

Handbook T-I

Ingeniería y Ciencias Aplicadas

FIGUEROA-RAMÍREZ, Sandra Jazmín
PÉREZ-SARIÑANA, Bianca Yadira
FLORES-CHAN, José Enrique
SANTIS-ESPINOSA, Luis Fernando

Coordinadores

ECORFAN®

Coordinadores

FIGUEROA-RAMÍREZ, Sandra Jazmín

PÉREZ-SARIÑANA, Bianca Yadira

FLORES-CHAN, José Enrique

SANTIS-ESPINOSA, Luis Fernando

Editor en Jefe

VARGAS-DELGADO, Oscar. PhD

Directora Ejecutiva

RAMOS-ESCAMILLA, María. PhD

Director Editorial

PERALTA-CASTRO, Enrique. MsC

Diseñador Web

ESCAMILLA-BOUCHAN, Imelda. PhD

Diagramador Web

LUNA-SOTO, Vladimir. PhD

Asistente Editorial

TREJO-RAMOS, Iván. BsC

Traductor

DÍAZ-OCAMPO, Javier. BsC

Filóloga

RAMOS-ARANCIBIA, Alejandra. BsC

ISBN: 978-607-8695-69-0

Sello Editorial ECORFAN: 607-8695

Número de Control HCIM: 2021-12

Clasificación HCIM (2021): 311221-1012

©ECORFAN-México, S.C.

Ninguna parte de este escrito amparado por la Ley Federal de Derechos de Autor, podrá ser reproducida, transmitida o utilizada en cualquier forma o medio, ya sea gráfico, electrónico o mecánico, incluyendo, pero sin limitarse a lo siguiente: Citas en artículos y comentarios bibliográficos de compilación de datos periodísticos radiofónicos o electrónicos. Para los efectos de los artículos 13, 162,163 fracción I, 164 fracción I, 168, 169,209 fracción III y demás relativos de la Ley Federal de Derechos de Autor. Violaciones: Ser obligado al procesamiento bajo ley de copyright mexicana. El uso de nombres descriptivos generales, de nombres registrados, de marcas registradas, en esta publicación no implican, uniformemente en ausencia de una declaración específica, que tales nombres son exentos del protector relevante en leyes y regulaciones de México y por lo tanto libre para el uso general de la comunidad científica internacional. HCE es parte de los medios de ECORFAN (www.ecorfan.org)

Handbooks

Definición de Handbooks

Objetivos Científicos

Apoyar a la Comunidad Científica Internacional en su producción escrita de Ciencia, Tecnología e Innovación en las Áreas de investigación CONACYT y PRODEP.

ECORFAN-México, S.C. es una Empresa Científica y Tecnológica en aporte a la formación del Recurso Humano enfocado a la continuidad en el análisis crítico de Investigación Internacional y está adscrita al RENIECYT de CONACYT con número 1702902, su compromiso es difundir las investigaciones y aportaciones de la Comunidad Científica Internacional, de instituciones académicas, organismos y entidades de los sectores público y privado y contribuir a la vinculación de los investigadores que realizan actividades científicas, desarrollos tecnológicos y de formación de recursos humanos especializados con los gobiernos, empresas y organizaciones sociales.

Alentar la interlocución de la Comunidad Científica Internacional con otros centros de estudio de México y del exterior y promover una amplia incorporación de académicos, especialistas e investigadores a la publicación Seriada en Nichos de Ciencia de Universidades Autónomas - Universidades Públicas Estatales - IES Federales - Universidades Politécnicas - Universidades Tecnológicas - Institutos Tecnológicos Federales - Escuelas Normales - Institutos Tecnológicos Descentralizados - Universidades Interculturales - Consejos de CyT - Centros de Investigación CONACYT.

Alcances, Cobertura y Audiencia

Handbooks es un Producto editado por ECORFAN-México, S.C. en su Holding con repositorio en México, es una publicación científica arbitrada e indizada. Admite una amplia gama de contenidos que son evaluados por pares académicos por el método de Doble-Ciego, en torno a temas relacionados con la teoría y práctica de las Área de investigación CONACYT y PRODEP respectivamente con enfoques y perspectivas diversos, que contribuyan a la difusión del desarrollo de la Ciencia la Tecnología e Innovación que permitan las argumentaciones relacionadas con la toma de decisiones e incidir en la formulación de las políticas internacionales en el Campo de las Ciencias. El horizonte editorial de ECORFAN-México® se extiende más allá de la academia e integra otros segmentos de investigación y análisis ajenos a ese ámbito, siempre y cuando cumplan con los requisitos de rigor argumentativo y científico, además de abordar temas de interés general y actual de la Sociedad Científica Internacional.

Consejo Editorial

PERALTA - FERRIZ, Cecilia. PhD
University of Washington

PÉREZ - BUENO, José de Jesús. PhD
Loughborough University

QUINTANILLA - CÓNDOR, Cerapio. PhD
Universidad de Santiago de Compostela

PACHECO - BONROSTRO, Joaquín Antonio. PhD
Universidad Complutense de Madrid

TUTOR - SÁNCHEZ, Joaquín. PhD
Universidad de la Habana

PEREZ - Y PERAZA, Jorge A. PhD
Centre National de Recherche Scientifique

VITE - TORRES, Manuel. PhD
Czech Technical University

MARTINEZ - MADRID, Miguel. PhD
University of Cambridge

GARCÍA - RAMÍREZ, Mario Alberto. PhD
University of Southampton

GONZALEZ - ASTUDILLO, María Teresa. PhD
Universidad de Salamanca

Comité Arbitral

VILLASEÑOR - MORA, Carlos. PhD
Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo

IBARRA-MANZANO, Oscar Gerardo. PhD
Instituto Nacional de Astrofísica, Óptica y Electrónica

CARBALLO - SÁNCHEZ, Álvaro Francisco. PhD
Universidad Autónoma de Puebla

PÉREZ - TORRES, Roxana. PhD
Universidad Tecnológica del Valle de Toluca

SANABRIA - MONTAÑA, Christian Humberto. PhD
Instituto Politécnico Nacional

OROZCO - GUILLÉN, Eber Enrique. PhD
Instituto Nacional de Astrofísica Óptica y Electrónica

MARTÍNEZ - BRAVO, Oscar Mario. PhD
Instituto Nacional de Astrofísica, Óptica y Electrónica

PANTOJA - RANGEL, Rafael. PhD
Universidad de Guadalajara

REYES - RODRÍGUEZ, Aarón Víctor. PhD
Centro de Investigación y Estudios Avanzados

GARCÍA - GUERRERO, Enrique Efrén. PhD
Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada

Cesión de Derechos

El envío de una Obra Científica a ECORFAN Handbooks emana el compromiso del autor de no someterlo de manera simultánea a la consideración de otras publicaciones científicas para ello deberá complementar el Formato de Originalidad para su Obra Científica.

Los autores firman el Formato de Autorización para que su Obra Científica se difunda por los medios que ECORFAN-México, S.C. en su Holding México considere pertinentes para divulgación y difusión de su Obra Científica cediendo sus Derechos de Obra Científica.

Declaración de Autoría

Indicar el Nombre de 1 Autor y 3 Coautores como máximo en la participación de la Obra Científica y señalar en extenso la Afiliación Institucional indicando la Dependencia.

Identificar el Nombre de 1 Autor y 3 Coautores como máximo con el Número de CVU Becario-PNPC o SNI-CONACYT- Indicando el Nivel de Investigador y su Perfil de Google Scholar para verificar su nivel de Citación e índice H.

Identificar el Nombre de 1 Autor y 3 Coautores como máximo en los Perfiles de Ciencia y Tecnología ampliamente aceptados por la Comunidad Científica Internacional ORC ID - Researcher ID Thomson - arXiv Author ID - PubMed Author ID - Open ID respectivamente

Indicar el contacto para correspondencia al Autor (Correo y Teléfono) e indicar al Investigador que contribuye como primer Autor de la Obra Científica.

Detección de Plagio

Todas las Obras Científicas serán testeadas por el software de plagio PLAGSCAN si se detecta un nivel de plagio Positivo no se mandará a arbitraje y se rescindirá de la recepción de la Obra Científica notificando a los Autores responsables, reivindicando que el plagio académico está tipificado como delito en el Código Penal.

Proceso de Arbitraje

Todas las Obras Científicas se evaluarán por pares académicos por el método de Doble Ciego, el arbitraje Aprobatorio es un requisito para que el Consejo Editorial tome una decisión final que será inapelable en todos los casos. MARVID® es una Marca de derivada de ECORFAN® especializada en proveer a los expertos evaluadores todos ellos con grado de Doctorado y distinción de Investigadores Internacionales en los respectivos Consejos de Ciencia y Tecnología el homólogo de CONACYT para los capítulos de América-Europa-Asia-África y Oceanía. La identificación de la autoría deberá aparecer únicamente en una primera página eliminable, con el objeto de asegurar que el proceso de Arbitraje sea anónimo y cubra las siguientes etapas: Identificación del ECORFAN Handbooks con su tasa de ocupamiento autoral - Identificación del Autores y Coautores- Detección de Plagio PLAGSCAN - Revisión de Formatos de Autorización y Originalidad-Asignación al Consejo Editorial- Asignación del par de Árbitros Expertos-Notificación de Dictamen-Declaratoria de Observaciones al Autor-Cotejo de la Obra Científica Modificado para Edición-Publicación.

Ingeniería y Ciencias Aplicadas

Volumen I

El Handbook ofrecerá los volúmenes de contribuciones seleccionadas de investigadores que contribuyan a la actividad de difusión científica de la Universidad Autónoma del Carmen en sus áreas de investigación en Ingeniería. Además de tener una evaluación total, en las manos de los directores de la Universidad Autónoma del Carmen se colabora con calidad y puntualidad en sus capítulos, cada contribución individual fue arbitrada a estándares internacionales (RESEARCH GATE, MENDELEY, GOOGLE SCHOLAR y REDIB), el Handbook propone así a la comunidad académica, los informes recientes sobre los nuevos progresos en las áreas más interesantes y prometedoras de investigación en Ingeniería.

FIGUEROA-RAMÍREZ, Sandra Jazmín
PÉREZ-SARIÑANA, Bianca Yadira
FLORES-CHAN, José Enrique
SANTIS-ESPINOSA, Luis Fernando

Coordinadores

Ingeniería y Ciencias Aplicadas T-I

Handbooks

Universidad Autónoma del Carmen – México.

Diciembre, 2021

DOI: 10.35429/H.2021.12.1.1.96

Resumen

Pages, Patiño, Flores y Martínez analizan las propiedades estructurales y magnéticas de grafeno con ferritas de cobalto; *Ramírez, Patiño, Mandujano y Martínez* presentan un estudio DFT de la interacción estructural de láminas de grafeno y óxido de grafeno con ferritas de níquel; *López, Flores, Sierra y Mesa* innovan en la implementación de un sensor LDV para la determinación de velocidad de un fluido bajo el régimen laminar; *Queb, Ruiz, Canedo y Flores* presentan una identificación de la fuente de hidrocarburos aromáticos policíclicos persistentes en un núcleo de sedimento del sistema fluvio lagunar Atasta-Pom; *Luna, Flores, López y De La Cruz* presentan la construcción de un sistema de velocimetría láser Doppler con un sensor dieléctrico de fibras ópticas; *Benítez, Ramírez, Anguebes y Aguilar* analizan la concentración de metales pesados en suelos de la península de Atasta, Campeche; *Lara, Meza, Martínez y Patiño* revisan la caracterización del composite vermiculita+BaCl₂ para refrigeración solar; *Hernández, Silva, Patiño y Palemón* revisan el sistema de adquisición de temperatura para diferentes profundidades de suelo en Ciudad del Carmen Campeche.

