas mundiales de litio, más fácilmente accesibles, se encuentran en zonas remotas o en zonas políticamente conflictivas [2,3]. La utilización creciente de litio en aplicaciones de almacenamiento de energía con un "precio más alto", en última instancia elevará el precio de los compuestos de litio, incluso contando con programas extensos de reciclado de baterías, con lo que las tecnologías de almacenamiento de energía electroquímica (EES) basadas en este elemento se hará menos accesible en un futuro no muy lejano. Las limitaciones en la disponibilidad de los metales de transición para materiales catódicos son también motivo de preocupación, por lo que los actuales y futuros desarrollos se están moviendo hacia el uso de elementos más sostenibles como el hierro (Fe) y el manganeso (Mn).

LAS BATERÍAS DE SODIO

Dada la alta abundancia y el bajo costo del sodio, así como un valor de potencial redox muy adecuado ($E^\circ (\text{Na}^+/\text{Na}) = -2.71 \text{ V}$ frente al electrodo estándar de hidrógeno) a sólo 0.3 V por encima del potencial del litio, las pilas basadas en el sodio prometen mucho como alternativa frente a las de litio, en aplicaciones EES.

El desarrollo de las baterías de sodio corrió paralelo al de las baterías de litio en la década de los 80 del siglo pasado. La más alta densidad energética de las baterías de litio, debida a su mayor potencial y menor masa, las convirtieron en

las preferidas, tanto para los investigadores como para su uso y desarrollo comercial lo que contribuyó al crecimiento exponencial del mercado de los dispositivos electrónicos portátiles a partir de los años 90 del siglo XX.

Sin embargo, para aplicaciones donde la portabilidad no es necesaria y la densidad gravimétrica de energía no es un parámetro para considerar (como en las redes eléctricas de almacenamiento), las baterías de sodio y de ion sodio son una tecnología igualmente viable. Reportes recientes indican que las baterías de sodio compiten por igual con las de litio, en términos de densidad energética.

Aún quedan algunas barreras que las baterías de sodio deben de superar, antes de que puedan ser consideradas como una alternativa comercial real. Entre estas barreras se incluyen ciclos de vida insuficientes y la necesidad del desarrollo de nuevos materiales para el electrodo positivo, y especialmente, para el negativo con el fin de mejorar sus desempeños.

La investigación sobre las baterías de ion sodio se ha incrementado dramáticamente en los últimos años y está ahora en pleno apogeo para lograr que, en los próximos años, la tecnología de las baterías de sodio pueda ya ser una alternativa real para la producción y almacenamiento de energía eléctrica.

PRINCIPIO DE OPERACIÓN

El principio de operación de una celda de ion sodio, es básicamente el mismo que el de las celdas de ion litio: los iones de sodio son transportados entre el electrodo positivo (cátodo) y el negativo (ánodo) a través de un electrolito con iones de sodio, durante los procesos de descarga y recarga [4]. Una celda típica de ion sodio puede ser, por ejemplo, un sistema no acuoso de perclorato de sodio (NaClO_4) en propilen carbonato, un solvente polar.

Durante el proceso de recarga, los iones de sodio son extraídos del electrodo positivo, el cátodo, que trabaja a un potencial de alrededor de 3.0 V por encima del potencial del par Na^+/Na y se insertan en la microestructura del electrodo

negativo, el ánodo, el cual trabaja a un potencial de cerca de 1.0 V por debajo del potencial del par Na^+/Na .

Durante el proceso de descarga y en términos termodinámicos, los electrones son “bombeados cuesta arriba”, desde electrodo positivo (cátodo) al electrodo negativo (ánodo) a través del circuito externo. La conversión de energía química a eléctrica ocurre durante la descarga de la batería: la energía libre del par redox es favorable y permite la que la reacción proceda “cuesta abajo” entregando energía al dispositivo que es puesto a funcionar por la batería.

COMPOSICIÓN DE LOS CÁTODOS

Los principales esfuerzos se han enfocado en el desarrollo de cátodos de materiales laminares de óxidos de sodio con metales de transición del tipo AMO_2 (soluciones sólidas de NaCoO_2 , NaMnO_2 , NaFeO_2 y NaNiO_2). Estos materiales son buscados para sus altos potenciales redox y densidades de energía. La fuerza impulsora, al menos en parte, se deriva de varias ventajas asociadas con materiales de bajo contenido de cobalto, especialmente los basados en el hierro y el manganeso que son amigables con el medio ambiente. Los óxidos metálicos sódicos existen como uno de varios poliedros que difieren en el apilamiento compacto de los planos de oxígeno. Siguiendo la notación de Delmas [5], éstos se designan como O3 (apilamiento ABCABC), P2 (apilamiento ABBA) y P3 (apilamiento ABCCA). El ion de Na adopta coordinaciones diferentes (P = prismático y O = octaédrico) dependiendo del tipo de poliedro. Los materiales a base de NaMO_2 (a diferencia de sus análogos del litio) forman fácilmente la estructura ordenada "ideal" del tipo O3 como resultado de la gran diferencia entre los tamaños de los iones de Na y los cationes de los metales de transición, lo que induce la segregación de A y M en planos alternos. En la búsqueda de materiales para electrodos con estabilidades aceptables para las baterías prácticas del ion del sodio, Meng y compañeros de trabajo [6] condujeron un estudio exhaustivo sobre el efecto de la sustitución del Li, en las propiedades estructurales y electroquímicas de un sistema binario

estructurado P2, $\text{Na}_x[\text{Li}_y\text{Ni}_z\text{Mn}_{1-y-z}]\text{O}_2$ ($0 < x,y,z < 1$) obteniendo resultados alentadores.

A pesar de las ventajas que ofrecen los óxidos de sodio y metales de transición para las baterías de almacenamiento de energía electroquímica, su sensibilidad al aire es un desafío. Este es un aspecto importante en términos de la reproducibilidad de los resultados de la investigación sobre estos materiales, además de las preocupaciones sobre el almacenamiento y manejo desde el punto de las aplicaciones a gran escala.

MATERIALES PARA LOS ÁNODOS

Los ánodos de sodio metálico se usan comúnmente a escala de laboratorio para evaluar el funcionamiento de los materiales catódicos. Sin embargo, la formación de dendritas y los problemas de seguridad en relación con el sodio metálico impiden actualmente su uso como electrodos para aplicaciones comerciales. Es así como el éxito de las baterías de ion sodio depende fuertemente del desarrollo de materiales anódicos seguros y eficientes.

Los átomos de sodio no se intercalan significativamente en el grafito, que son la base de los electrodos negativos más comunes en las baterías de iones de litio [7]. Como resultado de ello, el carbono vítreo o “*hard*” carbon (una forma alotrópica del carbono, no grafitico y desordenado) por ejemplo, preparados por la pirólisis de sacarosa, son de los materiales anódicos más estudiados para las baterías de iones sodio. El potencial electroquímico de la inserción del sodio en carbono vítreo es cercano al del propio metal, lo cual indica que hay muy poca transferencia de carga del carbón al sodio. Esto es indicativo de un mecanismo por el cual los iones de sodio llenan la porosidad generada por las capas del carbono vítreo desordenado en lugar de intercalarse entre las láminas de grafito [8]. El buen rendimiento del carbono vítreo como material para el electrodo negativo en las baterías de iones de Na, fue demostrado recientemente en celdas de combustible con O_3 , $\text{NaMn}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}\text{O}_2$ como el electrodo positivo [9].

Ánodos basados en la inserción de sodio en óxidos de metales de transición son particularmente interesantes, por los beneficios que se derivan de buenas características de seguridad y altas densidades de energía volumétrica. La inserción de sodio en $\text{NaTi}_2(\text{PO}_4)$ a 2.1 V fue informado por Park y colaboradores, mediante un mecanismo de dos fases [10]. Mucha menos investigación se ha llevado a cabo sobre materiales de aleaciones de sodio, como electrodos para las baterías de iones de sodio, que para sus contrapartes de litio. Estas aleaciones tienen altas densidades de energía y bajos potenciales redox, dos propiedades altamente deseables. Los potenciales para estas reacciones se han predicho [11] y se muestran como prometedores.

LOS ELECTROLITOS

La interfase del electrolito tanto con el electrodo positivo como con el negativo, significan sus requerimientos de estabilidad química y limita considerablemente el alcance útil del material. La compatibilidad química se garantiza mediante la formación de capas de pasivación, referidas como la interfase sólido electrolito (SEI). La formación y las propiedades físicas de estas capas protectoras dependen de la naturaleza del electrodo (especialmente el negativo), lo que implica que el estudio de los electrolitos no puede separarse del de los electrodos. Para las baterías de iones de sodio, ya que no hay un electrodo negativo ampliamente aceptado, los estudios sistemáticos sobre los electrolitos son relativamente escasos.

Además de proporcionar una interfaz estable, el electrolito debe lograr una buena conductividad iónica. Este parámetro se ve afectado principalmente por la concentración de los portadores de carga (solubilidad de la sal), por la movilidad iónica (viscosidad del medio) y de la disociación iónica de la sal (constante dieléctrica del medio).

Los electrolitos de interés para las baterías de inserción del ion Na a temperatura ambiente pueden clasificarse en 1) electrolitos no acuosos, consistentes en una sal sódica solubilizada en un solvente orgánico y 2)

líquidos iónicos (ILs) consistentes en una sal orgánica (R^+X^-) dopada con una fracción de la sal sódica equivalente (Na^+X^-). A pesar del progreso significativo en electrolitos sólidos de iones de sodio, que muestran posibles aplicaciones a temperatura ambiente [12], sus conductividades siguen siendo de 1 a 2 órdenes de magnitud más bajas a temperatura ambiente, que el más tradicional electrolito líquido de la actualidad, lo que deja mucho que hacer para posteriores desarrollos.

Todos los actuales electrolitos no acuosos para las baterías de iones de sodio se basan en disolventes tipo carbonato, tales como carbonato de etileno (EC) y carbonato de propileno (PC) debido a sus constantes altas dieléctricas, grandes ventanas electroquímicas y baja volatilidad. De las sales de sodio estudiadas, la bis(trifluorometano) sulfonimida de sodio (NaTFSI), el triflato de sodio (NaOTf), el perclorato de sodio ($NaClO_4$) y el hexafluorofosfato de sodio ($NaPF_6$), las dos últimas son las mejores. Como se espera de los disolventes de carbonatos, su estabilidad oxidativa es buena y la compatibilidad con el electrodo positivo no es una gran preocupación.

El carbono vítreo o “*hard*” carbon es el único material anódico que ha sido estudiado sistemáticamente contra diferentes electrolitos, pero los resultados son contradictorios y muestran el alto grado de sensibilidad hacia la naturaleza del electrodo y destacan la necesidad de más trabajo para caracterizar completamente estos sistemas. Un estudio sobre aditivos para $NaClO_4$ en PC ha demostrado que el carbonato de vinileno (VC), un importante aditivo en los electrolitos de litio, no pasiva eficientemente a los electrodos de carbono vítreo [13]. El mismo estudio identificó al fluoroetilén carbonato (FEC) como un aditivo formador de película muy eficiente. Lo más interesante es que el mismo aditivo se utilizó con éxito en una variedad de diferentes ánodos, mostrando así su buena versatilidad.

Para mejorar la seguridad de las baterías, se ha dedicado mucho esfuerzo en reducir la volatilidad y la inflamabilidad de los electrolitos líquidos orgánicos. En este sentido, los líquidos iónicos (ILs) pueden ayudar a solucionar el

problema de la seguridad ya que son prácticamente no flamables. Sin embargo, los ILs usualmente requieren para operar, temperaturas más altas que los electrolitos líquidos debido a su alta viscosidad, y a sus puntos de fusión que son a menudo apenas por arriba de la temperatura ambiente. El único informe del uso de un electrolito IL con un material anódico práctico, tal como el carbón duro muestra buena compatibilidad con un NaTFSI-dopado N-metil-N-propilpirrolidinio bis (fluorosulfonil) imida (NaFSI-C₁C₃pyrFSI) electrolito a 90 °C [14].

CONCLUSIÓN

Como consecuencia de las preocupaciones sobre el costo futuro del litio y la sostenibilidad de los recursos naturales, hay hoy una tendencia mundial a desarrollar baterías de bajo costo con altas densidades de energía y que pueden satisfacer una variedad de aplicaciones emergentes. Las baterías de iones de sodio han resurgido como candidatos prometedores, especialmente para almacenamiento estacionario de energía. Nuevas direcciones han evolucionado más allá de las celdas de sodio fundido basadas en Na-S y Na-NiCl₂ que se desarrollaron en la última década; éstas incluyen las celdas acuosas de sodio y el campo de desarrollo rápido de las baterías con celdas no acuosas, que podrían emplear una plétora de nuevos materiales descubiertos para los electrodos positivos y negativos, así como para el electrolito. Éstos ofrecen no sólo ventajas de sustentabilidad de los elementos, sino que también presentan diferencias electroquímicas y estructurales, en comparación con sus análogos de litio que son altamente beneficiosas. Se abre entonces, un área fascinante de investigación en la electroquímica de estado sólido, que está madurando cada vez para el desarrollo de nuevas y mejores baterías.

REFERENCIAS

- [1] J. M. Tarascon, M. Armand, Nature 2001, 414, 359 – 367.
- [2] A. Yaksic, J. E. Tilton, Resour. Policy 2009, 34, 185 – 194.

- [3] S. Fletcher, *Bottled Lightning: Superbatteries, Electric Cars, and the New Lithium Economy*, Hill and Wang, New York, 2012.
- [4] H. Pan, Y. S. Hu, L. Chen, *Energy Environ. Sci.* 2013, 6, 2338 – 2360.
- [5] R. Berthelot, D. Carlier, C. Delmas, *Nat. Mater.* 2011, 10, 74 – 80.
- [6] J. Xu, D. H. Lee, R. J. Clément, X. Yu, M. Leskes, A. J. Pell, G. Pintacuda, X.-Q. Yang, C. P. Grey, Y. S. Meng, *Chem. Mater.* 2014, 26, 1260 – 1269.
- [7] M. M. Doeff, Y. Ma, S. J. Visco, L. C. De Jonghe, *J. Electrochem. Soc.* 1993, 140, L169 – L170.
- [8] D. A. Stevens, J. R. Dahn, *J. Electrochem. Soc.* 2000, 147, 1271 – 1273.
- [9] S. Komaba, W. Murata, T. Ishikawa, N. Yabuuchi, T. Ozeki, T. Nakayama, A. Ogata, K. Gotoh, K. Fujiwara, *Adv. Funct. Mater.* 2011, 21, 3859 – 3867.
- [10] S. I. Park, I. Gocheva, S. Okada, J. Yamaki, *J. Electrochem. Soc.* 2011, 158, A1067.
- [11] V. L. Chevrier, G. Ceder, *J. Electrochem. Soc.* 2011, 158, A1011 – A1014.
- [12] A. Hayashi, K. Noi, A. Sakuda, M. Tatsumisago, *Nat. Commun.* 2012, 3, 856.
- [13] S. Komaba, T. Ishikawa, N. Yabuuchi, W. Murata, A. Ito, Y. Ohsawa, *ACS Appl. Mater. Interfaces* 2011, 3, 4165 – 4168.
- [14] A. Fukunaga, T. Nohira, R. Hagiwara, K. Numata, E. Itani, S. Sakai, K. Nitta, S. Inazawa, *J. Power Sources* 2014, 246, 387 – 391.

LOCALIZACIÓN Y RELOCALIZACIÓN DE SISMOS CON UNA Y TRES ESTACIONES: EJEMPLO EN EVENTOS INTRAPLACA

M.C. Carmen Maricela Gómez Arredondo

RESUMEN

La localización de evento sísmico es una de las tareas primordiales de la sismología, la cual se obtiene a partir de la diferencia del tiempo de arribo en de las ondas P y S. Una ubicación precisa se puede obtener si el evento sísmico

fue registrado en al menos tres estaciones por medio del método del círculo, el cual es la base de varios programas sismológicos. Existen técnicas que permiten dar localizaciones con al menos una estación, utilizando registros las tres componentes del movimiento. En la actualidad existen diferentes softwares que permiten dar una ubicación precisa en cuestión de minutos, lo cual permite obtener una visión preliminar de la fuente del sismo. En esta ocasión se hace un análisis de una relocalización que se generó con varias estaciones para una secuencia sísmicas ocurrida en el noreste de México durante el periodo Agosto-Diciembre 2012.