*Figuroa-Ramírez, Sandra Jazmín
Pérez-Sariñana, Bianca Yadira
Flores-Chan, José Enrique
Santis-Espinosa, Luis Fernando*

Coordinadores

Contenido	Pág.
1 Propiedades estructurales y magnéticas de grafeno con ferritas de cobalto PAGES-PACHECO, Ángeles Yolanda, PATIÑO-CARACHURE, Cristóbal, FLORES-GIL, Aaron y MARTÍNEZ-VARGAS, Sergio	1-12
2 Estudio DFT de la interacción estructural de láminas de grafeno y óxido de grafeno con ferritas de níquel RAMIREZ-AGUILAR, José Carlos, PATIÑO-CARACHURE, Cristóbal, MANDUJANO-RAMIREZ, Humberto Julián y MARTINEZ-VARGAS, Sergio	13-25
3 Implementación de un sensor LDV para la determinación de velocidad de un fluido bajo el régimen laminar LÓPEZ-RODRÍGUEZ, José del Carmen, FLORES-GIL, Aarón, SIERRA-GRAJEDA, Juan y MESA-CRUZ, Onésimo	26-35
4 Identificación de la fuente de hidrocarburos aromáticos policíclicos persistentes en un núcleo de sedimento del sistema fluviolagunar Atasta-Pom QUEB-SUÁREZ, José Emilio, RUIZ-MARÍN, Alejandro, CANEDO-LÓPEZ, Yunuen y FLORES-TRUJILLO, Juan Gabriel	36-48
5 Construcción de un sistema de velocimetría láser Doppler con un sensor dieléctrico de fibras ópticas LUNA-REYES, Martha María, FLORES-GIL, Aarón, LÓPEZ-RODRÍGUEZ, José del Carmen y DE LA CRUZ-MAY, Lelio	49-55
6 Concentración de metales pesados en suelos de la península de Atasta, Campeche BENÍTEZ-PINEDA, Paulo Alberto, RAMÍREZ-ELÍAS, Miguel Ángel, ANGUEBES-FRANSESCHI, Francisco y AGUILAR-UCÁN, Claudia Alejandra	56-68
7 Caracterización del composite vermiculita+BaCl₂ para refrigeración solar LARA-LUNA, Rubén Jayim, MEZA-CRUZ, Onésimo, MARTINEZ-TEJEDA, Francisco Christian y PATIÑO-CARACHURE, Cristóbal	69-77
8 Sistema de adquisición de temperatura para diferentes profundidades de suelo en Ciudad del Carmen Campeche HERNÁNDEZ-HERNÁNDEZ, Marco Antonio, SILVA-MARTÍNEZ, Walter Ariel, PATIÑO-CARACHURE, Cristóbal y PALEMON-ARCOS, Leonardo	78-96

Capítulo 1 Propiedades estructurales y magnéticas de grafeno con ferritas de cobalto

Chapter 1 Structural and magnetic properties of graphene with cobalt ferrites

PAGES-PACHECO, Ángeles Yolanda†, PATIÑO-CARACHURE, Cristóbal, FLORES-GIL, Aaron y MARTÍNEZ-VARGAS, Sergio

Universidad Autónoma del Carmen, Facultad de Ingeniería, Campus III, Avenida Central S/N, Esq. con Fracc. Mundo Maya, C.P. 24115, Ciudad del Carmen, Campeche, México.

ID 1^{er} Autor: *Ángeles Yolanda, Pagés-Pacheco* / **ORC ID:** 0000-0003-4535-7161, **CVU CONACYT ID:** 1005832

ID 1^{er} Coautor: *Cristóbal, Patiño-Carachure* / **ORC ID:** 000-0002-1436-1259, **CVU CONACYT ID:** 226327

ID 2^{er} Coautor: *Aaron, Flores-Gil* / **ORC ID:** 0000-0002-2302-2056, **CVU CONACYT ID:** 121166

ID 3^{er} Coautor: *Sergio, Martínez-Vargas* / **ORC ID:** 0000-0003-4605-0557, **CVU CONACYT ID:** 100782

DOI: 10.35429/H.2021.12.1.1.12

A. Pagés, S. Martínez, C. Patiño y A. Flores

* 060803@mail.unacar.mx

S. Figueroa, B. Pérez, J. Flores, L. Santis. (AA. VV.) Ingeniería y Ciencias Aplicadas. Handbooks-©ECORFAN-México, Campeche, 2021.

Resumen

En el presente trabajo se realizó un estudio exploratorio computacional a través de la teoría de funcionales de la densidad (DFT) de los efectos estructurales del grafeno, al incorporar óxidos de hierro (Fe_3O_4) y diversas geometrías (conformaciones) de la estructura de la ferrita de cobalto (CoFe_2O_4) sobre láminas de grafeno de diferentes dimensiones prístino y modificado con defectos (vacantes), que permitan generar nanomateriales a base de grafeno con propiedades magnéticas. Los cálculos fueron realizados empleando funcionales híbridos B3LYP y PBE0, realizándolos de manera escalonada, partiendo de las estructuras más sencillas y de menor tamaño hasta alcanzar sistemas con mayor número de átomos. Se encontró que los nanocompuestos formados por una lámina de grafeno con defecto tipo vacante y óxido ferroso u óxido férrico generaron estructuras más estables, comparadas con las estructuras con el grafeno prístino. En ambos casos se observó que el Fe ocupó la posición del carbono en el sitio vacante del grafeno, confiriéndole mayor estabilidad a la estructura. También, se estudió la interacción de la ferrita de cobalto en distintas conformaciones con una lámina de grafeno prístino; los cálculos computacionales demostraron que es viable la formación de un nanocompuesto estabilizado por fuerzas de van der Waals y dipolo-dipolo inducido. Este estudio brindó una base teórica sólida que permite interpretar y explicar las diversas características estructurales y propiedades que potencialmente presentaría este nanocompuesto.

Nanocompuesto magnético, CoFe_2O_4 , Grafeno, DFT

Abstract

In the present work, an exploratory computational study was carried out through the density functional theory (DFT) of the structural effects of graphene, by incorporating iron oxides (Fe_3O_4) and various geometries (conformations) of the ferrite structure of cobalt (CoFe_2O_4) on pristine and modified graphene sheets of different dimensions with defects (vacant), which allow the generation of graphene-based nanomaterials with magnetic properties. The calculations were carried out using hybrid functionalities B3LYP and PBE0, carried out in a staggered manner, starting from the simplest and smallest structures until reaching systems with a greater number of atoms. It was found that nanocomposites formed by a graphene sheet with a vacant type of defect and ferrous oxide, or ferric oxide generated more stable structures, compared to the structures with pristine graphene. In both cases, it was observed that Fe occupied the position of carbon in the vacant site of graphene, conferring greater stability to the structure. Also, the interaction of cobalt ferrite in different conformations with a pristine graphene sheet was studied; The computations showed that the formation of a stabilized nanocomposite by van der Waals forces and induced dipole-dipole is viable. This study provided a solid theoretical basis that allows us to interpret and explain the various structural characteristics and properties that this nanocomposite would potentially present.

Magnetic composite, CoFe_2O_4 , Graphene, DFT

1.1 Introducción

Los materiales magnéticos se han posicionado como un valioso campo de interés científico-tecnológico, sobre todo en la fabricación e investigación de materiales magnéticos nanoestructurados (Jeevanandam *et al.*, 2018). Recientemente, la necesidad de nuevas funciones específicas ha impulsado al incremento en la investigación y desarrollo de nuevos materiales, en consecuencia, los materiales híbridos multifuncionales se han convertido en un nuevo tipo de plataforma polivalente, que tiene aplicaciones muy importantes en una amplia gama de aplicaciones (Nasrollahzadeh *et al.*, 2019; Povolotskaya *et al.*, 2015). Así mismo, el grafeno ha atraído, cada vez más, la atención de los investigadores, debido a sus extraordinarias propiedades electrónicas, mecánicas, entre otras. Sin embargo, el comportamiento casi inerte y no magnético del grafeno puro lo hace inadecuado para aplicaciones que requieran propiedades magnéticas, por lo que se sugieren diferentes métodos para solucionar este problema como (*Tipsawat et al.*, 2018): creación de defectos en la estructura cristalina del grafeno (vacantes) o sustituyendo los átomos de carbono con metales de transición, este último es una buena forma de conferirle un comportamiento magnético, el hecho de dopar el grafeno con metales de transición como Fe, Co y Ni (Cortés-Arriagada & Villegas-Escobar, 2017) promueven en la estructura el mejoramiento de sus propiedades; las investigaciones han demostrado que la presencia de átomos magnéticos da como resultado un orden ferromagnético.

La incorporación de diferentes tipos de nanopartículas de materiales cerámicos y específicamente óxido de hierro, es de gran interés científico y tecnológico porque ambos materiales poseen interesantes propiedades electrónicas y magnéticas respectivamente (Ji *et al.*, 2016). La ferrita de cobalto es un óxido mixto de hierro cuya fórmula química es CoFe_2O_4 que comúnmente posee un comportamiento ferrimagnético (Tabit *et al.*, 2018). La interacción entre la estructura del grafeno y la de la estructura de espinela inversa que posee la ferrita de cobalto son relevantes para determinar las propiedades y el desempeño de éste nanocompuesto, por lo que agregar nuevos grupos funcionales para el grafeno es un paso importante para dirigir sus aplicaciones, pretendiendo evaluar la viabilidad de funcionalizar láminas de grafeno 2D con materiales ferromagnéticos en nanoescala.

Con ayuda de herramientas computacionales se puede describir tanto la dinámica de los núcleos como de los electrones por la teoría cuántica, y en este contexto, las propiedades físicas y químicas de los nanocompuestos propuestos además de explicar o predecir el comportamiento de las moléculas, y su interacción como parte de un sistema basado en el desarrollo de habilidades matemáticas y métodos numéricos (Cortés-Arriagada & Villegas-Escobar, 2017). La principal herramienta siempre ha sido la teoría cuántica, siendo la teoría funcional de la densidad (DFT) uno de los métodos más utilizados en el cálculo cuántico de la estructura electrónica de la materia, en el que la función de la energía de los electrones se minimiza en relación con la densidad de electrones (Baseden & Tye, 2014), proporcionando información cualitativa y cuantitativa sobre la estructura y propiedades de los materiales de estudio (Boustani, 2020).

En este trabajo, se investigan los efectos estructurales, geométricos y energéticos al incorporar moléculas simplificadas de óxido de hierro (FeO y Fe_2O_3) y ferritas de cobalto (CoFe_2O_4) con el fin de explorar su interacción con una lámina de grafeno, para conseguir nanocompuestos magnéticos con influencia electrónica y magnética que aportan ambas sustancias. Se estudian estructuras optimizadas a partir de cálculos computacionales basados en DFT. La incorporación de los óxidos metálicos podría modificar las propiedades del grafeno al presentar un comportamiento magnético correspondiente a las contribuciones magnéticas y estructurales al integrar estos óxidos metálicos al grafeno.

1.2 Metodología a desarrollar

1.2.1 Construcción general de la lámina de grafeno

La geometría del grafeno es simple y regular, y la estructura plana infinita fue creada fácilmente tomando una sola capa de la estructura cristalina del grafito. Se consideraron secciones bien delimitadas con los bordes definidos, enlazando átomos de hidrógenos a los carbonos de los bordes para satisfacer su valencia 4 (Vijayaraghavan & Iliut, 2017). Se usó el software Material Studio versión 4.3 para construir la estructura ideal de una lámina de grafeno partiendo del grafito y aplicando los parámetros cristalográficos. Se construyó a partir de un templete con los parámetros de red y el grupo espacial correspondiente. Posteriormente, se eliminaron las capas o laminas extras para conservar solo una de ellas y finalmente, se construyó una súper celda que dio como resultado una lámina de mayores dimensiones.

1.2.2 Métodos computacionales

Los cálculos realizados están basados en la teoría funcional de la densidad (DFT), utilizando los métodos de pseudopotencial autoconsistente, implementando un código en el software Orca 4.0, a través de la interfaz gráfica Gabedit 2.5.0, el cual es una herramienta de usuario para este tipo de paquetes químicos computacionales. De acuerdo con estudios previos de cálculos computacionales basados en ferritas de cobalto se decidió simplificar el sistema molecular comenzando simplemente con óxido ferroso (Fe=O) como una simplificación de la ferrita de cobalto CoFe_2O_4 , para reducir considerablemente el tiempo del cálculo computacional (Ostovari *et al.*, 2018). El cálculo de estos sistemas se realizó en base a un análisis comparativo entre dos tipos de métodos de los funcionales híbridos B3LYP y PBE0 (Robles & Manzanilla, 2020), ambos con una base 6/31G y una multiplicidad de spin de 1. Para incrementar un poco la complejidad en la estructura se estudió la incorporación de una molécula de óxido férrico (Fe_2O_3). Sin embargo, debido a la dificultad y carga computacional se procedió a reducir la molécula a la mitad para facilitar el cálculo de la estructura. Todas las estructuras se estudiaron a una distancia promedio de 2.5 Å entre los átomos más cercanos de la lámina de grafeno y el óxido férrico.

Para las estructuras de las ferritas de cobalto y la lámina del grafeno, se decidió hacer un análisis por separado para posteriormente obtener una geometría adecuada, acercando una a la otra para poder analizar mejor el comportamiento de interacción entre ambas. El cálculo de estas geometrías se realizó utilizando PBE0/3-21G. Esta elección se basó en que el funcional PBE0 se ha utilizado ampliamente para estudiar la interacción del grafeno dopado (LIU *et al.*, 2019), principalmente debido a que proveen la mejor relación teórica-experimental y costo computacional. Además, se estudiaron 6 conformaciones estructurales de la ferrita de cobalto.

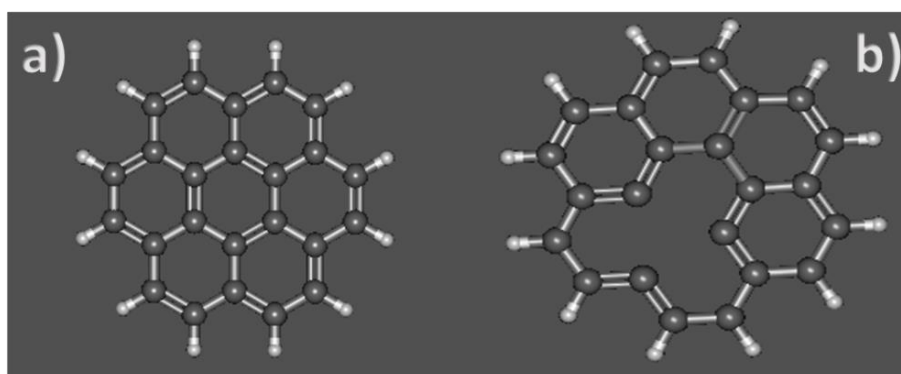
1.3 Resultados

Los estudios realizados en DFT de estos nanocompuestos permitieron examinar y analizar el efecto de la presencia de las diferentes estructuras cristalinas de FeO, Fe₂O₃ y CoFe₂O₄ en presencia de láminas de grafeno de diversas dimensiones. Fueron obtenidas las estructuras individuales, a las cuales se les pudo determinar las distancias de enlace intermoleculares y las energías resultantes de las interacciones entre ambas moléculas.

1.3.1 Nanocompuesto de grafeno-FeO

Partiendo de una lámina de grafeno saturada con átomos de hidrógeno enlazados a los carbonos terminales de los bordes con dimensiones de C₂₄H₁₂ (L1 en la figura 1.1a) se obtuvo un análisis comparativo de la geometría y dimensiones de la lámina de grafeno pristino y con una imperfección (hueco o vacante) (Zhou *et al.*, 2017) modificando el anillo bencénico central de la lámina (L2 en la figura 1.1b).

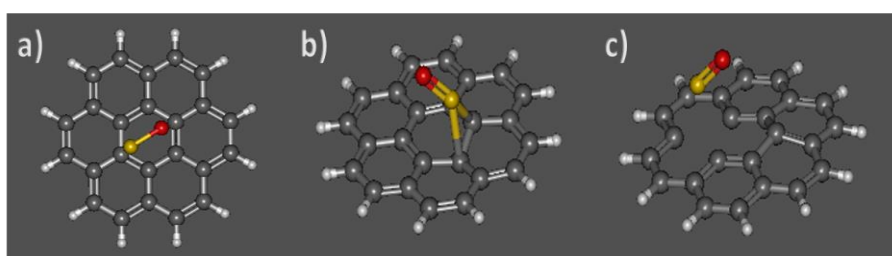
Figura 1.1 Láminas de grafeno (las esferas grises representan al carbono y las blancas al hidrogeno): a) lámina pristina (L1), b) lámina con una vacante (L2)



Fuente: (Elaboración propia)

Después, se estableció un estudio exploratorio para investigar los efectos producidos por la interacción con el óxido de ferroso (Fe=O), el cual se colocó en el centro de la lámina de grafeno L1 y L2 a una distancia inicial de 2.5 Å obteniendo las Estructuras 1, 2 y 3 (Figura 1.2). Los cambios en la geometría y las propiedades del nanocompuesto fueron analizados en términos de la relación de interacción Fe/C que se ve reflejada en los resultados geométricos.

Figura 1.2 Estructuras propuestas: a) FeO paralelo al grafeno (Estructura 1), b) FeO perpendicular al grafeno (Estructura 2) y c) FeO paralelo a grafeno con una vacante (Estructura 3)



Fuente: (Elaboración propia)

El estudio exploratorio y comparativo de las estructuras estudiadas computacionalmente se basó en los tres modelos distintos de las láminas de grafeno de una misma dimensión y con defectos en su superficie. Fueron analizadas las interacciones intermoleculares resultantes entre estas láminas de grafeno y la molécula de Fe=O (ver Figura 1.2). Las estructuras de estos nanocompuestos formados con cada uno de los defectos en las láminas de grafeno fueron optimizadas para evaluar el comportamiento del Fe=O frente a la lámina de grafeno modificada; y determinar la conformación más estable que permita generar un nanomaterial a base de grafeno con propiedades magnéticas.

En la Tabla 1.1 se presentan las energías y distancias obtenidas. Al analizar los nanocompuestos 1, 2 y 3 y haciendo un comparativo entre los resultados obtenidos con los funcionales B3LYP y PBE0 estudiados se observaron menores energías al usar la teoría B3LYP. Sin embargo, los niveles de energía entre las estructuras 1 y 2 presentaron valores muy cercanos; mientras que la estructura 3, la cual presenta una vacante, destacó al ser la que obtuvo los niveles de energías más bajos, resultando ser el nanocompuesto más estable. Al analizar las distancias intermoleculares entre la lámina de grafeno y la estructura de óxido de hierro, los cálculos usando el funcional PBE0 generaron la estructura con las distancias de menor longitud con relación a ambas (láminas de grafeno y Fe=O), concordando con los resultados de energía. Por lo tanto, fue posible afirmar que ambos funcionales de la densidad son apropiados para optimización de estas estructuras, destacando la estructura 3, la cual se compone de la lámina de grafeno que posee un defecto tipo vacante, dando como resultado una geometría cuya interacción con el Fe=O la convierte en la estructura más estable obtenida, lo que concuerda con los resultados obtenidos en (Thivasasith *et al.*, 2015). Además, esto generó una estructura del grafeno más reactiva, logrando así obtener una estructura en la cual puede presumir que posee propiedades magnéticas por la presencia de la ferrita.

Tabla 1.1 Energías y distancias calculados para el nanocompuesto Grafeno-FeO

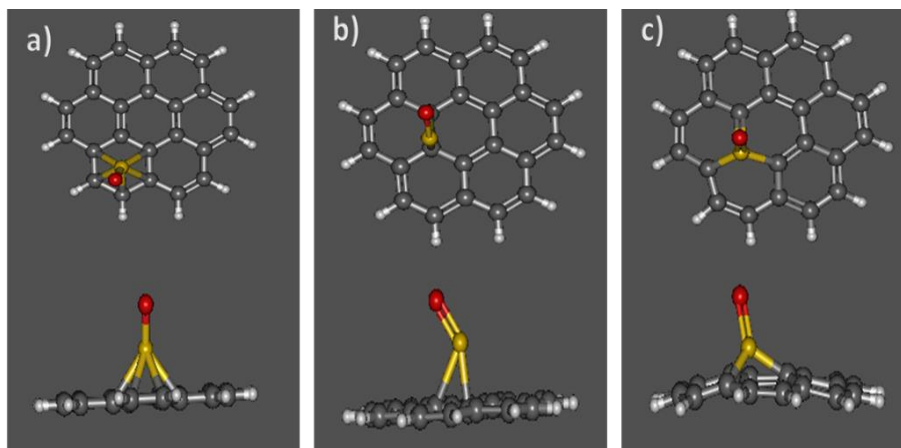
Método	Estructura 1			Estructura 2			Estructura 3		
	Angulo diedro	Energía (kcal/kmol)	Distancia más corta entre el FeO y L1 (Å)	Angulo diedro	Energía (kcal/kmol)	Distancia más corta entre el FeO y L1 (Å)	Angulo diedro	Energía (kcal/kmol)	Distancia más corta entre el FeO y L2 (Å)
B3LYP	179.1540	-2259.6971	2.0262	177.8513	-2259.6453	2.0231	136.63142	-2221.5185	1.7921
PBE0	179.4001	-2259.0085	1.9941	167.4210	-2258.9506	1.9793	134.9557	-2220.8347	1.7703

Fuente: (Elaboración propia)

Adicionalmente, ambos funcionales B3LYP y PBE0 empleados generaron prácticamente el mismo comportamiento geométrico y energético, con respecto a las interacciones intermoleculares resultantes de las estructuras estudiadas en cualquiera de los 3 casos presentados (ver Figura 3), la estructura 1 y 2 no mostraron alguna deformación en la lámina al interactuar con Fe=O. Sin embargo, la estructura 3 presentó una considerable distorsión de la lámina de grafeno, exhibiendo una fuerte interacción intermolecular tipo Van der Waals dipolo-dipolo inducido entre el metal deficiente de electrones (Fe) y el sitio vacante de la lámina de grafeno (abundante densidad electrónica).

Los cambios presentados en la geometría final de los nanocompuestos formados en el átomo de Fe que compone a la molécula de Fe=O muestra la tendencia de acercarse al centro de un anillo bencénico cercano a al borde de la lámina de grafeno junto a los átomos de H, mostrando una mayor interacción entre ambas estructuras, ver la Figura 1.3a). En la Figura 1.3b) se observa una interacción más sencilla, con la molécula de Fe=O posicionada a un costado del anillo bencénico central de la lámina de grafeno, donde existen enlaces sencillos. Finalmente, en la Figura 1.3 c), que resultó ser la estructura más estable, se unió el átomo de Fe a los 3 átomos de carbono vecinos en una configuración cruzada muy cercana al sitio vacante del grafeno, el Fe se desplazó por encima del plano de la lámina de grafeno donde las longitudes de enlace Fe-C dependen de las fuerzas de repulsión de Coulomb, misma que provocó la distorsión de la lámina como se menciona en (Impeng *et al.*, 2014). La presencia de las imperfecciones de la lámina de grafeno generó la mayor estabilidad energética en la estructura del nanocompuesto; no obstante, la considerable distorsión resultante del nanocompuesto, podría generar una posible fractura del nanomaterial, disminuyendo sus propiedades mecánicas características del grafeno.