INTRODUCCIÓN

Un sismo puede ser descrito como la liberación repentina de energía durante el movimiento a lo largo de una falla, el cual forma parte de una secuencia sísmica que presenta características bien definidas (Figura 1). Scholz, C.H., (2002), divide las secuencias sísmicas en tres tipos: (a) *Terremoto principal – réplicas*: inicia con un sismo de mayor magnitud seguido por un grupo de pequeños terremotos conocidos como réplicas, las cuales son un proceso de relajación de esfuerzos producidos por la ruptura del evento dominante en magnitud dentro de la secuencia. El número de réplicas que ocurren en cierto periodo de tiempo (un mes), son linealmente proporcional al área de ruptura del evento principal (Yamanaka y Shimazaki, 1990). (b) *Premonitores- terremoto principal- réplicas*: inicia con una secuencia de terremotos llamados premonitores que son seguidos por un evento de mayor magnitud terminando con una serie de réplicas. Los sismos premonitores son más pequeños que el evento dominante, su hipocentro se localiza muy cercano al principal y pueden ocurrir desde uno hasta una serie de temblores antes del terremoto mayor.

(c) *Enjambres sísmicos*: son secuencias de terremotos que inician, terminan gradualmente y no poseen un evento dominante en magnitud (Spicak, A., 2000). Comúnmente son asociados a regiones volcánicas pero ésta no es una

regla general, ya que los enjambres ocurren en regiones fracturadas cuando el esfuerzo aplicado aumenta (Mogi, K, 1963).

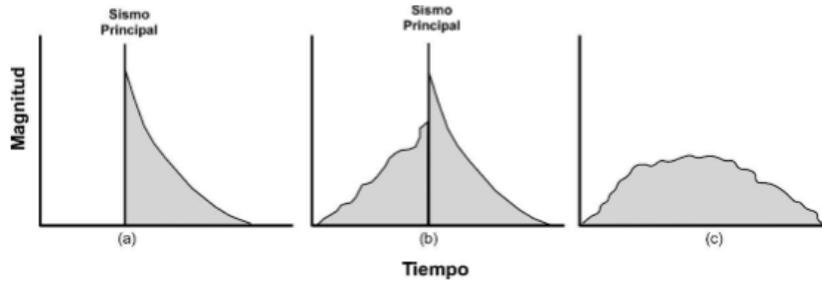


Figura 1.- Diagrama esquemático que ilustra los tipos de secuencias de terremotos, (a) terremoto principal - réplicas, (b) premonitores - terremoto principal - réplicas y (c) enjambre sísmico o secuencia sísmica (modificada de Scholz, C.H., 2002).

Aunque la mayor parte de la sismicidad se genera en zonas de límites de placas, dentro de los continentes se tiene evidencia de actividad sísmica, que es conocida como sismicidad intraplaca (Frohlich y Pulliam, 1999). La ocurrencia de grandes terremotos intraplaca es relativamente infrecuente comparada con los sismos asociados a límites de placas, estos eventos ocasionales pueden resultar extremadamente devastadores, debido a que la mayoría de las ciudades localizadas en el interior de los continentes no han desarrollado la cultura sísmica. Prueba de esto es que la mayoría de las edificaciones no toman en cuenta el criterio sísmico para su construcción, además que se ha demostrado que las sacudidas del suelo pueden involucrar áreas extensas y por lo tanto el riesgo asociado puede ser mayor, debido a que la atenuación de la energía sísmica es relativamente baja hacia el interior de las placas (Crone, et al, 2003).

La mayoría de la actividad sísmica intraplaca presenta magnitudes pequeñas y sumando que en esas zonas no se cuenta con suficientes instrumentos que permitan monitorear la actividad, se vuelve más complejo obtener sus parámetros de localización como es el caso del noreste de México, una region

intraplaca que anteriormente era considerada como asísmica, mostrándose lo contrario con registros de eventos de $2.3 \leq M \leq 4.5$.

OBJETIVO

Describir la metodología utilizada para la relocalización de sismos intraplaca ocurridos en el noreste de México de Agosto a Diciembre 2012, con una y varias estaciones.

METODOLOGÍA

Un sismograma es un registro del rompimiento de la roca en el interior de la tierra en el cual se representa el movimiento del subsuelo medido por un sismógrafo, y se pueden identificar el arribo de las ondas *P*, *S* y *Superficiales*. Fueron utilizados registros de cuatro estaciones sismológicas, dos estaciones permanentes pertenecientes al SSN y dos estaciones temporales, en las cuales se calculó el tiempo de arribo entre *P* y *S*, donde la diferencia del tiempo de arribo entre ambas fases en cada estación se usó para obtener la localización epicentral.

Localización con varias estaciones

Cuando se encuentran disponibles al menos tres estaciones se puede obtener la localización precisa del epicentro utilizando el método del círculo (Figura 2), este caso se resuelve con el picado de seis fases, *P* y *S* en cada componente (Havskov y Ottemöller, 2010). El método consiste en dibujar un círculo con centro en la estación que registró el sismo, el cual su radio es la diferencia de tiempo de arribo de la onda *S* menos el tiempo de llegada de la onda *P*. El área formada por la unión de los tres círculos es una aproximación de la zona donde se encuentra el epicentro. Para obtener una mayor delimitación se dibujan tres líneas que pasen por la intersección del círculo adyacente, la unión de las tres líneas representa el epicentro.

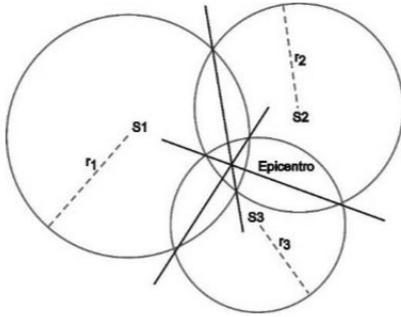


Figura 2.- Localización con el método del círculo. S1, S2 y S3 son las localizaciones de las estaciones; r_1 , r_2 y r_3 , corresponden a la diferencia S-P en cada estación (modificada de Havskov y Ottemöller 2010).

Los círculos raramente coinciden en un punto, el cual indica el error en las observaciones, por lo que se trazan líneas rectas que unen dos puntos en la intersección de dos círculos vecinos. Estas líneas intersectan en un punto que es el epicentro.

Localización con una estación

En los últimos años, ha aumentado la cantidad de observatorios sismológicos que registran el movimiento del suelo con tres componentes, por lo que, obtener cálculos de localizaciones se ha vuelto más sofisticado, de modo que es posible calcular los datos de la fuente utilizando solamente una estación (e.g. Frohlich y Pulliam, 1999, Agius y Galea, 2011).

La localización con una sola estación provee una ubicación preliminar general de la zona donde ocurrió un terremoto; sin embargo, esto sucede con poca precisión comparada con aquella que se realiza con múltiples estaciones sismológicas, donde el margen de error es menor.

Localización en SEISAN

Existen diferentes programas para la localización de los eventos sísmicos. SEISAN (*Seismic Analysis System*) es una de las plataformas de procesamiento de datos sísmicos más comunes, es una serie de programas para el análisis de

terremotos. Para obtener una localización en SEISAN es necesario que se identifiquen al menos tres fases en el sismograma (Figura 3).

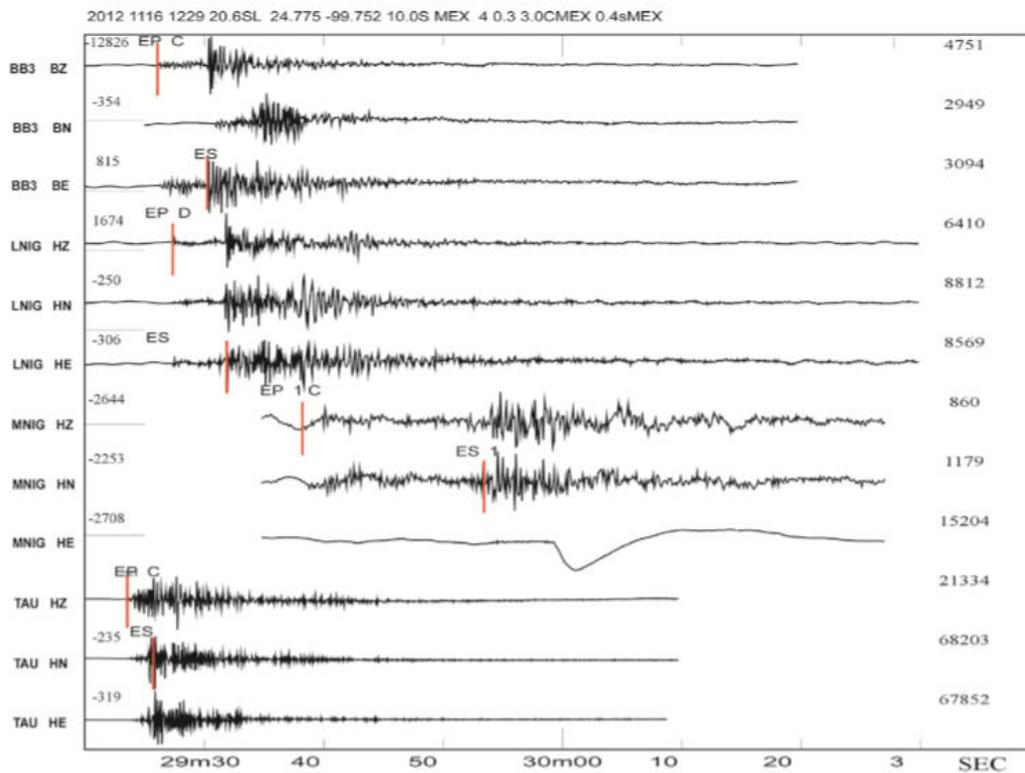


Figura 3.- Registros sísmicos de cuatro estaciones sismológicas, las líneas rojas representan el inicio de la onda P (EP) y S (ES). Gráficos en el programa SEISAN (Gomez-Arredondo, 2014).

Los datos necesarios para obtener la localización de un sismo son los tiempos de llegada de las ondas P, en las estaciones donde se registró el evento. De manera general, la localización es más confiable si se utilizan las ondas P y S de varias estaciones.

Diferentes metodologías para localizar terremotos con una sola estación han sido desarrolladas para obtener mayor información en áreas donde no existe una densa red sísmica que permita monitorear los pequeños eventos (e.g: Abercrombie, 1995, Alessandrini, et al, 1994).

Si un sismo solo se registró en una estación de banda ancha, se puede obtener una visión preliminar de su ubicación. Debido a que las ondas P son vertical y radialmente polarizadas, el vector de amplitud de las ondas P se pueden utilizar para calcular el acimut inverso al epicentro.

La componente radial de la onda P será registrada en las dos componentes horizontales (norte y sur), y de esta manera, el cociente de las amplitudes A_E/A_N de tales componentes es usado para obtener el acimut inverso (Figura 4):

$$\Phi = \tan^{-1} \left(\frac{A_E}{A_N} \right)$$

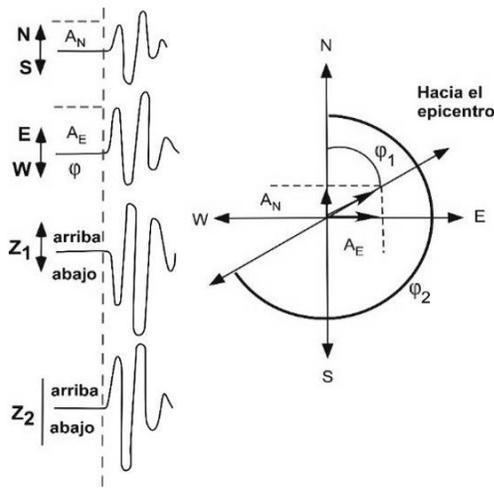


Figura 4 Ejemplo de primeros movimientos de onda P en registros de las tres componentes (izquierda); de las cuales se puede obtener el acimut inverso ϕ . ϕ_1 , corresponde en este ejemplo, un primer movimiento hacia abajo (Z1) en la componente vertical, y ϕ_2 , al primer movimiento arriba, (Z2) (modificada de Havskov y Ottemöller, 2010).

Agregar información del tiempo de arribo de las ondas S, mejora la confiabilidad de la localización tanto epicentral, como en la profundidad y, reduce el error estándar en los parámetros de localización (James, D., E. et al, 1969). En el caso del ejemplo mostrado se utilizó el tiempo de llegada de onda P la cual fue definida en la componente vertical, y en algunos registros la onda S la cual fue picada en las componentes N-S o E-W.

Relocalización

Los programas Hypocenter e Hypo71 forman parte de la plataforma SEISAN, ambos fueron utilizados para generar la relocalización de los dos eventos. *Hypocenter* calcula la localización y tiempo de origen de un evento, por medio del trazado de rayos (ondas directas y refractadas), a través de un modelo de velocidades 1-D y ajusta los parámetros del sismo usando un enfoque convencional de mínimos cuadrados.

Existen dos opciones de ponderación dentro de *Hypocenter*, la primera se encuentra relacionada con la precisión del tiempo de arribo, donde el usuario especifica el peso para cada fase (w_1), asignando un número (del 0 al 4) para cada fase dada, estos valores son proporcionados manualmente (Figura 3).

Los números corresponden a los factores de peso de 1, 0.75, 0.5, 0.25 y 0.0, respectivamente. Cuando no se tiene suficiente confianza en el tiempo, se utiliza en valor 9, lo que significa que no se usará el valor del tiempo absoluto, más bien, la diferencia de tiempos S-P; donde se deshabilita el uso de tal tiempo de arribo.

Re-localizaciones con Hypo71

Hypo71 es un programa utilizado para obtener el hipocentro, tiempo de origen, magnitud y patrones del primer movimiento del suelo de un sismo.

Para generar una re-localización con *Hypo71*, es necesario contar con información de una localización previa, que sirve como datos de entrada, la cual fue tomada de los registros sísmicos relocalizados

Por otro lado, la localización de un sismo puede generar errores, producto de una mala lectura de las fases sísmicas y del modelo de velocidades de la corteza utilizado; el error en el modelo es el resultado de la velocidad de viaje de la onda sísmica que trata de ajustarse a una estructura. Es importante tener en cuenta, que aunque el modelo de velocidades sea muy parecido a la

estructura cortical de la región de estudio, no deja de ser una aproximación a la realidad

ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS DOCUMENTADOS

Las relocalizaciones fueron obtenidas por medio del picado de fases de las ondas P y S en cuatro estaciones. La comparación de la localización preliminar obtenida con una estación, con respecto a la re-localización, muestra diferencias significativas en algunos eventos. La buena cobertura de las estaciones sismológicas permite mejorar la ubicación del sismo. Entre mayor sea la cantidad de fases utilizadas, mejor será la precisión de los parámetros a calcular, lo cual fue comprobado con las relocalizaciones realizadas con varias estaciones (Figura 5). Una buena manera de confiar en una re-localización es analizando los valores de los errores. El *rms* en la plataforma SEISAN es la raíz cuadrada del promedio de los tiempos residuales, y se puede utilizar como la posible estimación del error en las fases de llegada. Estos errores pueden incluir efectos de la fuente, desviación del modelo de velocidades empleados por el programa con respecto a la verdadera trayectoria de la fuente. Todos los eventos relocalizados tienen residuales *rms* menores que 0.4 s (40%). Estos valores son una clara evidencia sobre la certidumbre en las re-localizaciones (Figura 4).

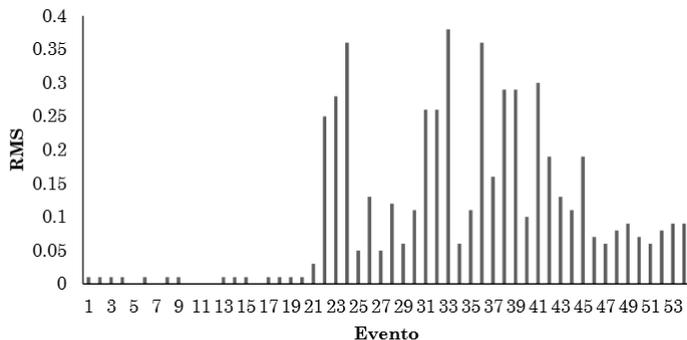


Figura 4.- Distribución de los residuales de las soluciones hipocentrales. El número de evento inicia con los sismos de agosto a diciembre 2012.