Figura 1.3 Estructuras optimizadas de las láminas de grafeno en presencia de FeO

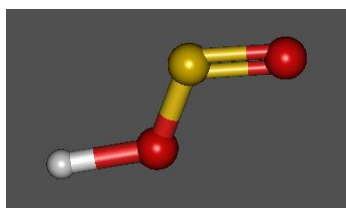


Fuente: (Elaboración propia)

1.3.2 Nanocompuesto de grafeno- Fe_2O_3

La conformación del FeO mostrada en la Figura 1.4 se incorporó a la lámina del grafeno tratando de optimizar la distancia entre el átomo de Fe del óxido férrico y el centro de la lámina de grafeno.

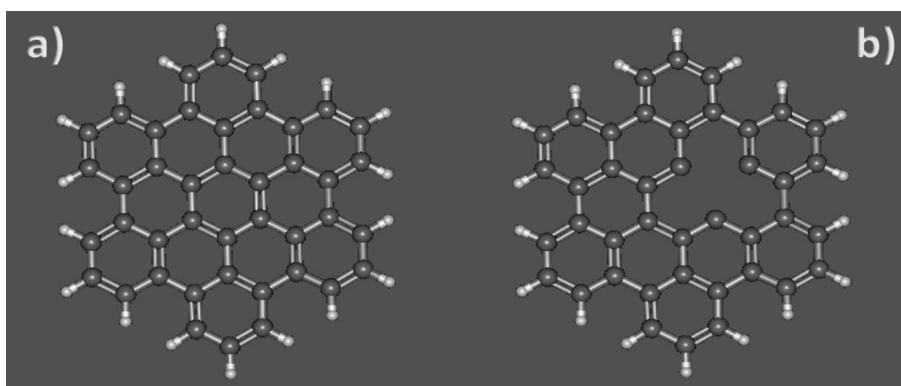
Figura 1.4 Conformación propuesta de FeO_2H que simplifica a Fe_2O_3 (Fe-Amarrillo, Oxígeno-Rojo, Hidrógeno-Blanco)



Fuente: (Elaboración propia)

A su vez, se seleccionó la configuración estructural para alcanzar la mejor optimización del $\text{Fe}=\text{O}$ con respecto a la lámina de grafeno simétricamente circular que incluye 13 anillos bencénicos con sus correspondientes átomos de hidrógeno alrededor de su perímetro (Figura 1.5a). La presencia de la imperfección de tipo vacante de un átomo de carbono en la lámina de grafeno de mismas dimensiones (Figura 1.5b) mostró interacciones intermoleculares generadas entre el FeO y el grafeno, modificado a partir de un estudio exploratorio, además de presentar geometrías adecuadas para la generación de nuevas propiedades basadas en sus características geométricas, las cuales fueron propuestas por (Kharissova *et al.*, 2016).

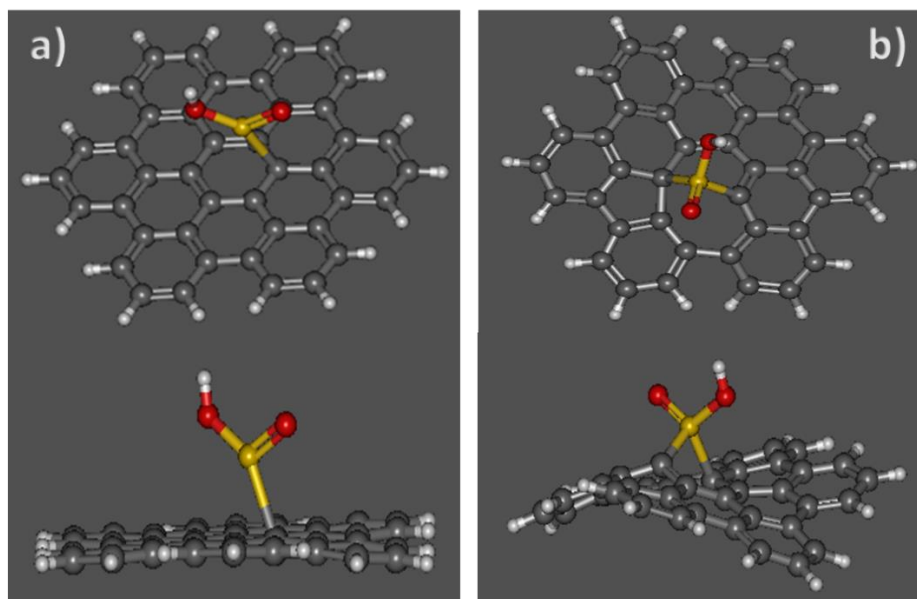
Figura 1.5 Láminas de grafeno propuestas: a) Lámina original (L1) y b) Lámina con vacante (L2)



Fuente: (Elaboración propia)

Respecto a los cálculos realizados con el funcional B3LYP de las estructuras de láminas de grafeno prístino y con vacante, a los cuales se les incorporó el FeO con el propósito de hacer un estudio exploratorio, se buscó la mejor interacción entre ambas estructuras y se analizaron las variaciones que presentan estas estructuras con láminas de mayores dimensiones.

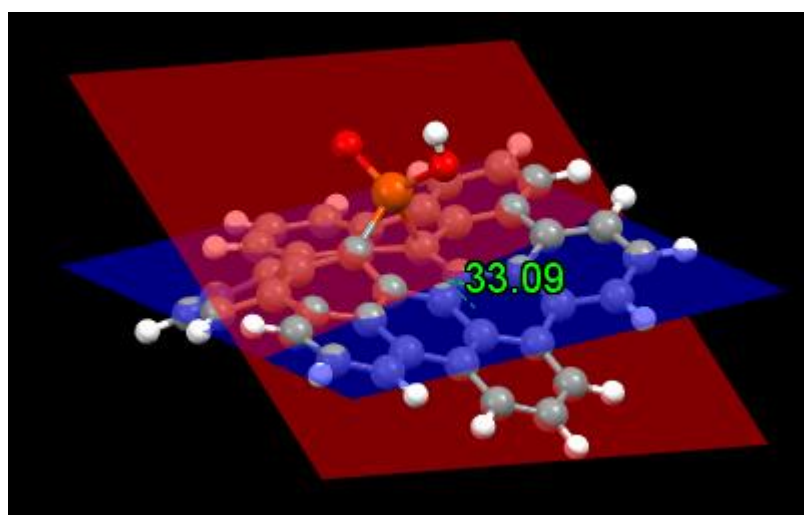
Figura 1.6 Estructuras optimizadas de las láminas de grafeno y el FeO₂H



Fuente: (Elaboración propia)

En la Figura 1.6a se observa la interacción de la lámina de grafeno prístino con el FeO₂H, con el átomo de Fe más cercano a la lámina de grafeno, el cual se unió a un átomo de carbono del anillo bencénico central, sin afectar la geometría de la lámina, conservando su geometría. En la lámina de grafeno con imperfección, a la cual se le eliminó un átomo de carbono, la distorsión de la lámina de grafeno fue mayor al incorporar el óxido férrico (Figura 1.6b). El átomo de Fe ocupó el espacio vacante del carbono en la lámina, la lámina de grafeno se distorsionó drásticamente como en el caso anterior a la estructura de la Fig 3c, a pesar de que las dimensiones en la lámina son mayores (Figura 1.7) debido al acercamiento de los átomos durante la interacción se redujo su distancia intermolecular, haciendo aún más evidente la distorsión de la lámina.

Figura 1.7 Ángulo de torsión dihedral correspondiente a las láminas de grafeno en presencia de FeO₂H



Fuente: (Elaboración propia)

Los resultados obtenidos a través de los cálculos computacionales describen aún mejor el comportamiento presentado en la Tabla 1.2, la cual muestra que la estructura del nanocompuesto, cuya lámina de grafeno presenta un defecto vacante, obtuvo los niveles de energía más bajos, en contraste con el grafeno prístino. Además, las interacciones moleculares resultaron más fuertes, observándose distancias más pequeñas con respecto a la estructura con la lámina del grafeno prístino, creando una estructura más estable. Descubriendo que independientemente del tamaño de la lámina de grafeno, al incorporar una imperfección de tipo vacante se crea una geometría distorsionada pero más estable (de menor energía), adecuada para el diseño de este tipo de nanocompuestos, mostrando una fuerte interacción del grafeno con el óxido metálico. Esto puede ser útil para el mejoramiento y creación de materiales con propiedades magnéticas, concordando con los resultados obtenidos por (Kharissova *et al.*, 2016) los cuales apoyan esta afirmación.

Tabla 1.2 Energías y distancias de interacción entre FeO_2H y las láminas de grafeno

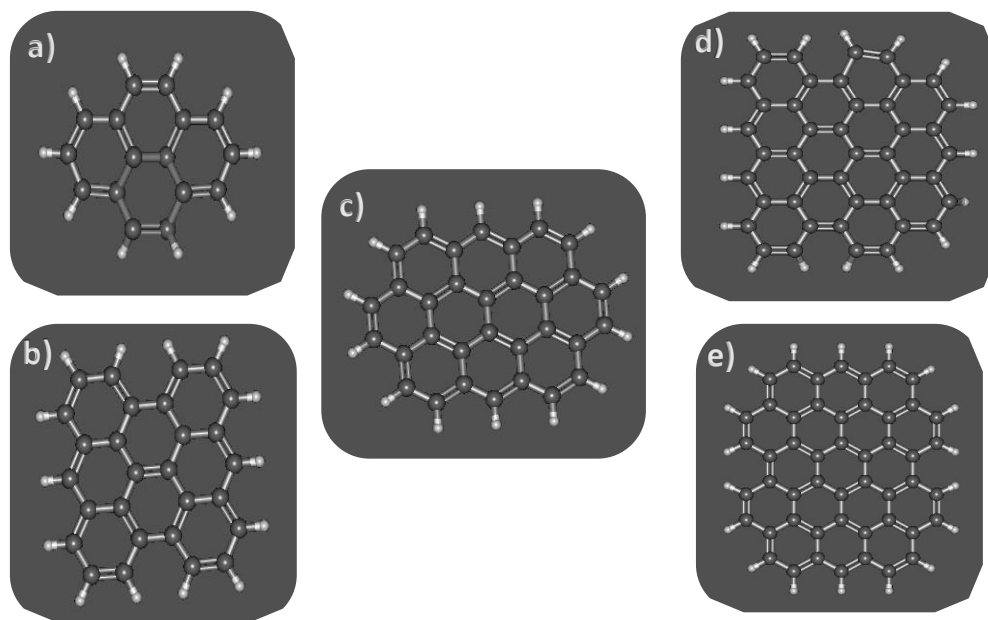
Método	Configuración	Energía (kcal/kmol)	Distancia más corta de interacción (Å)
B3LYP	L1- FeO_2H	-2986.2923	2.3627
	L2- FeO_2H	-3024.5422	1.8687

Fuente: (Elaboración propia)

1.3.3 Nanocompuesto de grafeno- CoFe_2O_4

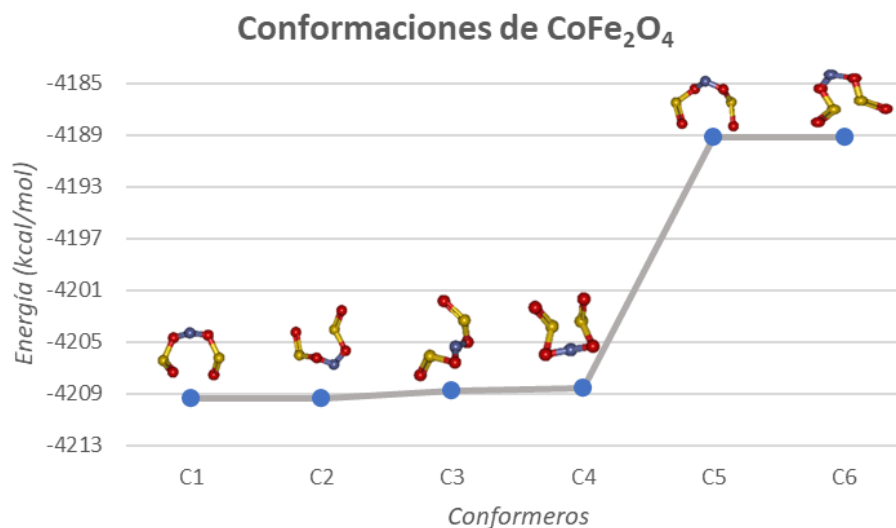
A partir de las 6 conformaciones optimizadas de ferrita de cobalto (Tabla 3) con las láminas de grafeno de distintas dimensiones se logró analizar los efectos en la estructura del nanocompuesto formado. Solamente la conformación f, resultó más estable al interactuar con cada una de las láminas de grafeno estudiadas. Las láminas de grafeno fueron diseñadas en 5 diferentes estructuras de láminas finitas de diferentes dimensiones (Figura 1.8) incorporando en cada una de ellas átomos de hidrógeno a los carbonos terminales de su perímetro.