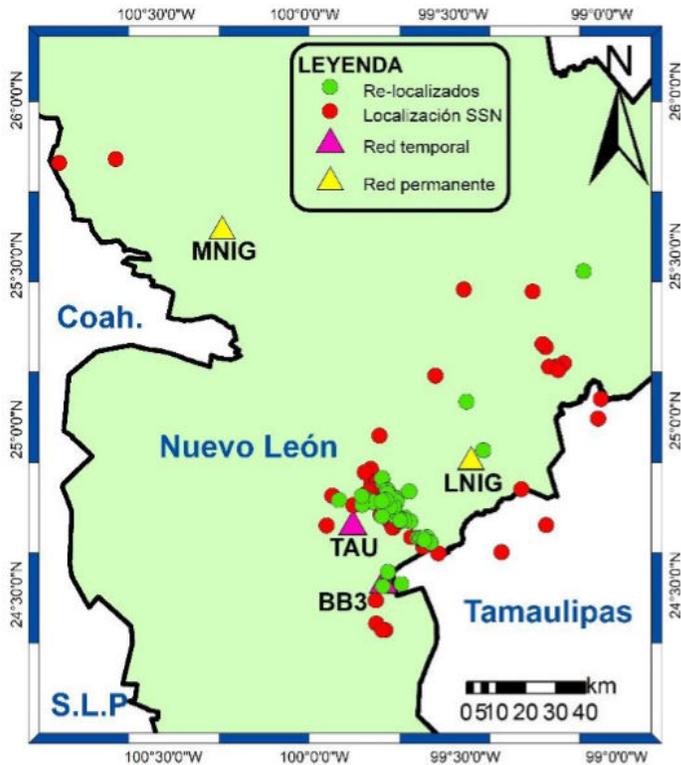


Figura 5.-Comparación epicentral del enjambre del 2012. Los círculos de color rojo son las localizaciones obtenidas por el Servicio Sismológico Nacional, y los círculos verdes son los eventos relocalizados en este trabajo. Abreviaturas: Coah-Coahuila, S. L. P.-San Luis Potosí (Gómez-Arredondo, 2014).

CONCLUSIONES Y DISCUSIONES

La localización epicentral utilizando una sola estación se ha convertido en una de las tareas más importantes en sismos que ocurren en zonas continentales intraplaca, debido a que son en estas regiones donde de manera general, se cuenta con escasas estaciones sismológicas que permitan monitorear la actividad sísmica. Aunque esta técnica es de gran importancia para dar una visión preliminar de la localización, puede generar mayor incertidumbre comparada cuando se general relocalizaciones con al menos tres estaciones que tengan una buena cobertura con los epicentros. La localización de un evento sísmico es el primer paso antes de cualquier estudio sismológico, por lo que la importancia de conocer y aplicara las técnicas de relocalización con una

más de tres estaciones radica en poder caracterizar donde se concentra la mayor actividad sísmica y a dar una visión general de la fuente de los eventos antes de continuar los estudios sismológicos.

BIBLIOGRAFIA

Abercrombie, R. E., (1995), Earthquake location using single station deep borehole recordings: Implications for microseismicity on the San Andreas fault in southern California, *Journal of Geophysical Research*, 100, 12, 3-14.

Agius, M., R. & Galea, P., (2011), A Single-Station Automated Earthquake Location System at Wied Dalam Station, Malta, *Seismological Research Letters*, 82, 4, 545-559.

Alessandrini, B., Cattaneo, M., Demartin, M., Gasperini, M. & Lanza, V., (1994), A simple, P-wave polarization analysis its application to earthquake Location, *Annali di Geofisica*, 37, 883-897.

Crone, A. J., De Martini, P. M., Machette, M. N., Okumura, K., & Prescott, J. R., (2003), Paleoseismicity of Two Historically Quiescent Faults in Australia: Implications for Fault Behavior in Stable Continental Regions, *Bulletin of the Seismological Society of America*, 93, 1913-1934.

Frohlich, C., & J. Pulliam (1999), Single-station location of seismic events: A review plea for more research. *Physics of the Earth and Planetary Interiors* 113, 277-291

Gomez Arredondo, C. M., (2014), "Relocalización y Parámetros de Fuente del enjambre sísmico generado durante Agosto-Diciembre 2012 en el centro del Estado de Nuevo León, México, Tesis de maestría, Universidad Autónoma de Nuevo León, pp. 190.

Havskov, J y Ottemöller, L, (2010), *Routine Data Processing in Earthquake Seismology*, Springer, pp.351.

James, D., E., Selwin, J. Y., Eduardo, S., Lazo, L. & Aparicio, P., (1969), On locating local earthquakes using small networks, *Bulletin of the Seismological Society of America*. 59, 3, 1201-1212

Li, Q., Liu, M., y Stein, S., (2009), Spatiotemporal Complexity of Continental Intraplate Seismicity: Insights from Geodynamic Modeling and Implications for Seismic Hazard Estimation, *Bulletin of the Seismological Society of America*, 99, 52–60.

Mogi, Ki., (1963), Some discussions and aftershocks, foreshocks and earthquake swarms-the fracture of a semi-infinite body caused by an Inner stress origin and Its relation to the earthquake phenomena (Third paper), *Bulletin of the Earthquake Research Institute*, 41, 615-658.

Scholz, C.H., (2002), *The mechanics of earthquakes and faulting*. Cambridge University Press, Cambridge, 439 pp.

Scholz, C.H., Aviles, C.A. & Wesnousky, S.G., (1986), Scaling differences between large interplate and intraplate earthquakes, *Bulletin of the Seismological Society of America*, Vol. 76, No. 1, pp. 65-70.

Spicak, A., (2000), Earthquake swarms and accompanying phenomena in intraplate regions: a review, *Geophysical Institute, Academy of Sciences of the Czech Republic*, 89-106.

Yamanaka & Shimazaki (1990), Scaling Relationship between the Number of Aftershocks and the Size of the Main Shock, *Journal of Physics of the Earth*, 38, 305-324.

**Tomografía de Resistividad Eléctrica tridimensional (TRE 3D) en el plantel
Casa Libertad de la UACM usando arreglo tipo “L”**

M.C. Guillermo Chávez Hernández ^{1*}
Dr. René Efraín Chávez Segura ²
M.C. Juan Esteban Hernández Quintero ³

RESUMEN

El presente trabajo tiene como objetivo mostrar la capacidad de caracterización del subsuelo utilizando el arreglo denominado tipo “L” en Tomografía de Resistividad Eléctrica Tridimensional (TRE 3D), combinado con arreglos ecuatoriales dipolo-dipolo, en el plantel Casa Libertad de la Universidad Autónoma de la Ciudad de México (UACM). El estudio consistió en caracterizar una grieta expuesta en superficialmente en el estacionamiento del plantel y determinar, si existen, grietas en el subsuelo hasta una profundidad máxima de 8.7m, que no han aflorado. La localización de las grietas en el subsuelo es importante para prevenir el riesgo que éstas representan para todo tipo de infraestructura que se encuentre en la superficie.

INTRODUCCIÓN

La Tomografía de Resistividad Eléctrica (TRE) es un método para calcular la distribución de la resistividad eléctrica en el subsuelo mediante un gran número de medidas realizadas con electrodos posicionados en la superficie de la Tierra con un patrón geométrico arbitrario, con el objetivo de determinar una imagen eléctrica que exhiba la distribución de la resistividad verdadera en el subsuelo. Según el objetivo planteado es posible realizar TRE en dos y tres dimensiones (2D y 3D) en superficie.

Para un estudio de TRE 3D, usualmente, los electrodos suelen colocarse en una rejilla cuadrada con el mismo espaciamiento entre electrodos en las direcciones “x” y “y” como lo muestra Loke y Barker (1996). Otro diseño utilizado para la TRE 3D consta de una serie de líneas paralelas cuyo espaciamiento interlineal debe ser menor o igual a cuatro veces la separación electródica (Aizebeokhai *et al.*,2009). Los arreglos utilizados con frecuencia para este tipo de estudios son el polo-polo, polo-dipolo y dipolo-dipolo (Loke, 2000),

esto es debido a que otros arreglos tienen una pobre cobertura horizontal cerca de los extremos de la rejilla de estudio.

Muchas veces, los esquemas de muestreo en las TRE 3D en superficie, están limitados por las condiciones físicas del entorno cercano, es decir, edificios, estructuras de acero, zonas urbanas muy pobladas o rasgos geológicos. Es por tanto indispensable considerar esas limitaciones en el momento de la planeación del levantamiento, más, si es necesario determinar valores debajo de dichas estructuras.

En este trabajo se presentan el arreglo tipo “L”, desarrollado por Tejero-Andrade *et al.* (2011), que tiene la finalidad de la obtención de datos de la resistividad del subsuelo en donde existan construcciones como casas, edificios, museos, catedrales y todos aquellos obstáculos que en las zonas urbanas impidan la toma de datos. Tiene la ventaja de ser combinado entre sí, es decir, realizar cuatro “L” en campo para obtener una TRE 3D alrededor de algunas zonas en donde no sea posible la aplicación de un conjunto de líneas paralelas en forma de rejilla. Cuando el arreglo tipo “L” se combina para hacer una TRE 3D carece de información en superficie y por debajo del centro del cubo muestreado. Para minimizar el problema de falta de información a profundidad hacia el centro del cubo se le añade a la combinación de las cuatro “L” el arreglo ecuatorial dipolo-dipolo aprovechando la disposición de los electrodos, aumentando el número de datos tomados, con lo que se incrementa la veracidad en el resultado obtenido en una inversión.

Para mostrar la capacidad de caracterización del subsuelo mediante el arreglo tipo “L” combinado con el arreglo ecuatorial dipolo-dipolo para una TRE 3D, se presentan un estudio real adquirido en el plantel Casa Libertad de la Universidad Autónoma de la Ciudad de México (en la zona oriente de la Ciudad de México) cuyo objetivo es determinar la geometría de una grieta expuesta en superficie dentro del plantel, la misma que se prolonga por las calles adyacentes, así como, determinar las zonas de riesgo, si existen, que pudiesen ocasionar daños estructurales al plantel o a futuras edificaciones en la zona.

Los resultados se presentan de dos maneras: la primera utilizando sólo el arreglo tipo “L” para caracterizar el subsuelo y la segunda, añadiendo al resultado obtenido por el arreglo tipo “L”, tres arreglos ecuatoriales dipolo-dipolo y dos perfiles 2D con arreglo dipolo-dipolo.

OBJETIVOS Y METAS

Mostrar la capacidad de caracterización del subsuelo mediante el arreglo tipo “L” combinado con el arreglo ecuatorial dipolo-dipolo para una TRE 3D en un caso real, con la finalidad de determinar la geometría de una grieta expuesta en superficie dentro del plantel, así como, determinar las zonas de riesgo, si existen, que pudiesen ocasionar daños estructurales al plantel o a futuras edificaciones en la zona.

MATERIALES Y MÉTODOS

Dada la problemática existente, Tejero-Andrade *et al.* (2011), propone la técnica denominada “arreglo en L” que fue diseñada para realizar TRE 3D y permite adquirir información confiable de la distribución de respuesta eléctrica en zonas donde exista alguna construcción que impida la realización de perfiles tipo rejilla. Además, propone configurar el “arreglo en L” en la modalidad dipolo-dipolo, debido a que suele tener más puntos de atribución, lo que implica, más información en la parte del vértice entre los perfiles perpendiculares.

Una de las ventajas de este arreglo es que pueden combinarse cuatro “L” para rodear una estructura y poder realizar una TRE 3D por debajo de dicha estructura adquiriendo un “volumen” de información. El procedimiento es el siguiente: se modifican los archivos de lectura eliminando la información de uno de los laterales de las “L” consecutivas para evitar la repetición de datos, teniendo las cuatro “L” modificadas se obtendrían los puntos de atribución. Dados los puntos de atribución obtenidos al combinarse cuatro “L”, se observa que no existe información en la parte superficial y central de dicho cubo, por lo

que se propone la combinación de las cuatro “L” y dos ecuatoriales utilizando los perfiles paralelos y aumentando la información en la parte central, lo que provee de más información e implica una mayor veracidad en el resultado obtenido en la inversión.

Para el cumplir con el objetivo propuesto se trabajó con cuatro “L” y dos ecuatoriales programados en modalidad dipolo-dipolo cuyos puntos de atribución estarán dispuestos como se muestra en la Figura 1.

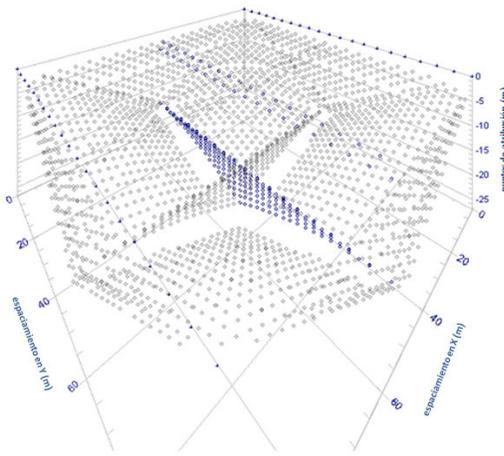


Figura 1. Visualización de los puntos de atribución de cuatro “L” modificadas y dos ecuatoriales, programados en modalidad dipolo-dipolo.

La visualización de los puntos de atribución que se muestra en la figura 1 se obtuvieron utilizando el *software Electre Pro* de *Iris Instruments* (2007).

Para probar la eficiencia y confiabilidad resolutive de la combinación propuesta se muestra la aplicación del arreglo propuesto en un ejemplo práctico, el cual consistió en caracterizar una grieta expuesta superficialmente en el estacionamiento del plantel Casa Libertad de la Universidad Autónoma de la Ciudad de México (UACM) y determinar, si existen, grietas en el subsuelo hasta una profundidad máxima de 8.7m, que no han aflorado. La localización de las grietas en el subsuelo es importante para prevenir el riesgo que éstas representan para todo tipo de infraestructura que se encuentre en la superficie.

4.1 Geología de la zona de estudio

El plantel Casa Libertad de la Universidad Autónoma de la Ciudad de México, se encuentra ubicado al oriente de la Ciudad de México, en la delegación Iztapalapa cerca de los límites con la delegación Tláhuac, donde existe un conjunto de conos volcánicos jóvenes alineados de occidente a oriente en las faldas de la Sierra de Santa Catarina (Vázquez-Sánchez y Jaimes_Palomera, 1989).

La zona de estudio se encuentra entre los volcanes Guadalupe o Santa Catarina y La Caldera, geomorfológicamente está ubicada en una zona de pie de monte volcánico o mantos de acumulación. Muchos asentamientos en la Ciudad de México y en el área Metropolitana se han desarrollado en épocas pasadas sin llevar a cabo un estudio del subsuelo. Ahora las obras civiles están presentando daños debido a que no se realizó un diseño de cimentación acorde a las características del subsuelo y a la estructura a construir (De la Torre, 2010). La zona de estudio, con respecto a la zonificación geotécnica de la Ciudad de México (Valdés, 2005), se encuentra en la zona II o de transición, la cual está caracterizada por la presencia de depósitos que forman una franja entre los depósitos lacustres y las estructuras volcánicas que rodean la cuenca, y las que sobresalen en la zona del lago. Son materiales de origen aluvial y de acuerdo al volumen y la frecuencia de los depósitos se clasifican como zonas de transición estratificada y abrupta.

4.2 Geología de la Delegación Iztapalapa

La delegación Iztapalapa corresponde a dos zonas principalmente, la zona del valle lacustres y la zona de lomas (Marsal y Mazari, 1959). Las elevaciones mayores en la zona de Iztapalapa corresponden a edificios volcánicos compuestos por andesitas, basaltos y rocas piroclásticas de edad Plioceno que afloran en la sierra de Santa Catarina, Cerro de la Estrella y Peñón de Marqués. El valle que se ubica entre las edificaciones volcánicas se presenta relleno de una secuencia compuesta por rocas volcánicas, piroclásticas y sedimentos. En

la parte superior de esta secuencia predominan los sedimentos de ambiente lacustre y en las zonas cercanas a los edificios volcánicos hay depósitos piroclásticos, aluviales y de pendiente (Carreón et al., 2009).

4.3 Aplicación del método en el Plantel Casa Libertad de la UACM

El estudio TRE 3D fue realizado en el estacionamiento del plantel Casa Libertad de la UACM donde está expuesta una grieta (Figura 2). El objetivo de dicho estudio es caracterizar una grieta expuesta superficialmente en el dicho lugar y determinar si existen grietas que no han aflorado. Con los perfiles 1 a 4 se realizó el levantamiento correspondiente al arreglo tipo “L” y combinando los



perfiles 3-6, 5-6 y 1-5, se realizaron las adquisiciones de los datos con el arreglo ecuatorial dipolo-dipolo (Figura 3).

Figura 2. Ubicación de los perfiles dentro del plantel Casa Libertad de la UACM.

Los perfiles tienen una longitud de 36m, formando con ellos, un área de 1,296m² aproximadamente. Los perfiles 5 y 6 se encuentran a 12m y 24 m, respectivamente, desde el origen (Figura 3). Cada perfil cuenta con 25 electrodos con un espaciamiento de 1.5m. Dada la programación del

levantamiento de los datos se tiene una profundidad de estudio de 8.7m, dando un volumen de estudio de 11,275m³.