Figura 1.8 Láminas de grafeno estudiadas (las esferas grises representan al carbono y las blancas al hidrogeno): a) 4 anillos, b) 8 anillos, c) 10 anillos, d) 14 anillos y e) 17 anillos bencénicos



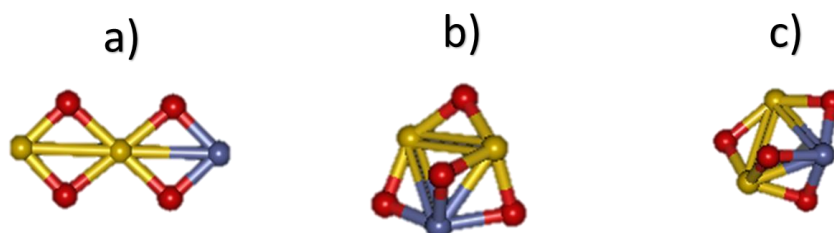
Fuente: (Elaboración propia)

Los cambios en la geometría, energía y las propiedades de los compuestos resultantes fueron analizados en términos de la relación Co / Fe planteada. El cálculo de las estructuras se realizó a través de los próximos pasos sucesivos, debido a los iones metálicos presentes y también a la gran cantidad de electrones de la celda unitaria basada en la estructura de la ferrita de cobalto ($\text{O}=\text{Fe}-\text{O}-\text{Co}-\text{Fe}=\text{O}$). Las 6 conformaciones estructurales cuyos modelos se basaron en la estructura de una ferrita de cobalto con geometrías distintas (ver Gráfico 1.1) proporcionaron las estructuras resultantes de los cálculos que sirvieron para ser incorporadas a la estructura y para la evaluación de sus características obtenidas en la formación del nanocompuesto.

Gráfico 1.1 Parámetros energéticos y estructuras de las distintas conformaciones de CoFe_2O_4 

Fuente: (Elaboración propia)

Con los resultados anteriores fueron evaluadas individualmente cada una de las conformaciones estudiadas. La incorporación de cada una de estas conformaciones en posición paralela, al centro y a una distancia inicial de 3 Å de las láminas de grafeno (ver Figura 1.8) permitió generar los respectivos nanocompuestos, optimizados por medio de la correlación de intercambio con la funcional híbrida PBE0/6-31G. Se seleccionó este método en base a los resultados obtenidos utilizados para la incorporación de átomos de Co, Fe y O a lámina grafeno, basado en los trabajos de (Hossain et al., 2020). Posteriormente, se estudiaron 3 conformaciones diferentes de las estructuras de las ferritas de cobalto (Figura 1.9), las cuales fueron optimizadas individualmente para analizar la configuración óptima para ser incorporadas para la formación del nanocomposito correspondiente. Usando el funcional PBE0 y variando la multiplicidad de 2, 4, 6, 8 y 10 se logró su comparación para evaluar la estructura de mínima energía y seleccionarla para la formación del nanocomposito.

Figura 1.9 Conformaciones estudiadas de las ferritas de cobalto

Fuente: (Elaboración propia)

Al hallar la estructura en cada optimización computacional realizada, se observó que, al aumentar el tamaño de la lámina de grafeno, disminuye ligeramente la energía del nanocompuesto formado. Adicionalmente, se observó que las estructuras de las ferritas de cobalto presentaron una ligera distorsión en su geometría (presentando distintos valores de los ángulos diedro Fe-O-Co-O-Fe, de 121.977° a 131.158° en el nanocompuesto formado) provocada principalmente por la influencia de la densidad electrónica de la lámina de grafeno. Sin embargo, para el caso de la lámina de grafeno no se observó ninguna distorsión. Para hacer un análisis comparativo se planteó crear modelos estructurales que incluían las conformaciones de CoFe_2O_4 propuestas en la Figura 9 y las láminas de grafeno mostradas en la figura 8. Los nanocompuestos resultantes presentaron características geométricas relevantes, las cuales se presentan en la Tabla 1.3, observándose las interacciones intermoleculares más fuertes y estables, las cuales presenten menores energías, lo que se puede interpretar como una mejor estabilidad y nanocompuestos más reactivos.

Además, se presentan las energías de los nanocompuestos en función de las conformaciones estudiadas, observándose que para cada una de ellas, disminuye la energía al aumentar el tamaño de la lámina de grafeno. Las conformaciones C3 y C6 presentan la menor energía de formación, resultando los nanocompuestos más estables. Finalmente, considerando las distancias de interacción intermolecular entre la lámina de grafeno y la ferrita de cobalto para cada uno de los nanocompuestos en función a las conformaciones estudiadas, resultando la menor distancia para los nanocompuestos con la conformación C3 para todos los tamaños de grafeno.

Tabla 1.3 Parámetros estructurales de los nanocompuestos obtenidos con las conformaciones de CoFe_2O_4 y las láminas de grafeno. *Sin converger

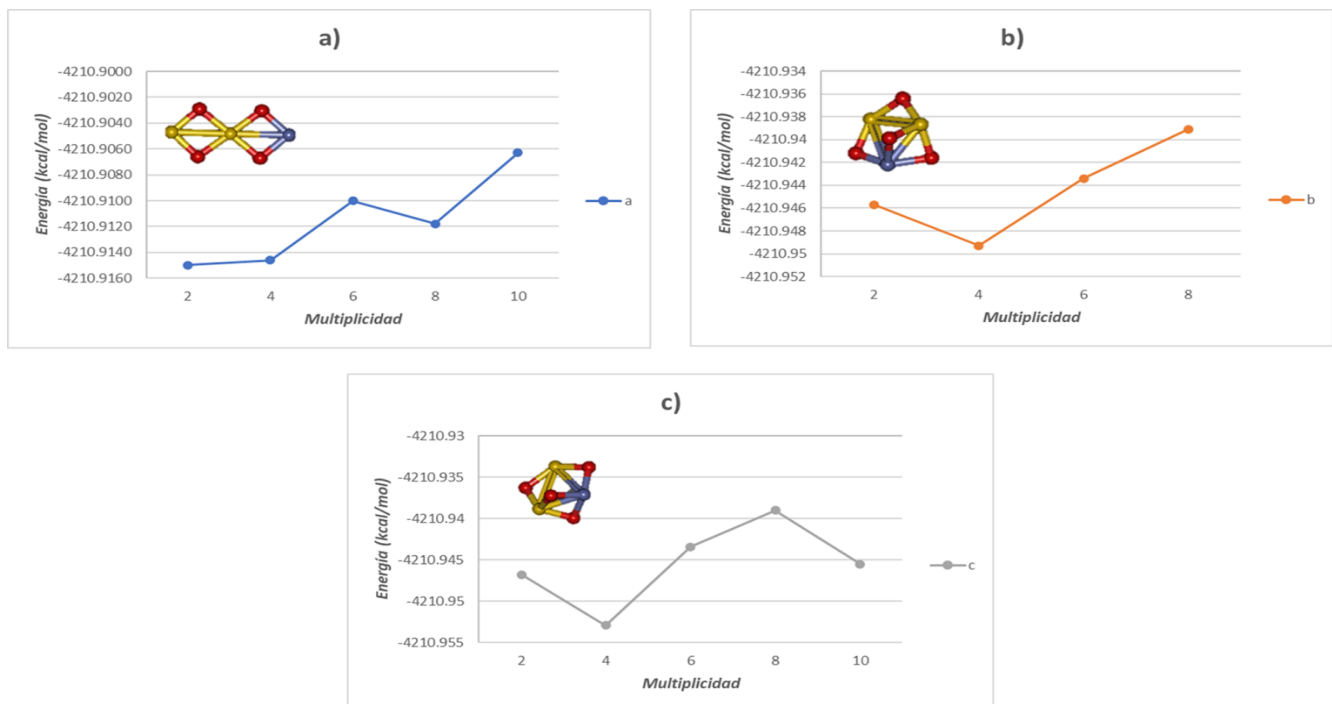
Geometrías en presencia de CoFe_2O_4	C1		C2		C3		C4		C5		C6	
	Energía (Kcal/mol)	Distancia entre CoFe_2O_4 / Grafeno (Å)	Energía (Kcal/mol)	Distancia entre CoFe_2O_4 / Grafeno (Å)	Energía (Kcal/mol)	Distancia entre CoFe_2O_4 / Grafeno (Å)	Energía (Kcal/mol)	Distancia entre CoFe_2O_4 / Grafeno (Å)	Energía (Kcal/mol)	Distancia entre CoFe_2O_4 / Grafeno (Å)	Energía (Kcal/mol)	Distancia entre CoFe_2O_4 / Grafeno (Å)
4 anillos	-4799.872	3.284	-4822.789	3.380	-4799.620	2.933	-4822.789	3.389	*	*	-4799.624	2.957
8 anillos	*	*	*	*	-5256.290	2.898	-5256.232	3.346	*	*	-5281.920	2.964
10 anillos	-5408.029	3.266	-5407.721	3.334	*	*	-5407.721	3.343	*	*	-5407.782	2.971
14 anillos	-5854.990	3.294	-5825.934	3.304	-5825.990	2.864	-5825.936	3.341	-5826.098	3.129	-5825.980	2.906
17 anillos	-6091.912	3.306	*	*	-6091.662	2.842	*	*	*	*	-6091.645	3.308

Fuente: (Elaboración propia)

Adicionalmente, la conformación C3 de la ferrita de cobalto fue la que presentó mayor interacción con las láminas de grafeno; observándose que, al aumentar el tamaño de las láminas de grafeno, disminuye la distancia entre la ferrita y el grafeno. Presentando interacción intermolecular tipo Van del Waals dipolo-dipolo inducido entre el metal deficiente de electrones y la lámina del grafeno, mismos que son comparables con los obtenidos por (Naveed-Ul-Haq *et al.*, 2021).

Los resultados individuales de la ferrita de cobalto mostraron los niveles de energía para cada una de las 3 conformaciones estudiadas (Gráfico 1.2), resaltando como la más estable, la estructura optimizada con la multiplicidad 4, la cual mostró los menores niveles de energía. Finalmente, la configuración c basada en sus parámetros energéticos, resultó ser la más estable para ser incorporada en la formación del nanocompuesto.

Gráfico 1.2 Graficas de energía vs la multiplicidad de las diferentes conformaciones de ferrita de cobalto



Fuente: (Elaboración propia)

1.4 Conclusiones

Usando métodos computacionales basados en DFT se optimizaron estructuras de FeO, Fe₂O₃ y CoFe₂O₄ con grafeno. El modelo de láminas de grafeno con defectos tipo vacante presentó las características geométricas que permitieron una fuerte interacción con los átomos de Fe en comparación con láminas de grafeno prístino. El análisis de los parámetros estructurales y energéticos permitió demostrar que las estructuras con defectos de tipo vacante son las más estables. Además, quedó demostrado que hay fuertes interacciones intermoleculares van der Waals y dipolo-dipolo inducido entre los óxidos metálicos y las láminas de grafeno. Los resultados de este trabajo infieren que la incorporación de los óxidos metálicos modifica las propiedades del grafeno para brindarles un comportamiento magnético.