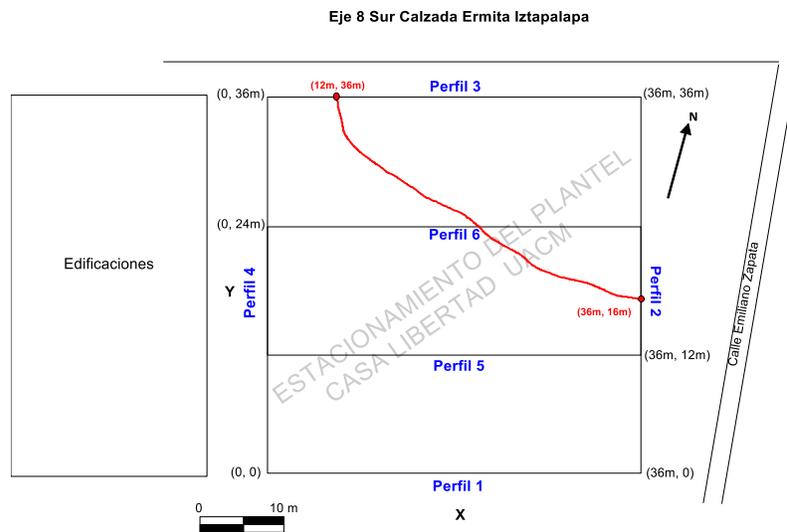


Figura 3. Vista en planta de los perfiles utilizados en el estacionamiento del plantel Casa Libertad de la UACM. En rojo se muestra la grieta expuesta en superficie dentro del estacionamiento del plantel.

RESULTADOS

Los resultados obtenidos de la zona de estudio se muestran de dos maneras: la primera consiste en una inversión de los datos obtenidos con las cuatro “L” y la segunda es la combinación de las cuatro “L” y los tres ecuatoriales dipolo-dipolo. Las inversiones se realizaron con el método de inversión suavizada (*Smooth Model Inversion*), que ofrece el software *EarthImager* (AGI, 2008).

5.1 Resultados utilizando las cuatro “L”

En la figura 4, que muestra la parte profunda del resultado obtenido, se observa en línea punteada la grieta que es visible en superficie, ubicada aproximadamente a 16m en dirección Y, la cual tiene un cierto grado de buzamiento y se extiende sobre toda el área estudiada hacia la barda que limita el plantel y la Calzada Ermita Iztapalapa. Además, puede observarse una región que al parecer es otra posible grieta que aún no aflora y por su orientación, esta

puede extenderse hacia fuera de la zona estudiada en dirección hacia el actual edificio de la UACM, pero tiene cierta tendencia a seguir hacia el estacionamiento del plantel. Las zonas conductoras mostradas en la Figura 4, pueden considerarse como estratos saturados de agua. Además, se filtran los resultados para visualizar las zonas de altas resistividades, donde puede observarse la grieta que es visible en superficie y la posible grieta y zona de riesgo.

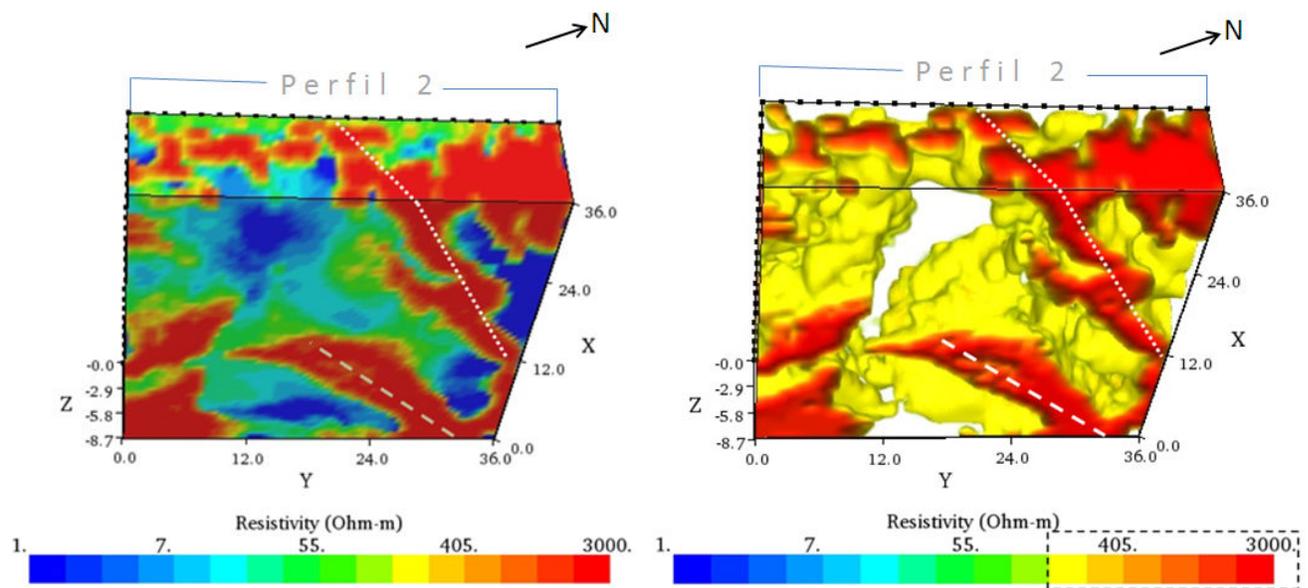


Figura 4. Izquierda: Vista desde abajo del resultado de la inversión para la cuatro “L” con valores de RMS=35.8% y L2=44.3. Derecha: Visualización del resultado, desde abajo, acotado a los valores de resistividades que aparecen en líneas punteadas, equivalentes al 37.5% del total del rango de valores obtenidos.

Las otras zonas resistivas que se observan en el modelo obtenido pueden atribuirse a la compactación del terreno, efectuado para la cimentación de las estructuras civiles o a los materiales contenidos en dicho lugar, dado que ésta es una zona de transición. Así mismo, puede observarse que las anomalías consideradas como grietas, no tienen continuidad hacia la superficie debido al

problema de mínima resolución del arreglo tipo “L” hacia la superficie del cubo muestreado.

5.2 Resultados utilizando las cuatro “L” y los ecuatoriales dipolo-dipolo

En la Figura 5 se puede visualizar la caracterización de la grieta expuesta en superficie marcada con línea punteada similar a la encontrada con el resultado anterior. Con guiones se muestra otra zona de riesgo o grieta que aún no ha aflorado, pero que discrepa con la señalada en el resultado anterior; ésta parece extenderse hacia el centro del estacionamiento, pero no es evidente que tome en dirección del edificio de la UACM. Además, se muestra otra visualización de las anomalías mostrando cierta región en el rango de valores obtenidos para las resistividades.

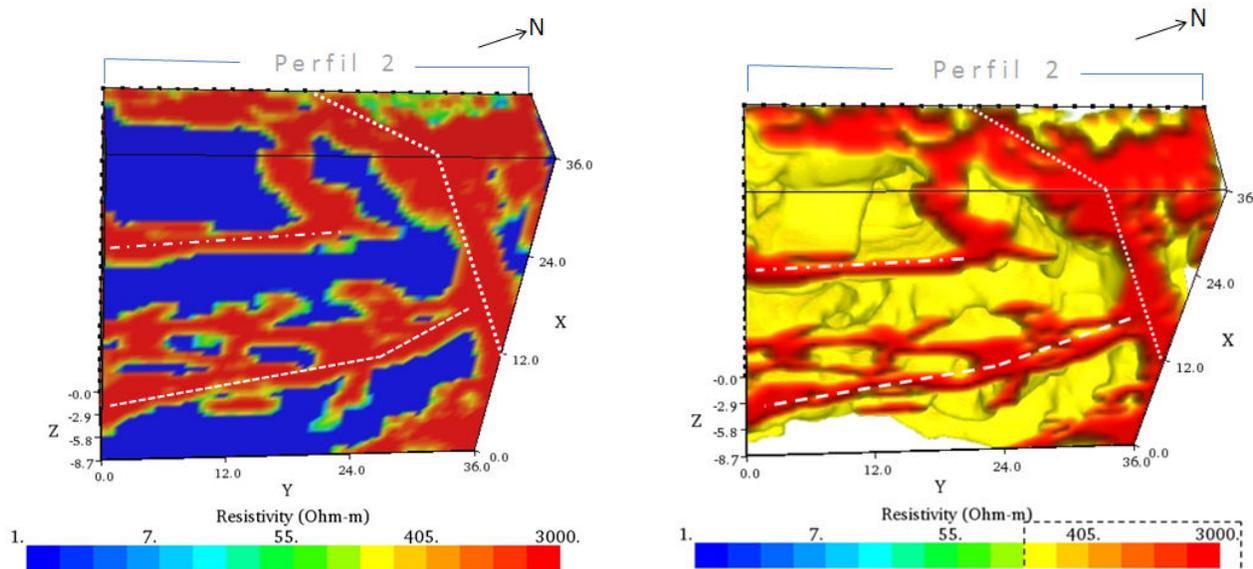


Figura 5. Izquierda: Vista desde abajo del resultado de la inversión para las cuatro “L” y los ecuatoriales dipolo-dipolo con valores de RMS=81% y L2=213. Derecha: Visualización del resultado, desde abajo, acotado a los valores de resistividades que aparecen en líneas punteadas, equivalentes al 37.5% del total del rango de valores obtenidos.

La línea formada por guion y punto muestra una zona resistiva que puede considerarse otra grieta ubicada a profundidad y que aún no aflora, la cual no es visible en el resultado de inversión utilizado únicamente las cuatro “L”, dado que este no cuenta con información en esa sección del volumen de estudio. De la misma manera que en el caso anterior, las zonas conductoras pueden considerarse como estratos saturados de agua. De la misma manera que le resultado anterior, las otras zonas resistivas que se observan en el modelo obtenido pueden atribuirse a la compactación del terreno, efectuado para la cimentación del campus.

DISCUSIÓN

Mediante los dos casos mostrados es posible caracterizar la grieta expuesta en el estacionamiento del plantel y la ubicación de una zona que posiblemente sea una grieta que aún no aflora y que presenta cierta tendencia a extenderse hacia el centro del estacionamiento y/o hacia el edificio principal del UACM. Es importante este resultado debido a que las autoridades de dicha Universidad planeaban una expansión construyendo un edificio hacia la parte trasera del plantel y dados los resultados, si existe esta grieta que no es visible en superficie y conserva la tendencia hacia el centro del estacionamiento podría causar, a la larga, problemas estructurales en la construcción.

La heterogeneidad en los valores de resistividad que se observan en ambos resultados puede asociarse a la heterogeneidad de la zona de transición en la cual se encuentra ubicado el plantel.

La falta de información geológica de la zona estudiada exige la realización de pequeños pozos exploratorios que permitan construir una columna estratigráfica para correlacionar y corroborar los resultados obtenidos mediante este estudio.

CONCLUSIONES

La combinación de cuatro “L muestran buenos resultados cualitativos en el proceso de caracterizar el subsuelo.

Añadiendo arreglos ecuatoriales dipolo-dipolo al arreglo tipo “L”, se mejora la resolución de la adquisición en la parte central y profunda del volumen de estudio, en consecuencia, se mejora la calidad en la inversión y en la caracterización del subsuelo.

El levantamiento propuesto en el plantel, fue capaz de identificar a profundidad la grieta expuesta en superficie y además da información de algunas zonas altamente resistivas, que pueden considerarse como posibles grietas que aún no afloran y ayudan a dar un diagnóstico de los riesgos en la zona para el plan de expansión de la UACM.

La principal aportación de este trabajo es que el arreglo propuesto es recomendable para el caso en el cual haya algún impedimento que permita realizar un estudio de TRE 3D convencional, sobre todo en zonas urbanas, con resultados confiables.

REFERENCIAS

AGI, 2008. Instruction Manual for EarthImager 3D version 1.5.0 Resistivity Inversion Software. Austin, Texas, 97 p.

Aizebeokhai, A. P., Olayinka, A. I. y Singh, V. S., 2009. Numerical evaluation of 3D geoelectrical resistivity imaging for environmental and engineering investigation using orthogonal 2D profiles. SEG Houston International Exposition and Annual Meeting, 1440-1444.

Carreón Freyre, D. C., Cerca Martínez, L. M., Ochoa-Gonzalez, G. H., 2009. Estudios de propagación del fracturamiento ocasionado por subsidencia en dos áreas urbanas geológicamente contrastantes de México: las ciudades de México D. F. y Querétaro.

Geotechnical engineering in urban areas affected by land subsidence. Comité

Técnico 36 de la Sociedad Internacional de Mecánica de Suelos (ISSMGT TC-36). Sociedad Mexicana de Mecánica de Suelos, 1, ISBN 978-968-5350-24-2. 49-58.

De la Torre González, B., 2010. Definición de zonas de fracturamiento empleando Tomografía de Resistividad Eléctrica 3D. Tesis de licenciatura, Facultad de Ingeniería, UNAM, 91 p.

IRIS Instruments, 2007. Electre Pro user manual. Francia, 45 p.

Loke, M. H. y Barker, R. D., 1996. Practical techniques for 3D resistivity surveys and data inversion. *Geophysical Prospecting*. 44, 499-523.

Loke, M. H., 2000. Electrical imaging surveys for environmental and engineering studies: A practical guide to 2-D and 3-D surveys, 68 p.

Marsal, R. J. y Mazari, M., 1959. El subsuelo de la Ciudad de México. Instituto de Ingeniería, UNAM. 377 p.

Tejero-Andrade, A., Delgado Solorzano, C., López González, A., Chávez Segura, R., 2011. "L" and "Corner" arrays for 3D electrical resistivity tomography: An alternative for urban zones: *Journal of Environmental and Engineering Geosciences*. Submitted.

Valdés González, C., 2005. La red Sísmica Nacional y los Sistemas de Alarma en México.

Vázquez-Sánchez, Jaimes Palomera, E. y R., 1989. Geología de la Cuenca de México. *Geofísica Internacional*, vol. 28, núm. 2, Instituto de Geofísica, UNAM, México, D. F., 133-190.

**VARIABILIDAD DE LA TEMPERATURA SUPERFICIAL DEL AIRE EN EL ESTADO
DE TABASCO.**

Dra. Fátima Maciel Carrillo González¹

M.C. Quintiliano Angulo Córdova²

Est. Manuel S. Antonio Pérez ³

RESUMEN

Se estudia la variabilidad de la temperatura superficial del aire en el estado de Tabasco, mediante el análisis de datos de temperatura media, provenientes de 37 estaciones climatológicas existentes en la base de datos CLICOM en el periodo 1950-2016. Los resultados obtenidos indican que la variación de la temperatura con la altitud no es significativa. Se generaron isotermas decenales para la zona de estudio utilizando *Surfer* mediante el método de interpolación de *Kriging*. Finalmente se hizo un análisis con un índice climático

global asociado a (ENSO) encontrándose relación con el aumento de temperatura en el periodo mencionado tanto mensual como anualmente.

INTRODUCCIÓN

Según Enriqueta García [1], el clima es el estado más frecuente de la atmósfera en un lugar determinado, y comprende los extremos y todas las variaciones. En general puede considerarse a la variabilidad del clima, como variaciones del rango medio de las condiciones climáticas a lo largo del tiempo, extendidas por encima de la escala de un fenómeno meteorológico particular y en un espacio geográfico. En consecuencia, puede decirse que el clima varía en diferentes escalas de tiempo y espacio. El (IPCC,2008) [2], establece que la variabilidad climática puede obedecer tanto a procesos internos naturales al interior del sistema climático, como a variaciones en los forzamientos externos por las actividades humanas.

La temperatura es uno de los elementos más importantes del clima, constituyéndose en múltiples ocasiones junto con la precipitación, en la base de los sistemas de clasificación climática, así como también, en los elementos quizá más comunes en el estudio del clima y su variabilidad.

La temperatura depende fundamentalmente de tres factores Ledesma Jimeno [3]: latitud, longitud y altitud. De la latitud, dado que la inclinación de los rayos solares aumenta con la latitud, y entonces la temperatura disminuye del Ecuador a los Polos, de la longitud, debido a la distribución de tierras y mares, las diferentes características del terreno y las corrientes oceánicas producen importantes variaciones en ella y por último de la altitud, puesto que como sabemos la temperatura disminuye con la altura.