1.5 Referencias

- Baseden, K. A., & Tye, J. W. (2014). Introduction to Density Functional Theory: Calculations by Hand on the Helium Atom. *Journal of Chemical Education*, 91(12), 2116–2123. <https://doi.org/10.1021/ed5004788>
- Boustani, I. (2020). Molecular Modelling. In C. Springer (Ed.), *Springer Handbooks* (1st ed., pp. 3–48). https://doi.org/10.1007/978-3-030-32726-2_1
- Cortés-Arriagada, D., & Villegas-Escobar, N. (2017). A DFT analysis of the adsorption of nitrogen oxides on Fe-doped graphene, and the electric field induced desorption. *Applied Surface Science*, 420, 446–455. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2017.05.162>
- Hossain, A., Sarker, M. S. I., Khan, M. K. R., & Rahman, M. M. (2020). Spin effect on electronic, magnetic and optical properties of spinel CoFe₂O₄: A DFT study. *Materials Science and Engineering: B*, 253, 114496. <https://doi.org/10.1016/j.mseb.2020.114496>
- Impeng, S., Khongpracha, P., Warakulwit, C., Jansang, B., Sirijaraensre, J., Ehara, M., & Limtrakul, J. (2014). Direct oxidation of methane to methanol on Fe–O modified graphene. *RSC Adv.*, 4(24), 12572–12578. <https://doi.org/10.1039/C3RA47826B>
- Jeevanandam, J., Barhoum, A., Chan, Y. S., Dufresne, A., & Danquah, M. K. (2018). Review on nanoparticles and nanostructured materials: History, sources, toxicity and regulations. *Beilstein Journal of Nanotechnology*, 9(1), 1050–1074. <https://doi.org/10.3762/bjnano.9.98>
- Ji, X., Xu, Y., Zhang, W., Cui, L., & Liu, J. (2016). Review of functionalization, structure and properties of graphene/polymer composite fibers. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, 87, 29–45. <https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2016.04.011>
- Kharissova, O. V., García, B. O., Kharisov, B. I., & Méndez, U. O. (2016). Magnetic-Graphene-Based Nanocomposites and Respective Applications. In *Advances in Carbon Nanostructures* (pp. 3–38). InTech. <https://doi.org/10.5772/64319>
- LIU, N., ZHOU, S., & ZHAO, J. (2019). Electrical Conductance of Graphene with Point Defects. *Acta Physico-Chimica Sinica*, 35(10), 1142–1149. <https://doi.org/10.3866/PKU.WHXB201810040>
- Nasrollahzadeh, M., Sajadi, S. M., Sajjadi, M., & Issaabadi, Z. (2019). An Introduction to Nanotechnology. In *Interface Science and Technology* (1st ed., Vol. 28). Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-813586-0.00001-8>
- Naveed-Ul-Haq, M., Hussain, S., Webers, S., Salamon, S., Ahmad, I., Bibi, T., Hameed, A., & Wende, H. (2021). On the structure-property relationships of (Al, Ga, In)-doped spinel cobalt ferrite compounds: A combined experimental and DFT study. *Physical Chemistry Chemical Physics*. <https://doi.org/10.1039/d1cp02625a>

- Ostovari, F., Hasanpoori, M., Abbasnejad, M., & Salehi, M. A. (2018). DFT calculations of graphene monolayer in presence of Fe dopant and vacancy. *Physica B: Condensed Matter*, *541*(November 2017), 6–13. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2018.04.023>
- Povolotskaya, A. v, Povolotskiy, A. v, & Manshina, A. A. (2015). Hybrid nanostructures: synthesis, morphology and functional properties. *Russian Chemical Reviews*, *84*(6), 579–600. <https://doi.org/10.1070/rcr4487>
- Robles, J., & Manzanilla, B. (2020). Conceptual DFT Reactivity Descriptors Computational Study of Graphene and Derivatives Flakes: Doped Graphene, Graphane, Fluorographene, Graphene Oxide, Graphyne, and Graphdiyne. *Journal of the Mexican Chemical Society*, *64*(3). <https://doi.org/10.29356/jmcs.v64i3.1167>
- Tabit, R., Amadine, O., Essamlali, Y., Dânoun, K., Rhihil, A., & Zahouily, M. (2018). Magnetic CoFe₂O₄ nanoparticles supported on graphene oxide (CoFe₂O₄/GO) with high catalytic activity for peroxy monosulfate activation and degradation of rhodamine B. *RSC Advances*, *8*(3), 1351–1360. <https://doi.org/10.1039/c7ra09949e>
- Thivasasith, A., Sirijaraensre, J., Khongpracha, P., Warakulwit, C., Jansang, B., & Limtrakul, J. (2015). Reaction Mechanism of Methanol to Formaldehyde over Fe- and FeO-Modified Graphene. *ChemPhysChem*, *16*(5), 986–992. <https://doi.org/10.1002/cphc.201402702>
- Tipsawat, P., Wongpratrat, U., Phumying, S., Chanlek, N., Chokprasombat, K., & Maensiri, S. (2018). Magnetite (Fe₃O₄) nanoparticles: Synthesis, characterization and electrochemical properties. *Applied Surface Science*, *446*, 287–292. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2017.11.053>
- Vijayaraghavan, A., & Iliut, M. (2017). Graphene. In *Reference Reviews* (Vol. 32, Issue 7/8, pp. 363–391). https://doi.org/10.1007/978-3-662-54357-3_12
- Zhou, Q., Ju, W., Su, X., Yong, Y., & Li, X. (2017). Adsorption behavior of SO₂ on vacancy-defected graphene: A DFT study. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, *109*, 40–45. <https://doi.org/10.1016/j.jpics.2017.05.007>

Capítulo 2 Estudio DFT de la interacción estructural de láminas de grafeno y óxido de grafeno con ferritas de níquel

Chapter 2 DFT study of the structural interaction of graphene sheets and graphene oxide with nickel ferrites

RAMIREZ-AGUILAR, José Carlos†*, PATIÑO-CARACHURE, Cristóbal, MANDUJANO-RAMIREZ, Humberto Julián y MARTINEZ-VARGAS, Sergio

Universidad Autónoma del Carmen, Campus III, Facultad de Ingeniería, Avenida Central S/N, Esq. con Fracc. Mundo Maya, C.P. 24115, Ciudad del Carmen, Campeche, México.

ID 1^{er} Autor: *José Carlos, Ramírez-Aguilar* / **ORC ID:** 0000-0002-0404-0021, **CVU CONACYT ID:** 1088494

ID 1^{er} Coautor: *Cristobal, Patiño-Carahure* / **ORC ID:** 000-0002-1436-1259, **CVU CONACYT ID:** 226327

ID 2^{do} Coautor: *Humberto Julián, Mandujano-Ramírez* / **ORC ID:** 0000-0003-3714-5564, **CVU CONACYT ID:** 266189

ID 3^{er} Coautor: *Sergio, Martínez-Vargas* / **ORC ID:** 0000-0003-4605-0557, **CVU CONACYT ID:** 100782

DOI: 10.35429/H.2021.12.1.13.25

J. Ramirez, C. Patiño, H. Mandujano y S. Martinez

*202523@mail.unacar.mx

S. Figueroa, B. Pérez, J. Flores, L. Santis. (AA. VV.) Ingeniería y Ciencias Aplicadas. Handbooks-©ECORFAN-México, Campeche, 2021.

Resumen

Se estudia la funcionalización de láminas de grafeno y óxido de grafeno con óxidos de hierro derivados de la estructura de la ferrita utilizando la Teoría Funcional de la Densidad (DFT) con el funcional híbrido PBE0. La ferrita (Fe_3O_4) es un óxido mixto de hierro divalente (Fe^{2+}) y trivalente (Fe^{3+}) con propiedades magnéticas muy interesantes. Las estructuras de Fe_3O_4 y NiFe_2O_4 en donde éste último se sustituye el Fe^{2+} por Ni^{2+} son simplificadas e incorporadas en láminas de grafeno prístino de distintas dimensiones y modificado (con oxígeno para simular óxido de grafeno). Se emplean distintas estructuras previamente optimizadas de las ferritas estudiadas NiFe_2O_4 y Fe_3O_4 , al igual que las diferentes láminas de grafeno. Se calcula la energía de estado fundamental y la geometría más estable de cada sistema estudiado para determinar su comportamiento estructural y su estabilidad.

Grafeno, Óxido de grafeno, Óxidos de hierro, Ferrita de níquel, DFT

Abstract

The functionalization of the graphene sheets and graphene oxide with the iron oxides derived from the structure of ferrite is studied using the Density Functional Theory (DFT) with the hybrid functional PBE0. Ferrite (Fe_3O_4) is a mixed oxide of divalent (Fe^{2+}) and trivalent (Fe^{3+}) iron with very interesting magnetic properties. In this work, the simplified structures of Fe_3O_4 and NiFe_2O_4 , where the latter is substituted for Fe^{2+} by Ni^{2+} are incorporated in sheets of pristine graphene of different dimensions and modified (with oxygen to simulate graphene oxide). Different previously optimized structures of the NiFe_2O_4 and Fe_3O_4 ferrites are used as well as the different graphene sheets studied. The ground state energy and the most stable geometry of each studied system are calculated to determine its structural behavior and stability.

Graphene, Graphene Oxide, Iron Oxides, Nickel Ferrite, DFT

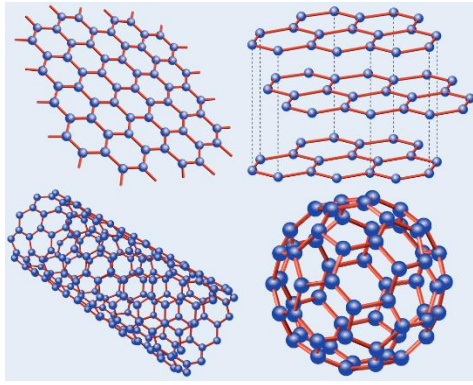
2.1 Introducción

El carbono es la materia prima para la vida y la base de toda la química orgánica. Debido a la flexibilidad de sus enlaces, los sistemas basados en carbono muestran un número ilimitado de estructuras diferentes con una variedad igualmente grande de propiedades físicas. Estas propiedades físicas son, en gran parte, el resultado de la dimensionalidad de estas estructuras. Entre los sistemas con solo átomos de carbono, el Grafeno, un alótropo bidimensional (2D), juega un papel importante ya que es la base para la comprensión de las propiedades electrónicas en otros alótropos (Castro Neto et al., 2009) y supera a todos los demás alótropos en utilidad para las ciencias de la vida y los materiales debido a sus muchas propiedades intrínsecas (Balandin et al., 2008; Lee et al., 2008; Novoselov et al., 2004).

El Grafeno está hecho de átomos de carbono dispuestos en una estructura de panal hecha de hexágonos (ver Figura 2.1), y se puede pensar que está compuesto por anillos de benceno despojados de sus átomos de hidrógeno (Pauling, 1960). Con excepción del dimanante, el Grafeno puede visualizarse como el bloque constructor a partir del cual se forman todos los demás alótropos (Grima et al., 2015; Iijima, 1991; Iijima & Ichihashi, 1993; Kroto et al., 1985).

Con una elucidación temprana, Wallace en 1947 asumió la conducción en la capa y no entre las capas intermedias espaciadas de van der Waals, entonces se concibió al Grafeno como un material 2D. Posteriormente, las capas individuales fueron observadas experimentalmente por Boehm et al. de la reducción de óxido de grafito, y demostraron que los materiales porosos formados tienen aplicaciones tales como en la sorción de gases y pequeñas moléculas orgánicas (Boehm et al., 1962; Boehm et al., 1962). Curiosamente, Hofmann y Frenzel (1934) describieron la reducción de óxido de grafito usando sulfuro de hidrógeno antes de la demostración de Boehm et al. de que el óxido de grafito se puede exfoliar. Estos métodos de producción para materiales de Grafeno de una o pocas capas, aunque defectuosos, siguen siendo aplicables para la producción a gran escala (Georgakilas et al., 2016).

Figura 2.1. Alótropos más comunes del carbono: Grafeno (arriba a la izquierda), grafito (arriba a la derecha), nanotubos de carbono (abajo a la izquierda) y fullerenos: C-60 (abajo a la derecha)



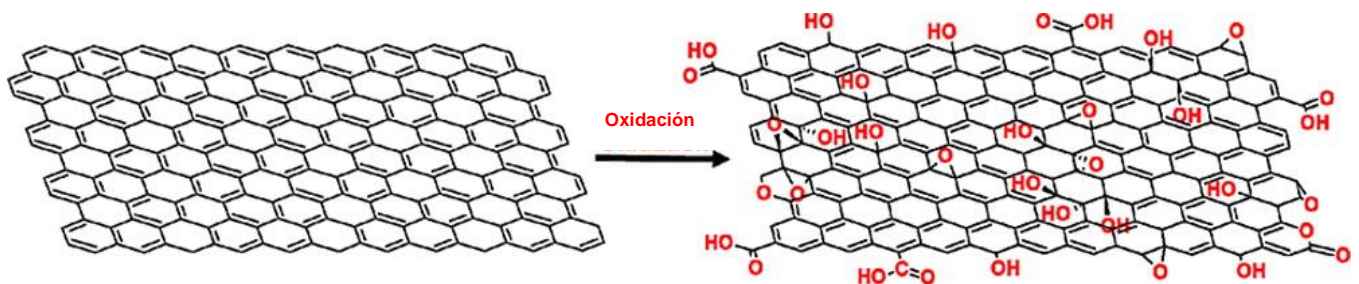
Fuente: (Neto et al., 2006).

La capacidad de producir Grafeno de una sola capa de alta calidad se le atribuye a Andrei Geim, Kostya Novoselov y sus co-investigadores, en un intento de explorar las propiedades eléctricas del Grafeno mediante la extracción de la capa atómica en los cristales gruesos de grafito pirolítico altamente orientado, con la ayuda de la pegajosa “cinta adhesiva”. Este avance hizo posible observar propiedades que antes solo se conocían en teoría (Novoselov et al., 2004). Las aplicaciones potenciales para el Grafeno superlativo parecían ser ilimitadas, y surgió como un nanomaterial fascinante para estimular y fomentar tanto el descubrimiento científico como su explotación comercial en una variedad de áreas de la nanotecnología (Dreyer, Ruoff, et al., 2010; Novoselov et al., 2007).

Cuando los átomos de carbono participan en enlaces covalentes robustos entre estados de hibridación sp^2 forman una topología de panal extendida, esta estructura da una relación resistencia/peso que supera notablemente a los metales y los compuestos metálicos (Lee et al., 2008). La banda prohibida cero del Grafeno le da una excelente movilidad de electrones; la investigación y modificación de esta movilidad es importante como un medio para reemplazar los semiconductores actuales en los dispositivos electrónicos (Bolotin et al., 2008; Geim & Novoselov, 2007). Tales cambios pueden producirse alterando las dimensiones estructurales del Grafeno (Abergel et al., 2010; Kim & Kim, 2008; Nakada et al., 1996; Zhang et al., 2008). Idealmente, unos pocos dispositivos electrónicos con un grosor de átomos de Carbono podrían hacer que tales dispositivos sean casi invisibles, ya que una sola hoja de grafeno es aproximadamente un 97.7% transparente a la luz blanca y representa un nuevo medio para transmitir información (Nair et al., 2008).

Antes del Grafeno, hubo una extensa investigación sobre las preparaciones y propiedades del óxido de grafito y más tarde del óxido de grafeno (OG) (Dreyer, Park, et al., 2010; Hofmann & König, 1937; Hummers & Offeman, 1958; Marcano et al., 2010). La diferencia obvia entre el grafeno y OG es la adición de átomos de oxígeno unidos al andamio de carbono como se muestra en la Figura 2.2. Como resultado, el Grafeno es de naturaleza hidrofóbica mientras que OG es hidrofílico, es decir, fácilmente dispersable en agua. Además, el OG contiene dominios aromáticos (sp^2) y alifáticos (sp^3), lo que amplía aún más los tipos de interacciones que pueden ocurrir con la superficie (Georgakilas et al., 2016).

Figura 2.2 Oxidación de la hoja de grafeno para formar óxido de grafeno



Fuente: (Georgakilas et al., 2016)

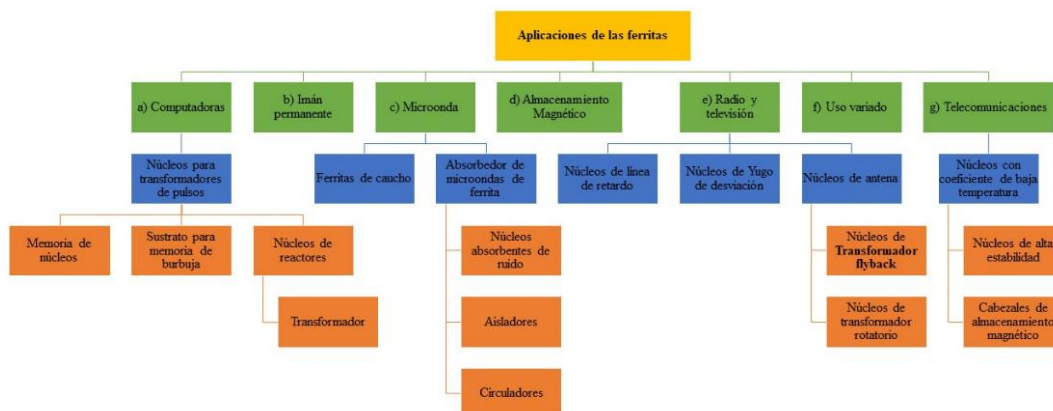
El OG se reduce fácilmente a OG reducido con altos rendimientos; sin embargo, la calidad de los Grafenos producidos no es adecuada para aplicaciones electrónicas o refuerzo mecánico de polímeros debido a defectos estructurales creados durante la síntesis de OG. Aun así, esta es una ruta preferible para el manejo a gran escala de materiales grafenicos con propiedades de superficie adaptadas mediante funcionalización. Tanto el Grafeno como el OG descritos anteriormente juegan un papel central en la ciencia de los materiales gracias a sus características estructurales y morfológicas únicas, así como excelentes propiedades eléctricas, mecánicas y térmicas. Algunas aplicaciones de nicho incluyen bajo costo, área grande, electrónica flexible y/o ligera, pantallas o e-paper (papel electrónico), compuestos poliméricos, catalizadores, materiales relacionados con la energía, sensores y bioderivados (Georgakilas et al., 2016).

En la mayoría de los casos, la funcionalización es la mejor manera de lograr el mejor rendimiento del Grafeno y del OG. En este sentido, la literatura es enorme para las aplicaciones crecientes del Grafeno y OG modificadas a través de interacciones no covalentes y enlaces covalentes. Generalmente, la funcionalización covalente compromete la estructura sp^2 de las redes de Grafeno, lo que resulta en defectos y pérdida de las propiedades electrónicas. Por el contrario, se prefiere en gran medida la funcionalización no covalente, ya que no altera la estructura y las propiedades electrónicas del Grafeno mientras que simultáneamente introduce nuevos grupos químicos en la superficie. Los ejemplos comunes de funcionalización no covalente incluyen polímero wrapping, interacciones $\pi-\pi$, complejo aceptante-donante de electrón, enlaces de hidrógeno y fuerzas de van der Waals. En todos los casos, la funcionalización no covalente conduce a una mayor dispersabilidad, biocompatibilidad, reactividad, capacidad de unión o propiedades de detección (Georgakilas et al., 2016).

El Grafeno se ha funcionalizado con nanopartículas metálicas, nanopartículas de óxidos metálicos, puntos cuánticos, etc. De hecho, el grafeno prístino ha sido catalogado como el sustrato ideal para la dispersión de las nanopartículas debido a su enorme superficie activa. Metales novedosos como Pt, Au, Ag, Rh, Pd y sus aleaciones se han dispersado en grafeno para formar nanocompuestos de grafeno/nanopartículas. Los nanocompuestos basados en grafeno y las nanopartículas de óxidos metálicos como SnO_2 , Mn_3O_4 , Co_3O_4 , TiO_2 exhibieron un rendimiento capacitivo superior para las baterías de iones de litio (Sahoo & Nayak, 2019).

El óxido de interés en este trabajo de investigación son las ferritas, estas son materiales cerámicos homogéneos compuestos por varios óxidos mixtos de hierro divalente (Fe^{2+}) y trivalente (Fe^{3+}) como la magnetita (Fe_3O_4) (Kaur & Kaur, 2016). Recientemente, las ferritas se han investigado intensamente debido a que son materiales aislantes de muy alta resistividad eléctrica, baja corriente de Foucault, alta permeabilidad magnética, permitividad moderada y bajas pérdidas dieléctricas (Gore et al., 2017; Pawar et al., 2017). Son los únicos materiales que muestran esta amplia gama de propiedades y, por lo tanto, son adecuados para varias aplicaciones en innumerables campos (ver Figura 2.3), por ejemplo, se encuentra en núcleos de transformadores, chips de memoria, telecomunicaciones, automóvil, etc. (Bharathi et al., 2012).

Figura 2.3 Gráfico que muestra las aplicaciones de ferritas



Fuente: (Jadhav et al., 2020)

Las ferritas se clasifican de acuerdo con dos criterios principales, es decir, está la estructura cristalina (Tabla 2.1) y las propiedades magnéticas. Las ferritas tipo espinela, se derivan del mineral espinela (MgAl_2O_4 o $\text{MgO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3$), que cristaliza en el sistema cúbico (Aza et al., 2004). Esta estructura cristalina fue determinada por primera vez por Bragg (1915) y por Nishikawa (1915). De manera análoga a la espinela mineral, la espinela magnética tiene la fórmula general $\text{MeO} \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$ o MeFe_2O_4 donde Me es el ion metálico divalente (Brabers, 1995).

Tabla 2.1 Clasificación de ferritas sobre la base de la estructura cristalina

Tipo	Proporción molar	Representación
Espinela	$\text{Fe}_2\text{O}_3 - 1\text{MeO}$	MeO es un óxido de metal de transición divalente.
Hexaferrita	$6 \text{Fe}_2\text{O}_3 - 1\text{MeO}$	MeO es un óxido de metal divalente del grupo IIA, por ejemplo, BaO, CaO, SrO.
Granate	$5 \text{Fe}_2\text{O}_3 - 3\text{Me}_2\text{O}_3$	Me_2O_3 es un óxido de metal de tierras raras.
Ortoferrita	AFeO_3	A es uno o más elementos de tierras raras

Fuente: (Gore & Jadhav, 2020)

Los métodos de modelado molecular se utilizan con frecuencia para investigar diversas características moleculares, como propiedades estructurales, dinámicas, geométricas y termodinámicas de un gran número de estructuras. Estos métodos computacionales se utilizan actualmente para modelar el comportamiento molecular para estudiar características físicas, químicas y biológicas en varias ramas y aplicaciones de la ciencia (Al-Bagawi et al., 2020).

Debido a la importancia del grafeno funcionalizado, el presente trabajo está dedicado a estudiar y modelar la funcionalización de óxidos de hierro derivados de la estructura de la Ferrita en láminas de Grafeno prístino y Óxido de Grafeno utilizando la Teoría Funcional de la Densidad (DFT) de primeros principios.