En la actualidad las investigaciones oceanográficas y meteorológicas han encontrado que uno de los eventos a escala global de interacción océano-atmósfera más importantes, que se desarrollan a escala interanual es el denominado El Niño Oscilación del Sur (ENSO, por sus siglas en inglés).

Al realizar un estudio de la variabilidad de la temperatura superficial del aire en el Estado de Tabasco, es posible tener una referencia actualizada de su comportamiento, así como también relacionarla con fenómenos de mayor escala como lo es ENSO.

OBJETIVOS Y METAS

- 1.- Generar un modelo de regresión lineal ajustado para temperatura-altitud y determinar en su caso el valor del gradiente alto-térmico.
- 2.- Utilizar SIG para generar mapas de distribución espacial de la temperatura promedio anual.
- 3.- Investigar la existencia de correlación entre la temperatura promedio y MEI (*Multivariate ENSO Index*) un índice climático global asociado a ENSO.

MATERIALES Y MÉTODOS

El estado de Tabasco geográficamente está ubicado en el sureste de México, entre los 17°15' y 18°39'07" latitud norte y 90°50'23" Y 94°07'49" longitud oeste. Limita al norte con el Golfo de México, al noroeste con el estado de Campeche, al sureste con la República de Guatemala y al sur y oeste con los estados de Chiapas y Veracruz, respectivamente (Figura 1). Esta ubicación registra al territorio tabasqueño en la franja intertropical, formando parte de las zonas cálido-húmedo del país [4].

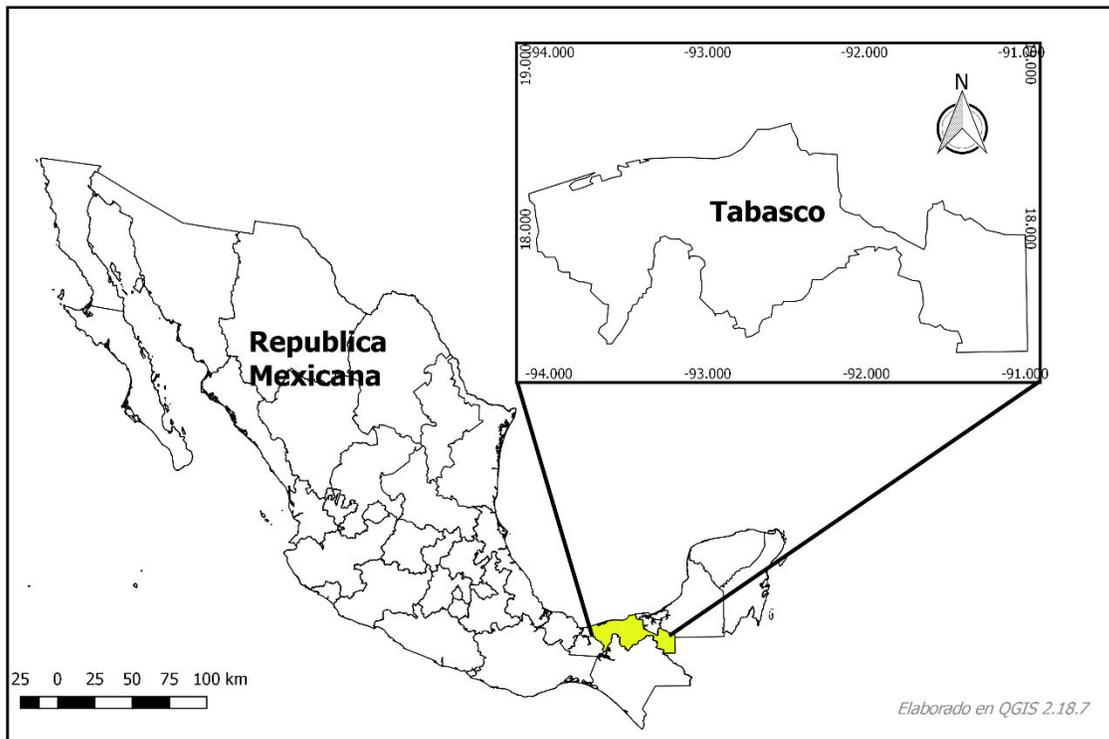


Figura 1. Localización de la zona de estudio

La característica más relevante del clima de Tabasco es su temperatura elevada, que alcanza una media anual de 26°C; las temperaturas máximas de este clima son 42 °C en la Llanura Costera en los meses más calurosos y las temperaturas mínimas llegan hasta 20 °C en los lomeríos y sierras del sur de la entidad en los meses más fríos (García Payró 2000) [5].

En este trabajo se utilizaron series de tiempo para calcular la temperatura promedio anual de las estaciones elegidas de la base de datos CLICOM cuyos datos se confinan en la Tabla 1, eligiéndose aquellas estaciones que cumpliesen con tener información de 20 años o más de datos.

I D	CLA VE	ESTACIÓN (TABASCO, MEXICO)	LONGITUD (O) (GRADOS, MIN, SEG.)	LATITUD (N) (GRADOS, MIN, SEG.)	ALTIT UD (MSN M)	LONGITUD DE LA SERIE
1	2703 4	PARAISO	-93° 12' 0''	18° 23' 59.99''	6	1950-2016

2	2705 3	VICENTE GUERRERO	-92° 54' 0''	18° 23' 59.99''	6	1962-2016
3	2705 0	TRES BRAZOS	-92° 35' 59.99''	18° 23' 59.99''	2	1949-2004
4	2705 7	COMALCALCO (SMN)	-93° 12' 0''	18° 18' 0''	13	1943-1970
5	2700 9	COMALCALCO (DGE)	-93° 12' 0''	18° 11' 59''	15	1966-2016
6	2701 6	FRONTERA A. OBREGON	-92° 35' 59.99''	18° 30' 0''	2	1953-2008
7	2702 0	JALPA DE MENDEZ	-93° 0' 0''	18° 11' 59''	10	1959-2016
8	2708 4	NACAJUCA	-93° 0' 0''	18° 11' 59''	10	1980-2016
9	2702 9	MACULTEPEC	-92° 54' 0''	18° 30' 0''	10	1965-1999
1 0	2703 9	SAMARIA	-93° 17' 59.99''	18° 0' 0''	23	1950-2016
1 1	2705 4	VILLAHERMOSA (DGE)	-92° 54' 0''	18° 0' 0''	24	1949-2016
1 2	2705 5	VILLAHERMOSA (SMN)	-92° 54' 0''	18° 0' 0''	6	1927-1974
1 3	2709 2	PLAYAS DEL ROSARIO	-92° 54' 0''	17° 53' 59.99''	18	1987-2016
1 4	2704 8	TEPETITAN	-92° 24' 0''	17° 48' 0''	7	1962-2016
1 5	2707 1	AQUILES SERDAN	-92° 30' 0''	17° 48' 0''	11	1977-2016
1 6	2703 0	MACUSPANA (DGE)	-92° 35' 59.99''	17° 48' 0''	11	1949-2016
1 7	2703 1	MACUSPANA (SMN)	-92° 35' 59.99''	17° 48' 0''	10	1962-1998
1 8	2704 9	TEQUILA	-92° 47' 59.99''	17° 41' 59.99''	13	1974-2016
1	2702	MACUSPANA KM.262	-92° 30' 0''	17° 36' 0''	24	1963-1983

9	2					
2	2701	FRANCISCO RUEDA	-93° 54' 0''	17° 48' 0''	7	1965-2016
0	5					
2	2703	PUEBLO NUEVO	-93° 54' 0''	17° 53' 59.99''	21	1948-2016
1	7					
2	2706	GONZALEZ	-93° 47' 59.99''	18° 0' 0''	11	1997-2016
2	0					
2	2703	MOSQUITERO	-93° 35' 59.99''	17° 41' 59.99''	50	1948-1979
3	3					
2	2700	CENTRO EXPERIMENTAL W-75	-93° 35' 59.99''	18° 0' 0''	12	1961-2016
4	7					
2	2707	POBLADO C-09	-93° 30' 0''	18° 11' 59''	7.5	1972-2016
5	3					
2	2707	POBLADO C-16	-93° 30' 0''	18° 6' 0''	13	1972-2016
6	6					
2	2708	POBLADO C-32	-93° 30' 0''	18° 0' 0''	21	1972-2016
7	0					
2	2701	HUIMANGUILLO (DGE)	-93° 24' 0''	17° 48' 0''	36	1949-1981
8	7					
2	2700	CARDENAS	-93° 24' 0''	18° 0' 0''	21	1955-2016
9	8					
3	2705	TULIPAN	-93° 17' 59.99''	18° 6' 0''	20	1967-2016
0	1					
3	2701	EMILIANO ZAPATA	-91° 47' 59.99''	17° 41' 59.99''	26	1963-2016
3	2					
3	2709	EL PIPILA	-91° 35' 59.99''	18° 0' 0''	10	1983-2016
2	0					
3	2705	BALANCAN DE DOMINGUEZ (DGE)	-91° 30' 0''	17° 48' 0''	12	1955-2016
3	6					
3	2700	BOCA DEL CERRO	-91° 30' 0''	17° 23' 59.99''	14	1948-2016
4	4					
3	2704	TENOSIQUE (SMN)	-91 24' 0''	17° 30' 0''	22	1921-2015
5	7					
3	2704	SAN PEDRO	-91° 12' 0''	17° 48' 0''	44	1948-2016

6	0					
3	2705	EL TRIUNFO	-91° 12' 0''	17° 53'	41	1972-2016
7	9			59.99''		

Tabla 1. Datos de estaciones utilizadas en el estudio.

Para la representación espacial de la temperatura en la región en estudio se tomó como base la altitud de cada estación y su temperatura promedio anual. Se obtuvo a partir de la página de internet del Instituto Nacional de Estadística Geografía e Informática (INEGI), el Modelo Digital de Elevación (MDE) delimitada por el estado de Tabasco, 15 m, utilizando un SIG para digitalizarlo (Figura 2).

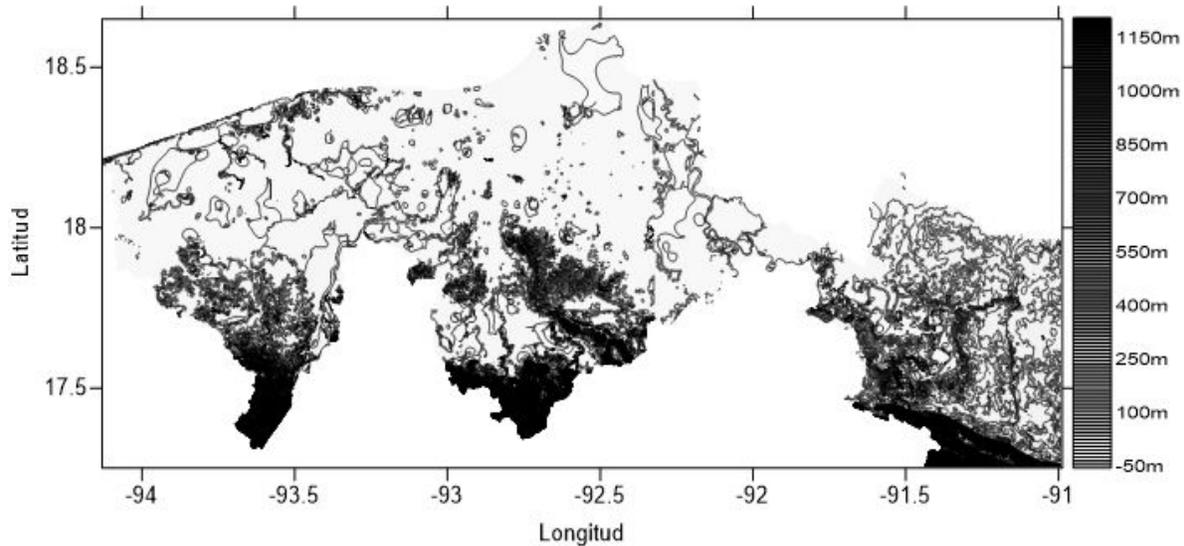


Figura 2. Mapa de elevaciones de la zona de estudio

Se generó el modelo de regresión lineal anual de temperatura, tomando la altitud como la variable independiente y la temperatura como la variable dependiente. Con estos modelos de regresión lineal se generaron en SIG los mapas de distribución espacial de la temperatura promedio anual y de

gradiente alto-térmico (Figura 3).

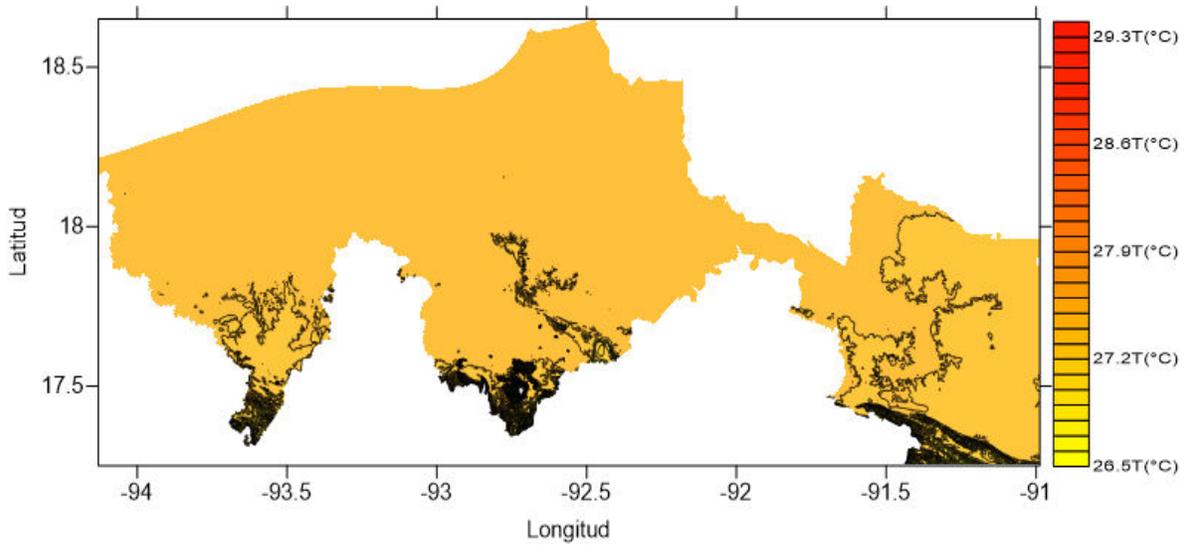


Figura 3. Gradiente alto-térmico de la temperatura promedio anual de Tabasco

Para la generación de las isotermas en la zona de estudio se realizó una interpolación obtenida mediante una de las técnicas de interpolación geoestadística, conocida como método de Kriging y su trazado fue mediante el programa *Surfer* 2013 se hizo el promedio de todos los datos de las 37

estaciones del periodo de 1950-2016 por intervalos de 10 años (Figura 5).

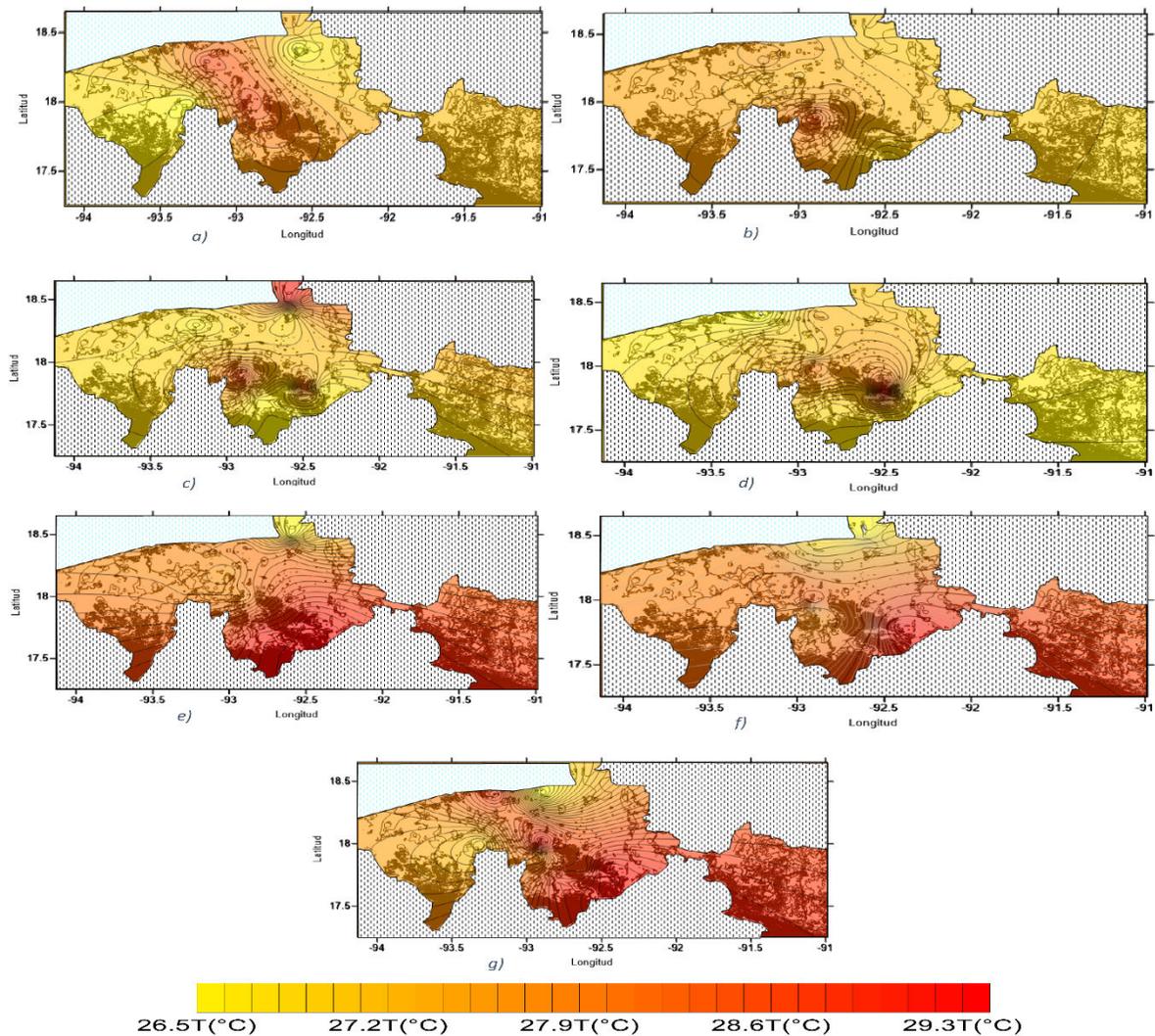


Figura 5. Isotermas generadas en *surfer* 2013 mediante la interpolación de *Kriging*. Periodos a) 1950-1959 b) 1960-1969 c) 1970-1979 d) 1980-1989 e) 1990-1999 f) 2000-2009 g) 2010-2016

Las variaciones del clima en México, en gran medida son determinadas según Magaña y Quintanar 1997 [6], por la presencia del evento ENSO, así se decidió utilizar uno de los indicadores climáticos de El Niño, denominado MEI (*Multivariate ENSO Index*), el cual es una combinación lineal de seis variables atmosféricas y marinas en la región Niño 3 y cuyos datos se presentan en periodos bimestrales, se escogió una estación de las 37 utilizadas que tuviese el

periodo (1950-2016) completo a saber la 27030-MACUSPANA (DGE)-TAB para obtener las anomalías de la temperatura promedio realizada en Matlab y así obtener el coeficiente de correlación con el índice climático de ENSO elegido.

RESULTADOS

El modelo de regresión lineal ajustado para la temperatura-altitud, tiene un coeficiente de determinación de 0.1301% (con 95% de confianza).

La interpolación realizada a los valores de temperatura promedio de las estaciones, por periodos de 10 años partiendo de 1950 hasta 2016 muestran que la temperatura media en el estado de Tabasco oscila entre los valores de 27°C a 30°C, por otra parte es notorio también que los valores más altos para este parámetro climático están localizados en el entorno de Villahermosa, Teapa, Macuspana y Comalcalco.

La estación elegida para la comparación grafica con el ENSO fue 27030-MACUSPANA (DGE)-TAB con la cual se obtuvo el grafico anual (Figura 6) y el coeficiente de correlación.

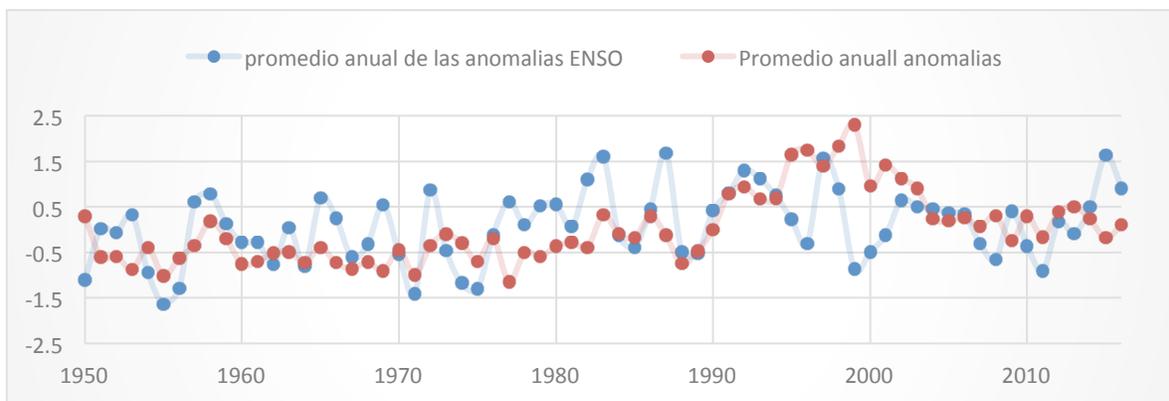


Figura 6. Análisis anual de la temperatura promedio respecto al ENSO

De igual forma se procedió a graficar ambas anomalías por mes (Figura 7).

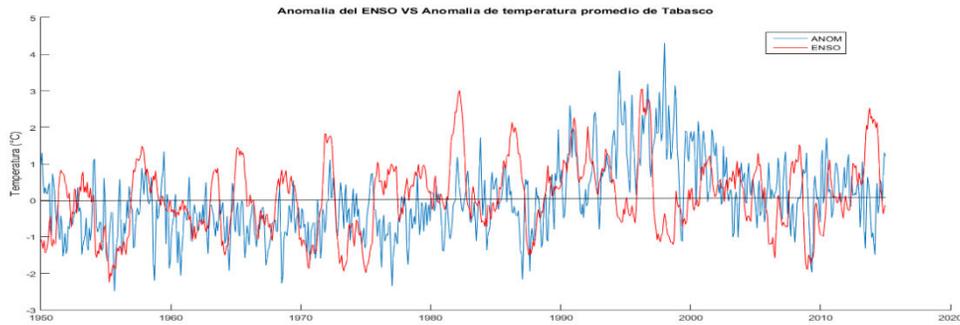


Figura 7. Análisis mensual de la temperatura promedio respecto al ENSO

DISCUSIÓN

Aunque se pudo generar el mapa de gradiente alto-térmico la variación de la temperatura con la altitud no es significativa, resaltando la uniformidad a lo largo de la planicie tabasqueña.

El que las isotermas de valores más altos estén localizadas en áreas predominantemente urbanas sugiere que la variabilidad de la temperatura media en el periodo analizado esté relacionada en forma predominante con los denominados forzamientos externos por las actividades humanas.

En cuanto a la relación del índice climático global asociado con ENSO, la variabilidad de la temperatura anual se explica al menos en un 30%, mientras que para el análisis mensual se encuentra una relación del 15%.

CONCLUSIONES

La variabilidad del clima en el tiempo es una característica derivada del carácter dinámico del sistema climático, las interacciones que se producen entre los elementos del sistema son complejas y dificultan la obtención de interpretaciones sencillas; Sin embargo, este primer análisis sobre la variabilidad climática en el estado de Tabasco pone de manifiesto que dicha variabilidad existe y que en consecuencia deben hacerse análisis más profundos para tratar de explicar sus causas, así como también es necesario un tratamiento estadístico más confiable de los datos.

Es necesario también explorar de forma más eficiente lo relativo a las teleconexiones a fin de mejorar la estimación de éstas con la variabilidad climática local y su distribución espacial.

REFERENCIAS

- [1] Enriqueta García de Miranda., Apuntes de Climatología. Quinta Edición. 1986. México, D. F.
- [2] Panel Intergubernamental sobre Cambio Climático (IPCC). El Cambio Climático y el Agua. Documento técnico del Grupo Intergubernamental de Expertos sobre el Cambio Climático. 2008. Ginebra, Suiza.
- [3] M. Ledesma Jimeno. Climatología y Meteorología Agrícola. International Thomson Editores Spain Paraninfo, S.A. 2000. Madrid, España.
- [4] Larios Romero Juan, Hernández Jorge. Zonificación fisiográfica del estado de Tabasco, revista de geografía agrícola, Universidad Autónoma de Chapingo México. <https://chapingo.mx/revistas/revistas/articulos/doc/rga-1730.pdf>. Consultada el 11/septiembre/2017 a las 13hrs 18 min.
- [5] García, P. O. 2000. Historia y Geografía del Estado de Tabasco. Editorial Santillana. México.
- [6] Magaña V. y A. Quintanar. 1997. On the use of a general circulation model to study regional climate, 2nd. UNAM-CRAY Supercomputing Conference on Earth Sciences. México City. June 1997. Ed. Cambridge University Press. 39-48

Efecto Bactericida De Metabolitos Secundarios Producidos Por Especies De *Bacillus Spp.* Contra Bacterias Gram Positivas Y Gram Negativas.

M.C.E. Laura Fabiola Estrada Andrade¹

L.Q. AnaCelia Juárez Rabanales²

Dra. Estibaliz Sansinanea Royano³

Dra. Maricela de Jesús Alor Chávez⁴

Resumen

Se evaluó el efecto bactericida de veinte extractos metabólicos, producidos por especies de *Bacillus spp.*, particularmente *Bacillus thuringiensis* y *Bacillus cereus*. Los resultados denotaron que los extractos J1ELI3 y J1ELI30, fueron los que presentaron mayor actividad bactericida (80% y 60%), contra cepas de *Escherichia coli* y *Klebsiella pneumoniae*, respectivamente. El extracto SA2ELI26, mostró una intensa actividad inhibitoria con todas las bacterias Gram positivas muestreadas, seguido del extracto Q1ELI17 con 59% contra *Pseudomonas aeruginosa*, siendo el de menor actividad (40%), el extracto J1ELI30 para *Staphylococcus aureus* y *Klebsiella pneumoniae*. La especie que presentó actividad inhibitorio para los veinte extractos probados, particularmente, los extractos, B8ELI37 y CH1ELI40, fue *Serratia marcescens*, (67% y 59%) respectivamente. Se comprobó que la ampicilina, a pesar de ser un antibiótico específico contra bacterias Gram negativas, no tuvo efecto inhibitorio significativo contra la gran mayoría de bacterias. Especies Gram negativas y Gram positivas, tienen la capacidad para inhibir a las bacterias mismas, ya que cada especie en particular, posee un sustrato genético el cual tiende a bloquear el ingreso de cualquier tipo de antibiótico al interior de cada microorganismo, favoreciendo así, su poder de resistencia.

Introducción

Por definición, los metabolitos secundarios, son moléculas sintetizadas por determinados microorganismos, que se producen en la fase estacionaria y aunque no son imprescindibles para el microorganismo, juegan papeles importantes en la protección y supervivencia propia del ambiente que lo rodea. De igual forma, presentan gran diversidad estructural y cada uno de sus compuestos son producidos por un número pequeño de especies (Velusamy, 2008).

Por muchos años, el metabolismo secundario fue ignorado; el estudio de este tipo de metabolismo no esencial se dejó para los científicos de las industrias y los químicos académicos. Hoy en día la situación es diferente. La amplia variabilidad estructural de estos compuestos ha atraído la curiosidad de los químicos y las actividades biológicas que poseen estos productos naturales, han inspirado a la industria farmacéutica para buscar nuevas estructuras en cultivos microbianos así como en plantas (Karlovsky, 2008).

Muchos de los productos microbianos que tienen un gran valor comercial y económico son metabolitos secundarios (Demian, 2009). En general estos metabolitos sirven como armas competitivas usadas contra otras bacterias, hongos, amebas, plantas e insectos, agentes transportadores de metales, efectores de simbiosis, hormonas sexuales y factores de diferenciación (Demian, 2011).

Esta amplia variabilidad de estructuras y actividades de los compuestos secundarios expande el potencial de la importancia industrial y biotecnológica del género *Bacillus* con sus especies relacionadas (Luzhetskyy *et al.*, 2007).

Las especies de *Bacillus spp.* son capaces de producir un amplio rango de metabolitos secundarios de naturaleza y estructura muy diferente, mostrando un amplio espectro de actividades. Estos metabolitos incluyen antibióticos,

pigmentos, toxinas, promotores de crecimiento y otros compuestos bioactivos que están diseñados para capacitar a la bacteria para sobrevivir en su ambiente natural (Hadacek, 2000). Cabe destacar que estas especies han tenido impacto en el control biológico de hongos, plagas y enfermedades debido a las cualidades morfológicas y fisiológicas que permiten su ubicuidad en la naturaleza (Sansinanea, 2012). La mayoría de los *Bacillus spp.* producen muchas clases de antibióticos como bacilomicina, fungimicina, micosubtilina y zwittermicina, inhibiendo el crecimiento y desarrollo de patógenos in vitro y/o in situ (Tenover et al., 2004).

Actualmente existe una necesidad en el área médica en el desarrollo de nuevos e innovadores antibióticos, esto debido, a que diversas enfermedades infecciosas representan la segunda causa de mortalidad a nivel mundial (Velusamy, 2008). La necesidad de generar nuevos antibióticos se debe al desarrollo de patógenos resistentes, así como la evolución de nuevos agentes infecciosos como el virus Hanta, VHI y Ebola (Stein, 2005).

Dada la importancia económica que ha tenido para diversos sectores industriales la especie *Bacillus spp.*, en el presente estudio consistió en evaluar el efecto bactericida de metabolitos secundarios producidos por esta especie contra bacterias patógenas Gram positivas y Gram negativas. De igual forma se evaluará el nivel de sensibilidad de estos metabolitos secundarios frente a diversos antibióticos de amplio espectro que comúnmente se emplean para el control en diversas enfermedades.

Objetivos y Metas

Evaluar el efecto bactericida de metabolitos secundarios producidos por especies de *Bacillus spp.* contra *Micrococcus luteus*, *Staphylococcus aureus*, *Serratia marcescens*, *Klebsiella pneumoniae*, *Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Staphylococcus saprophyticus*, *Streptococcus agalactiae*, *Salmonella spp*, *Vibrio cholerae*, *Vibrio parahaemolyticus* y *Shigella sp.* De igual manera se evaluaron los

niveles de resistencia e inhibición de estos extractos metabólicos empleando diversos antibióticos de uso más frecuente en el tratamiento para diversas enfermedades. Los resultados obtenidos en el presente estudio servirán de plataforma para futuras investigaciones en el desarrollo y elaboración de productos químicos, farmacéuticos y biológicos de interés industrial.

Materiales y Métodos

Se trabajaron veinte extractos metabólicos, aislados en un estudio previo (Sansinanea, 2015), a partir de cepas de *Bacillus cereus* y *Bacillus thuringiensis*, los cuales se muestran en la tabla 1. A partir de la extracción de los metabolitos secundarios, éstos fueron mantenidos en refrigeración en tubos Eppendorf a $4 \pm 1^\circ\text{C}$ para ser utilizados posteriormente en el estudio bactericida correspondiente. Para llevar a efecto este estudio, se emplearon cepas tipo, liofilizadas y certificadas, de acuerdo a la Norma Internacional ISO 9001:2000 de las siguientes especies: *Serratia marcescens* (ATTC1256), *Micrococcus luteus* (ATTC1043), *Staphylococcus aureus* (ATCC2266), *Klebsiella pneumoniae* (ATCC1344), *Escherichia coli* (ATCC1778), *Pseudomonas aeruginosa* (ATCC5641), *Sta. Saprophyticus* (ATCC1417), *Sta. Agalactiae* (ATCC1422), *Salmonella sp.* (ATCC1873), *Vibrio cholerae* (ATCC2241), *Vibrio parahemolyticus* (ATCC2252) y *Shigella sp.* (ATCC1855), a las cuales se les corroboró su pureza y autenticidad, mediante el análisis morfológico y colonial correspondiente, empleando medios de cultivo selectivos y parámetros de incubación propios de cada especie. Posteriormente, de cada cepa tipo, se tomó una asada la cual se suspendió en caldo LB, incubándose, bajo agitación constante, a $29 \pm 1^\circ\text{C}$ por 24 horas. Culminado el periodo de incubación, se procedió a tomar un inóculo de cada cepa y por triplicado, fueron sembradas por la técnica de estría cruzada, en cajas Petri, las cuales contenían 25 mL de agar TSA. Finalmente a las cajas se les colocaron discos de papel estéril, con 0.5 mL de cada uno de los extractos metabólicos de las cepas de *Bacillus cereus* y *Bacillus thuringiensis*; agua como solución de control y los antibióticos seleccionados; (500 mg/mL de ampicilina y estreptomicina,

para bacterias Gram negativas y 50 mg/mL de Vancomicina, para bacterias Gram positivas). Las cajas se dejaron en incubación a 29°C durante 24 horas, analizando finalmente el nivel inhibición de cada extracto metabólico.

Tabla 1. Extractos de *Bacillus spp*, aislados

Extracto	Cultivo	Cepa tipo
ELI3J1	Tris G	<i>B.thuringiensis</i>
ELI6J4	Tris G	<i>B.thuringiensis</i>
ELI10T1	Tris G	<i>B. thuringiensis</i>
ELI11T2	Tris G	<i>B.thuringiensis</i>
ELI12T3	Tris G	<i>B.cereus</i>
ELI17Q1	Tris G	<i>B.thuringiensis</i>
ELI18Q2	Tris G	<i>B.cereus</i>
ELI21VH1	Tris G	<i>B.thuringiensis</i>
ELI26SA2	Tris G	<i>B. thuringiensis</i>
ELI27CU2	Tris G	<i>B. thuringiensis</i>
ELI28CU3	Tris G	<i>B. thuringiensis</i>
ELI30J1	Tris G	<i>B. thuringiensis</i>
ELI31J4	Tris G	<i>B. thuringiensis</i>
ELI32P5	Tris G	<i>B. cereus</i>
ELI33B1	Tris G	<i>B. thuringiensis</i>
ELI34B3	Tris G	<i>B. thuringiensis</i>
ELI37B8	Tris G	<i>B. cereus</i>
ELI40CH1	Tris G	<i>B. thuringiensis</i>
ELI41CH2	Tris G	<i>B. cereus</i>
ELI42CH3	Tris G	<i>B.thuringiensis</i>

Resultados y Discusión

Se analizó la morfología colonial y microscópica de las cepas tipo a probar, como se observa en la tabla 2., corroborando de manera efectiva la autenticidad y pureza de las cepas.

Se certificó la autenticidad y pureza de las cepas tipo de las bacterias de prueba, liofilizadas y certificadas por la Norma Internacional ISO 9001:2000, mediante el análisis morfológico y colonial correspondiente, las cuales fueron provistas por el Laboratorio Regional del estado de Tabasco. Los resultados se observan en la tabla 2.

El estudio bactericida de los veinte extractos metabólicos, denotaron prueba positiva, a través de la formación de un halo de inhibición transparente alrededor de las bacterias Gram positivas y Gram negativas correspondientes, como se denota en las figura 1a y 1b. Se demostró que la ampicilina a pesar de ser un antibiótico específico contra bacterias Gram negativas, no presentó un efecto inhibitorio significativo contra a la gran mayoría de bacterias, deduciendo que podría deberse a la pérdida de efectividad en la alícuota empleada. Por lo anterior fue necesario recurrir a la toma de alícuotas anteriores de los antibióticos, hecho que resultó eficiente, ya que la presencia de los halos de inhibición fue aún más intensa para la ampicilina y estreptomycin y en menor proporción para la vancomicina, ya que éste tuvo mayor especificidad, para bacterias Gram positivas como se aprecia en la figura 2.

Tabla 2. Morfología colonial y microscópica de las cepas tipo.

Bacteria	Morfología microscópica	Morfología colonial
<i>Serratia Marcescens</i>	Bacilo móvil, Gram negativo	Colonias medianas, brillantes, convexas de color rojo intenso, forma circular, bordes redondeados
<i>Micrococcus luteus</i>	Coco, Gram positiva, con de 0.5 a 3.0 μm de diámetro	Colonias amarillas, húmedas, convexas de 2.0 mm
<i>Staphylococcus aureus</i>	Coco inmóvil Gram positiva, de 0.8 a 1 μm de diámetro	Colonias amarillas de 2.0 mm, lisas, brillantes y

		convexas
<i>Klebsiella pneumoniae</i>	Bacilo móvil, Gram negativo	Colonias color verde de 2.5 mm.
<i>Escherichia coli</i>	Bacilo móvil, Gram negativo con flagelos peritricos	Colonias moradas circulares, de 0.5 a 3.0 mm; convexas con bordes redondos.
<i>Pseudomonas aeruginosa</i>	Bacilo móvil, Gram negativo	Colonias blancas, planas y alargadas de 1.0 a 2.0 mm
<i>Staphylococcus saprophyticus</i>	Coco, Gram positiva inmóvil	Colonias color crema de 1.0 a 2.0 mm
<i>Streptococcus agalactiae</i>	Coco, Gram positiva	Colonias circulares, húmedas traslúcidas
<i>Salmonella sp.</i>	Bacilo móvil, Gram negativo con presencia de flagelos peritricos	Colonias traslúcidas con centro negro
<i>Bacillus cereus</i>	Bacillo Gram positivo	Colonias cerosas, de color crema, de crecimiento irregular
<i>Vibrio cholerae</i>	Bacillo móvil Gram negativo de 1.5 a 2.4 µm de diámetro	Colonias amarillas, húmedas, traslúcidas de 3.0 mm
<i>Vibrio parahaemolyticus</i>	Bacilo móvil, Gram negativo sin presencia de esporas.	Colonias traslúcidas de color verde oscuro
<i>Shigella sp.</i>	Bacillo Gram negativo, no móvil	Colonias amarillas grisáceas, de 1.0 a 2.0 mm de diámetro, convexas de bordes irregulares



a) Bacterias positivas

b) Bacterias Gram negativas

Figura 1. Pruebas de inhibición de metabolitos secundarios para bacterias Gram positivas

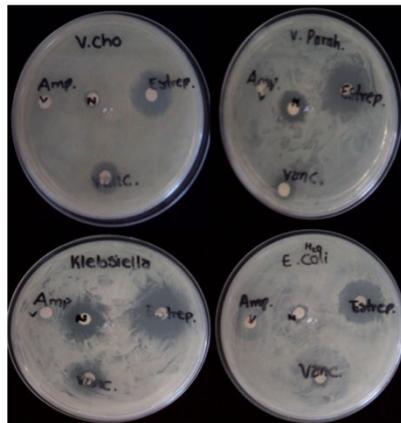
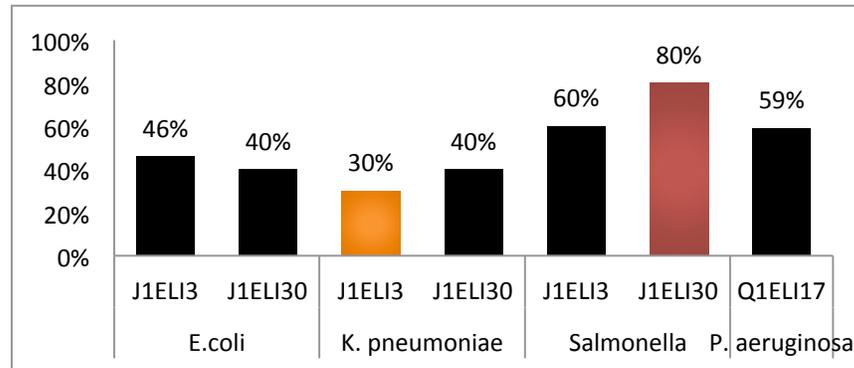


Figura 2. Actividad bactericida de bacterias Gram negativas frente antibióticos

Las bacterias Gram negativas, presentaron mayor resistencia a los extractos. Especies como *V. cholerae* o *Shigella sp.*, resultaron resistentes a la ampicilina, debido a las características propias de la pared y membrana celular de las bacterias Gram negativas, las cuales se encuentran conformadas por una doble estructura lipídica lo cual las hace más resistentes a algunos antibióticos, situación contraria a las bacterias Gram positivas. Se comprobó que *S. marcescens* (bacteria Gram negativa) fue la que presentara mayor sensibilidad a la ampicilina y estreptomina, coincidiendo con los estudios realizados por (Bax, et al., 2000).

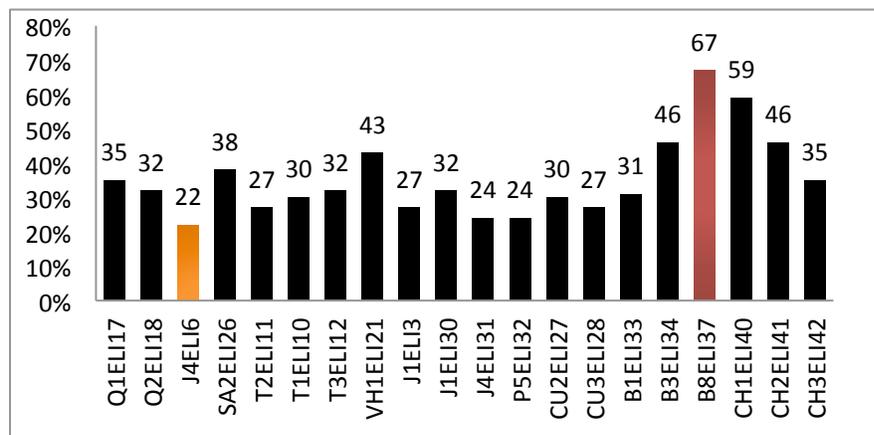
Se observó que no todos los extractos presentan una actividad marcada contra las bacterias probadas. Sin embargo, los extractos J1ELI3 y J1ELI30, presentaron una actividad bactericida del 80% y 60%, contra cepas de *E. coli*, *K. pneumoniae*, *S. marcescens* y *Salmonella sp*, como se muestra en la gráfica 1, lo anterior es

indicativo a la posible presencia de algún tipo de metabolito secundario con actividad bactericida. El extracto SA2ELI26, mostró una intensa actividad inhibitoria con todas las bacterias Gram positivas muestreadas, observándose halos de inhibición de color blanco, inclusive mayores a los halos desarrollados para el propio antibiótico, seguido del extracto Q1ELI17 con 59% contra *P. aeruginosa*, y el extracto J1ELI30 en un (40%) para las especies *E. coli* y *K. pneumoniae* el de menor efectividad. Cabe destacar que el poder inhibitorio de estos extractos contra las bacterias Gram positivas.



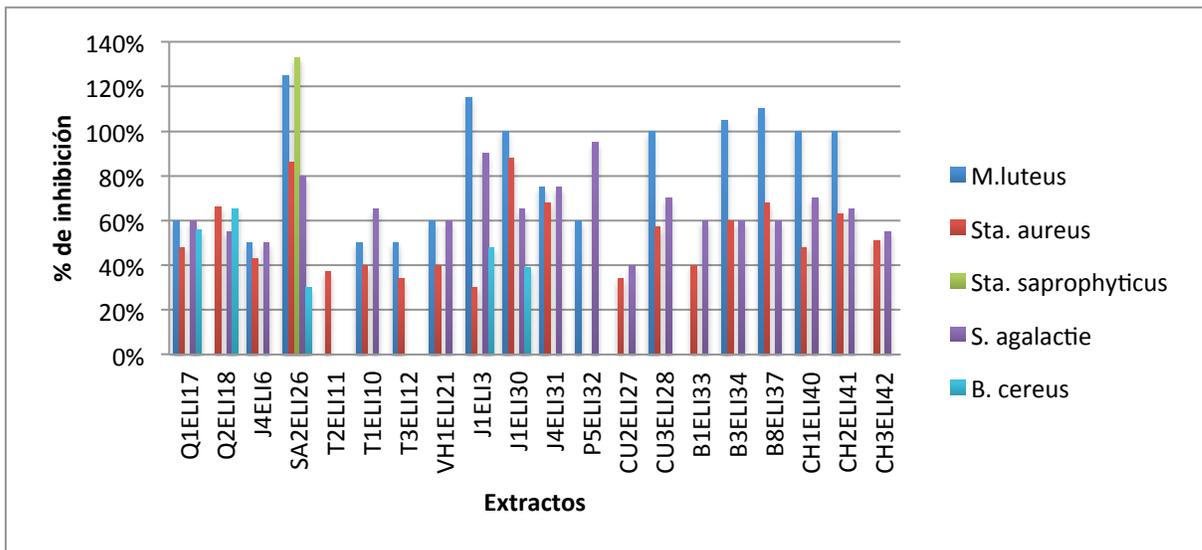
Gráfica 1. Porcentaje inhibitorio de extractos de *Bacillus sp* contra bacterias Gram negativas

De manera particular *S. marcescens*, fue la bacteria que presentó actividad para los veinte extractos, de acuerdo a lo denotado en la gráfica 2, siendo los extractos, B8ELI37 y CH1ELI40, los de mayor efecto inhibitorio (67% y 59%) respectivamente.



Gráfica 2. Porcentaje inhibitorio de extractos de *Bacillus sp.* contra *S. marcescens*

Para la inhibición de bacterias Gram positivas, los extractos que denotaron una efectividad por arriba del 100% contra dichas bacterias fueron el SA2ELI26 (133%), B8ELI37 (125%), J1ELI3 (115%) y B8ELI37, J1ELI3 con 105%, indicado en la gráfica 3. Lo anterior indica la capacidad que poseen dichas para inhibir a las bacterias mismas, debido a la presencia del sustrato genético adquirido propio de cada bacteria, desarrollando así una resistencia adquirida, misma que aparece por cambios puntuales en el DNA (mutación), en donde los genes que codifican las porinas bloquean el ingreso del antibiótico al interior del microorganismo.



Gráfica 3. Porcentaje de inhibición de bacterias Gram positivas en presencia de diversos extractos.

VI. Conclusiones

Se comprobó buena actividad bactericida en el 58% de los extractos analizados contra bacterias Gram positivas, con un porcentaje de efectividad mayor, de manera particular, para las especies *S. agalactie* y *Sta. aureus* .

Se comprobó la baja actividad bactericida de los extractos en estudio para bacterias Gram negativas, sin embargo, de las 13 especies en estudio, *S. marcenses* fue la única bacteria positiva para todos los extractos probados, demostrando así un excelente poder inhibitorio de los veinte extractos, para esta especie en particular.

VII. Referencias bibliográficas

1. Bax R, Mullan N, Verhoef J. (2000). The millennium bugs-the need for and Development of new antibacterials. *Int. J. Antimicrobiology. Agents* 16, 51-59.
2. Demain AL. (2009). Pharmaceutically active secondary metabolites of microorganisms. *Applied Microbiology and Biotechnology*, 52, 455-463
3. Demain AL, Fang A. (2011). The natural functions of secondary metabolites. *Adv Biochemistry English Biotechnology* 69, 1-39.
4. Hadacek F, Greger H. (2000). Testing of antifungal natural products: methodologies, comparability of results and assay choice. *Phytochemical Analysis Journal*, 11, 137-147.
5. Karlovsky P. (2008). Secondary metabolites in soil ecology. In: Karlovsky P (ed) *Soil biology*, vol 14. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, pp 1-19.
6. Luzhetskyy A., Pelzer S., Bechthold A. (2007). The future of natural products as a source of new antibiotics. *Current Opinion in Investigational Drugs*, 8: 608-613.
7. Sansinenea E. (2012). *Bacillus thuringiensis* biotechnology. Springer, Países Bajos.
8. Sansinenea E, Ortiz A. (2015). Secondary metabolites of soil *Bacillus spp.* *Biotechnology Letters* 33,1523-1538
9. Sistema de Gestión de Calidad según ISO 9001:2000

10. Stein T. (2005). *Bacillus subtilis* antibiotics: structures, syntheses and specific functions. *Molecular Microbiology* 56, 845–857.
11. Tenover F., Weigel L., Appelbaum P., (2004). Vancomycin-resistant *Staphylococcus aureus* isolate from a patient in Pennsylvania. *Antimicrobiology. Agents Chemother.* 48, 275-280.
12. Velusamy P, Gnanamanickam S. (2008). The Effect of Bacterial Secondary Metabolites on Bacterial and Fungal Pathogens of Rice. In: Karlowsky P (ed) *Soil biology*, vol 14. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, pp 93–106.

Panorama de los Sistemas de Control de Tráfico, el uso de Modelos de flujo de tráfico y obtención de diagrama fundamental de GREENSHIELDS en Matlab

M.T. Juan Roberto Hernández Garibay¹

M.T Ma. Hortensia Almaguer Cantú²

M.S.I. Juan Carlos Priego Azcuaga³

Resumen

El número de vehículos en el mundo se incrementa día con día ocasionando diversos problemas tales como congestión, contaminación, accidentes, consumo de combustible y otros derivados de ellos. El costo para tratar de resolver este problema y sus derivados por parte de los gobiernos es grande. En México y en particular en Tabasco se invierte en la creación y modificación de infraestructura además de la inversión usada en los problemas derivados de ellos tales como salud y otros.

Actualmente en el mundo para atacar el problema existen diversas tendencias, estrategias y premisas. Se apuesta a la investigación y al desarrollo tecnológico con una tendencia a la automatización y gestión de vías.

El estudio y desarrollo de modelos de tráfico para su aplicación en el desarrollo de algoritmos de simulación de estos problemas ayudará a reproducir su comportamiento y controlarlo permitiendo tener una plataforma lógica por debajo en cohesión con el desarrollo y uso de las nuevas tecnologías emergentes además del uso de redes telemétricas que ayudaran a la gestión del tráfico vehicular.

Introducción

El parque vehicular ha aumentado en el mundo y también los problemas relacionados que conlleva (accidentes, contaminación, gasto de combustible, infraestructura, otros).

Tan solo en los Estados Unidos de Norteamérica los índices del reporte anual de la movilidad urbana 2015 (2015 Urban Mobility Scorecard), menciona que las congestiones en 2014 utilizaron 6.9 billones de horas extras de viaje (2.1 billones de horas mas que en el reporte de 2010) y 3.1 billones de galones de combustible (1.2 billones de galones mas que en 2010) con un costo de 160 billones de dólares (Schrank, 2015).

En España el sector de transporte es el principal consumidor de energía final (un 42% del total, un 9% mayor que la media Europea), las emisiones del gas efecto invernadero en España son del 24% siendo superiores a la media Europea (20%), según el informe anual de la OTLE 2014 (Observatorio del Transporte y la Logística en España). Aunque los datos reflejan cantidades mayores a la media Europea, en España se registraron mínimos históricos de víctimas mortales por accidente en 2015 con respecto a 1960 con una tasa de mortalidad de 3.6 por cada 100,000 habitantes (en 1960 había 1 millón de vehículos y en 2015 el parque automovilístico supera los 31 millones) según datos mostrados por la DGT en su balance 2015.

En México el aporte en la contaminación de las ciudades por parte del sector transporte contribuye con 20.4% de la emisión de gases efecto invernadero de los cuales 16.2% proviene en su mayoría de viajes de transporte individual motorizado. En la ciudad de México el congestionamiento vial provoca una pérdida de 3.3 millones horas hombre al día de acuerdo al reporte Nacional de Movilidad Urbana en México 2014-2015 .

De acuerdo al anuario estadístico de accidentes en carreteras federales 2015 y con respecto a los accidentes a nivel nacional el estado de Tabasco junto con Durango, Sinaloa y Zacatecas sobresalen con una tasa de mortalidad de 22 muertes por cada 100, 000 habitantes, siendo la media de 13.3, así mismo Tabasco también destaca a nivel nacional con una tasa mayor al 55% en el que la velocidad es la principal causa de las colisiones.

Actualmente, la tendencia en la solución de tráfico tiene dos grandes vertientes: la construcción de nuevos sistemas viales, y la investigación, desarrollo y aplicación de nuevas tecnologías que permitan optimizar el uso de la infraestructura vial existente. En ambas vertientes la Simulación es una herramienta esencial en la búsqueda de soluciones.

Las tecnologías en desarrollo varían desde las semi automatizadas en las cuales mediante sensores se miden las condiciones de la vía, (tales como tráfico, atascos, etc,) y esta información se transmite y ofrece al conductor para una mejor toma de decisiones (esto involucra tecnologías de control, Software y Transmisión de datos para servicios de red, además de sistemas de radiodifusión).

También existen tecnologías de automatización completa que tienden a delegar el manejo del vehículo por parte de los conductores a un sistema de ordenadores que llevaran al usuario a su destino.

Los vehículos autónomos perciben el entorno mediante técnicas complejas como [láser](#), [radar](#), [sistema de posicionamiento global](#) y [visión computarizada](#).

Dos vehículos sin conductor en 1994 viajaron más de mil kilómetros en una autopista de [París](#) con tráfico intenso a una velocidad de 130 km/h, funcionaron de forma autónoma con pequeñas intervenciones. Demostraron que la conducción en carriles libres, en convoy y los cambios de carril a derecha e izquierda podían realizarse de forma autónoma.

En Estados Unidos de Norteamérica en el estado de Nevada se autorizó una ley que entró en vigor el 1 de marzo de 2012 que permite a los vehículos autónomos sin conductor circular por sus carreteras.

Antecedentes de modelos de tráfico

Las primeras mediciones de tráfico fueron realizadas por Greenshields publicadas en 1935, seguidos por los modelos propuestos por Lighthil y Whitman en 1955 en la Royal Society de Londres basado en dos premisas: la conservación del número de carros y la existencia de una ecuación de estado describiendo una relación entre el flujo de tráfico y la densidad de tráfico (Gazis, 2002).

Existen diversos modelos que describen el flujo de tráfico vehicular y existen diversas formas de clasificar a estos para su estudio, sin embargo, la forma mas básica de clasificación es la de modelos microscópicos y modelos macroscópicos.

Los modelos macroscópicos y sus variables describen datos de comportamiento global de una vía, requieren pocos parámetros, se enfocan en captar las

relaciones entre velocidad de los vehículos, flujo y densidad de tráfico. (Simi,2004) (Gómez,2004).

Los modelos microscópicos describen el comportamiento de los conductores individuales así como su reacción al medioambiente percibido. (Gómez, 2004). Trabajan con parámetros que describen el comportamiento en particular de cada vehículo bajo ciertas condiciones de vía.

Los modelos de microsimulación evolucionan con el tiempo y con resultados aleatorios. De ellos podemos mencionar car following y el modelo de automatización celular consistente con la teoría hidrodinámica (Daganzo, 1994).

El uso de ordenadores permite crear modelos de simulación en la gestión de tráfico que suministran estimaciones de efectos medibles que puedan dar información sobre el esquema de operación de sus componentes (Allsop,1985).

Por medio de la simulación podemos evaluar las consecuencias de diferentes cursos de acción en la gestión del tráfico.

Horowitz hace un resumen de los modelos básicos para simulación de acuerdo a una arquitectura de capas utilizada en el programa PATH (Horowitz, 2000). Como se puede ver en la **Tabla 1**, muestra un resumen de una variedad de modelos para los problemas de tráfico vehicular.

Capa	Funciones	Modelo
Red	Controla el tráfico entero y las rutas de flujo de tráfico dentro de la red AHS	Grafos Capacitados
Enlace	Calcula y distribuye planes de actividad (por ejemplo las rutas, maniobras a ser ejecutadas, velocidad, tamaño del Platoon) para cada tipo de vehículo en cada sección	Modelo de flujo de líquidos con control distribuido
Coordinación	Comunica y coordina con su contraparte y selecciona una maniobra a ser ejecutada	Maquina de estados finitos
Regulación	Ejecuta maniobras tales como uniones, separaciones, cambio de carril.	Leyes de retroalimentación basados en modelos lineales
Física	Desacople lateral y control longitudinal	Ecuaciones diferenciales no lineales de alto orden.

Tabla 1. Arquitectura de capas para vías automatizadas.

III.- Objetivos y Metas

El objetivo del presente trabajo es comprender y mostrar el área de oportunidad que existe en los sistemas de tráfico vehicular, sus modelos, algoritmos y programas; ejemplificando la madurez y capacidad de las herramientas de software actual para la implementación computacional de los modelos matemáticos que fundamentan el flujo de tráfico, por medio de la presentación del diagrama fundamental de Greenshields desarrollado en Matlab.

IV.- Materiales y Métodos

Se utiliza un modelo de Greenshields el cual observó el sistema vehicular registrando valores con una cámara fotográfica en una autovía de doble sentido, postulando una relación lineal entre velocidad y densidad de tráfico en la siguiente ecuación:

$$\text{Flujo} = \text{Densidad} * \text{Velocidad}$$

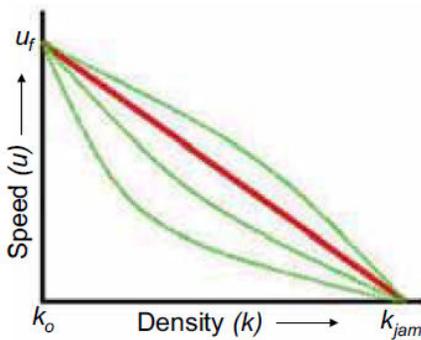
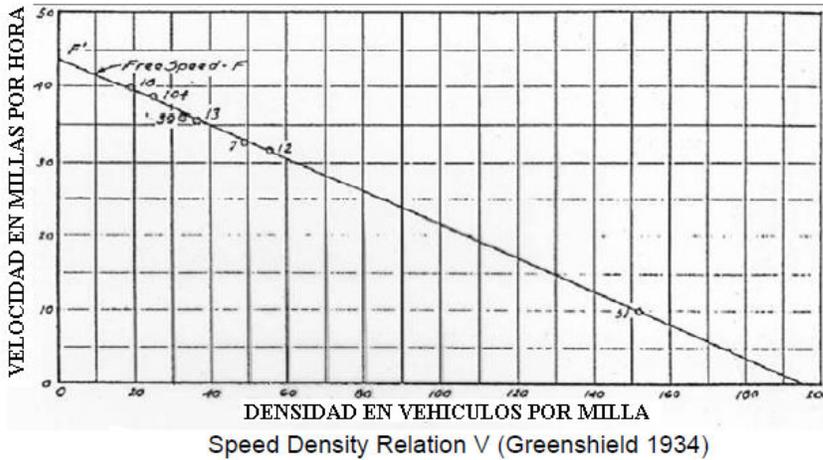
$$q = k * u_s$$

donde :

$$q = \text{Flujo de tráfico}$$

$$k = \text{Densidad}$$

$$u_s = \text{Velocidad}$$



Gráfica 1. Relación Velocidad-Densidad de GreenShields

Gráfica 2. Diagrama de

Esta relación se conoce como diagrama fundamental. Como podemos ver en la **Gráfica 1**, Greenshields encontró una relación de tipo lineal entre la velocidad y la densidad de tráfico. Sin embargo esta relación de tipo lineal se convertía a una relación de tipo parabólica cuando aumentaba la relación entre velocidad y flujo de tráfico, mostrado en la **Gráfica 2**.

Resultados

Se presenta el código que desarrollamos en Matlab, para la obtención del diagrama fundamental de Greenshields.

%Programa creado el 25 de febrero de 2017 en la búsqueda de la grafica del %diagrama fundamental basado en la ecuación de la velocidad deseada del

%modelo METANET con los valores de los datos de la tesis de Hegyi

%valores constantes

pcrit=33.5; %esta en vehículos/línea/km

am=1.867;

vfl=102;

p=0:120

%ecuación de la velocidad deseada

vd=vfl*(exp(((p/pcrit).^am)/(-am)))

%Obtención de q para poder graficar de acuerdo a la grafica 3.2 de Hegyi

%tomando solo un carril o lo que es lo mismo r=1

q=p.*vd

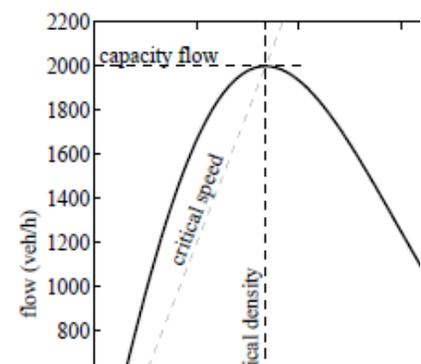
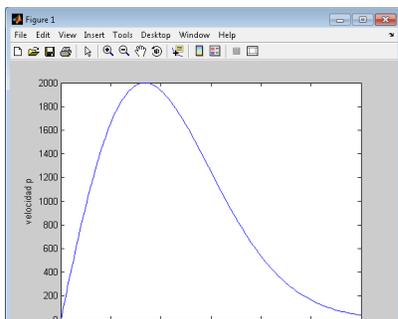
axis equal

plot(p,q)

xlabel ('densidad p')

ylabel ('velocidad p')

Los resultados mostrados por dicho algoritmo y la gráfica que obtuvimos nos permiten comparar con la obtenida del diagrama fundamental que Hegyi mostró en Model Predictive Control for Integrating Traffic Control Measures. En ella muestra la relación lineal de la velocidad crítica y la capacidad de flujo de una vía.



Gráfica 3. Resultados en Matlab

Gráfica 4. Diagrama Fundamental mostrado por Hegyi basado en la velocidad deseada

Discusión

Los modelos de tráfico juegan un papel importante actualmente en la investigación de tráfico tales como predicción de flujo de tráfico, detección de incidentes y control de tráfico (Bellemans,2002).

Existen modelos computacionales de simulación de tráfico que pueden ser clasificados como micro simuladores o macro simuladores y algunos de ellos manejan ambas características, además que podemos utilizar programas open GL y pseudocódigo.

El análisis de tráfico por medio de modelos macroscópicos y la descripción del comportamiento a través de sus variables, nos permitirá obtener valores para reproducir el diagrama fundamental Greenshields.

El programa desarrollado en Matlab no solo nos permite conocer y acercarnos a los fundamentos del comportamiento de tráfico vehicular en una determinada vía, sino que podemos partir al estudio de mas modelos de tráfico y su análisis particular en la región de Tabasco.

Conclusiones

El presente trabajo muestra que es factible reproducir el diagrama fundamental de Greenshields aplicando Matlab. Esto junto a las características de control que ofrece nos abre un abanico de posibilidades de estudio, análisis y aplicación de este modelo y de otros modelos, orientado a la solución de problemas de tráfico en el Estado.

Referencias

David Schrank, Bill Eisele, Tim Lomax; 2015 Urban Mobility Scorecard, The Texas A&M Transportation Institute and INRIX.

Otle Observatorio del transporte y la logística en España, Informe Anual de la OTLE 2014, División de Prospectiva y Tecnología del Transporte de la Secretaría General del Transporte

Balance seguridad vial 2015; Dirección General de Tráfico, Ministerio del Interior, Gobierno de España

ONU-Habitat, Grupo Mexicano de Parlamentarios para el Habitat; Reporte Nacional de Movilidad Urbana en México 2014-2015

Ana Cecilia Cuevas Colunga, Emilio Francisco Mayoral Grajeda, Alberto Mendoza Díaz; Anuario estadístico de accidentes en carreteras federales (2015); IMT, Instituto Mexicano del Transporte, Secretaría de Comunicaciones y Transportes; Documento Técnico No. 66

(Gazis, 2002) D. C. Gazis, 'The origins of traffic theory' , 2002, Operations Research informs pp 69-77.

András Hegyi; Model Predictive Control for Integrating Traffic Control Measures; The Netherlands TRAIL Research School

(Simi,2004) Cai, Simin, Ng Kiang Loong, " A critical analysis of the cell transmission model: a dynamic representation of highway traffic consistent with then hydrodynamic theory "; University Scholar Programe, Session 2004/2005.

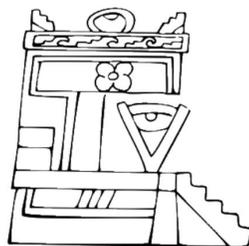
(Gómez,2004) Gabriel Gomez, Adolf May, and Roberto Horowitz, " Congested Freeway Microsimulation Model Using Vissim "; Journal of the transportation research board 1876, 2004.

(Bellemans,2002) T. Bellemans, B. De Schutter, and B. De Moor, "Models for traffic control"; Journal A, vol 43, pp. 13-22, 2002.

(Daganzo, 1994) Daganzo, "The cell transmission model: a dynamic representation of highway traffic consistent with the hydrodynamic theory"

(Allsop,1985) Richard Allsop, Juan Enrique Coeymans, "La gestion de tráfico : de la intuición a la simulación "; Revista Eure No.33, Vol. 2, Agosto 1985.

(Horowitz, 2000) Roberto Horowitz, Pravin Varaiya, 2000, " Control Design of an automated Higway System", IEEE proceedings of the IEEE, Vol. 88, No. 7, July 2000.



Difusión y Divulgación
Científica y Tecnológica

José Manuel Piña Gutiérrez
Rector

Raúl Guzmán León
Secretario de Investigación, Posgrado y Vinculación

Andrés González García
Director de Difusión y Divulgación Científica y Tecnológica

Calíope Bastar Dorantes
Jefa del Departamento Editorial de Publicaciones No Periódicas

Esta obra se terminó de editar el 31 de mayo de 2018, en la División Académica de Ciencias Básicas, ubicada en Km. 1, Carretera Cunduacán-Jalpa de Mendez, C.P. 86690, Cunduacán Tabasco. El cuidado estuvo a cargo de los coordinadores y del Departamento Editorial de Publicaciones No Periódicas de la Dirección de Difusión y Divulgación Científica y Tecnológica de la UJAT.