2.2 Metodología

2.2.1 Detalles del Cálculo

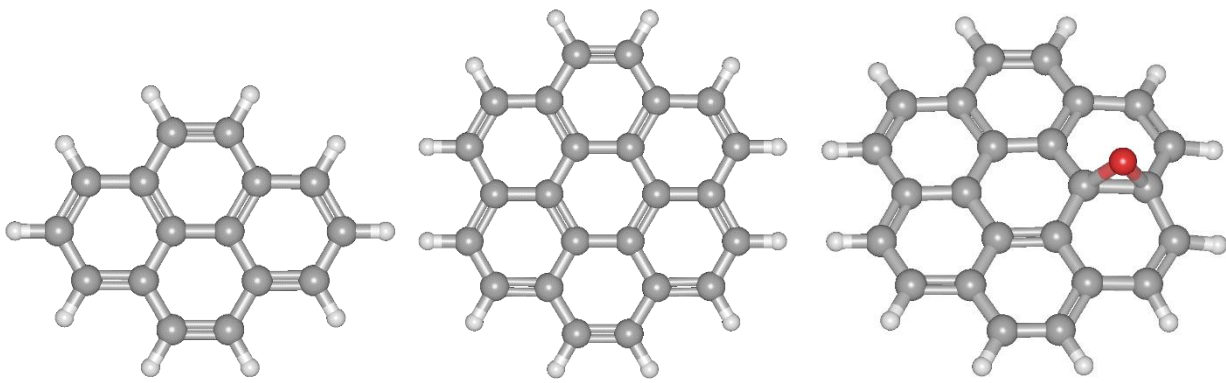
Todos los cálculos se realizaron utilizando el paquete de química cuántica ORCA 4.2.1 el cual presenta prácticamente todos los métodos modernos de estructura electrónica (teoría funcional de densidad, perturbación de muchos cuerpos y teorías de clústeres acoplados, y métodos multireferenciales y semiempíricos) y la interfaz gráfica de usuario gratuita Gabedit 2.5.0, la cual ofrece preprocesamiento y posprocesamiento (Allouche, 2011; Neese, 2012).

Se realizaron cálculos para estudiar la energía de estado fundamental y la geometría más estable de cada sistema estudiado mediante el nivel de la Teoría Funcional de la Densidad (DFT) de primeros principios con el funcional híbrido PBE0 (Burke, 2012) y el conjunto de bases 6-31G (Hehre et al., 1972).

2.2.2 Construcción de las estructuras moleculares

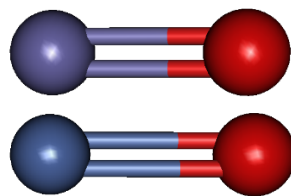
La Figura 2.4 muestra las estructuras optimizadas de dos láminas de Grafeno prístino de diferente tamaño y una lámina de Grafeno de siete anillos bencénicos funcionalizada con un átomo de oxígeno para simular el Óxido de Grafeno (OG). El grafeno se construye como una hoja 2D compuesta por átomos de Carbono unidos entre sí con enlaces simples y dobles alternativamente. También se consideran átomos de hidrogeno ligados a los nodos libres, como un agregado de anillos de benceno, sin los cuales no se tendría un equilibrio en los enlaces de valencia (Pereyda & Riera, 2018). La figura 2.5 muestra las estructuras optimizadas de óxido de hierro (FeO) y óxido de níquel (NiO).

Figura 2.4 Láminas de Grafeno prístino de cuatro (izquierda) y siete (en medio) anillos bencénicos; Óxido de Grafeno (derecha)



Fuente: Elaboración propia

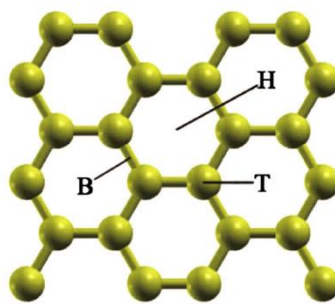
Figura 2.5 Estructuras simplificadas de Fe_3O_4 y NiFe_2O_4 ; FeO (arriba) y NiO (abajo)



Fuente: Elaboración propia

Estos óxidos se agregaron sobre la superficie de las estructuras de Grafeno en posición paralela y se consideró la unión del metal de transición con la lámina de Grafeno en tres sitios de alta simetría: sitio hueco (H) en el centro de un hexágono, sitio bridge o puente (B) en el punto medio de un enlace de carbono-carbono y el sitio top o superior (T) directamente por encima de un átomo de carbono (ver Figura 2.6).

Figura 2.6 Sitios favorecidos: hueco (H), bridge o puente (B) y top o superior (T)



Fuente: (Hu et al., 2010)

2.3 Resultados

2.3.1 Cálculos de energía

La energía total calculada de las estructuras de Grafeno prístino optimizadas de cuatro y siete anillos bencénicos es aproximadamente de -16.6528 y -25.0516 keV, respectivamente. La energía para el óxido de Grafeno con siete anillos bencénicos corresponde a -27.1070 keV. El NiO y FeO tienen un nivel de estabilidad más bajo que las estructuras de Grafeno, estas energías son equivalentes a -43.0703 y -36.4156 keV.

La estabilidad es uno de los parámetros físicos más importantes que se debe tener en cuenta cuando se trata de estructuras teóricamente a escala molecular. La energía total es la cantidad física que se refiere al nivel de estabilidad donde cuanto menor es la energía de la estructura, mayor es su estabilidad (Al-Bagawi et al., 2020).

En la Tabla 2.2 se muestran los parámetros de interés para cada sistema, tales como el tamaño de la lámina (cantidad de anillos bencénicos), el sitio favorecido del metal de transición, la formación de enlace, la energía total de estado fundamental y la distancia del Carbono del Grafeno más cercano al metal de transición.

Tabla 2.2 Parámetros calculados

Sistema	Tamaño	Sitio	Enlace	Energía Total (keV)	Enlace Metal-C (Å)
Grafeno prístino–NiO	4	H	No	-59.8037	2.86
	4	H	Si	-59.8042	2.031
Grafeno prístino–NiO	7	H	Si	-68.1178	2.5
	7	H	No	-68.1418	2.8599
Grafeno prístino–FeO	7	T	Si	-61.4692	1.9786
	7	H	Si	-61.4691	2.0561
Óxido de Grafeno–NiO	7	T	Si	-70.1669	1.9365
	7	H	No	-70.1629	2.8034
Óxido de Grafeno–FeO	7	T	Si	-63.5145	2.1419
Ferrita-Grafeno prístino	4	-	No	-98.2665	2.9
Ferrita-Grafeno prístino	7	-	No	-106.5855	2.9005

Fuente: Elaboración propia

2.3.1.1 Sistemas con Grafeno prístino

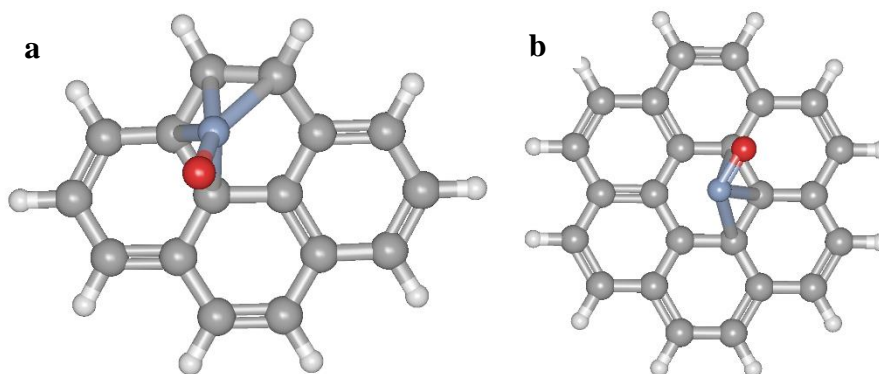
En este sistema se observó la interacción de los óxidos metálicos con las láminas de Grafeno en referencia a la distancia y los sitios de unión del metal al Grafeno.

En la Figura 2.7a y b, se puede observar que el NiO formó enlace con el Grafeno en el sitio H. A partir de la optimización computacional se observó que a partir de una distancia de 2.6 Å, este óxido metálico comienza a acercarse a la superficie del Grafeno hasta alcanzar la energía de estabilización. En la estructura de cuatro anillos (Figura 2.7a) el NiO formó enlaces cerca de los carbonos unidos a los átomos de hidrogeno, esto causó una ligera deformación en el Grafeno. En la estructura de siete anillos (Figura 2.7b) el NiO se acercó al centro de la lámina y al estar alejado de los bordes los enlaces formados no generaron deformación en la lámina del Grafeno. También se observó que la distancia de enlace fue mayor.

En la Figura 3.8a y b, se puede observar la interacción intermolecular del NiO con las dos láminas de Grafeno y que el sitio favorecido del Ni es el sitio H. Durante los cálculos se observó que a partir de una distancia mayor de aproximadamente 2.8 Å el sistema se estabiliza.

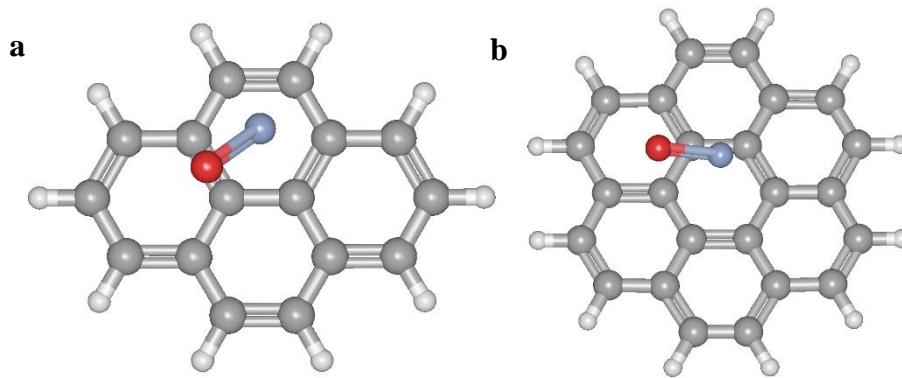
Los cálculos mostraron que los sistemas con enlace tuvieron energías de estabilidad casi idénticas que los sistemas con interacciones intermoleculares.

Figura 2.7 Enlace de NiO en Grafeno prístino. a) Grafeno prístino cuatro anillos–NiO; b) Grafeno prístino siete anillos–NiO



Fuente: Elaboración propia

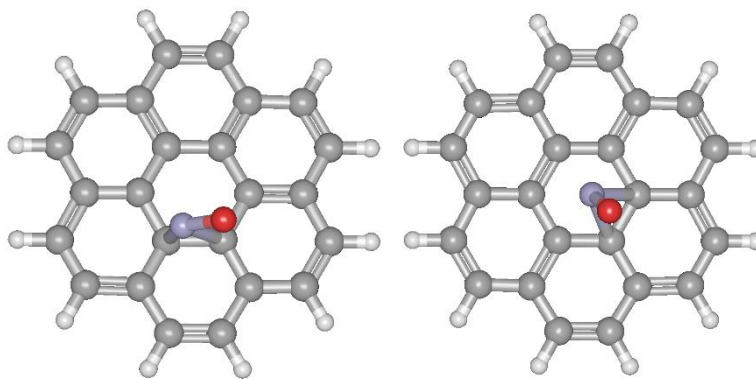
Figura 2.8 Interacción del NiO en Grafeno prístino; a) Grafeno prístino cuatro anillos–NiO; b) Grafeno prístino siete anillos–NiO



Fuente: Elaboración propia

En el sistema Grafeno-FeO, se obtuvieron estructuras donde el FeO formó enlaces con el Grafeno, pero con diferentes sitios de unión (Figura 2.9). La energía total de cada sistema es prácticamente la misma y la distancia entre el Fe y el carbono más cercano es de aproximadamente 2 Å.

Figura 2.9 Estructuras de Grafeno prístino con FeO



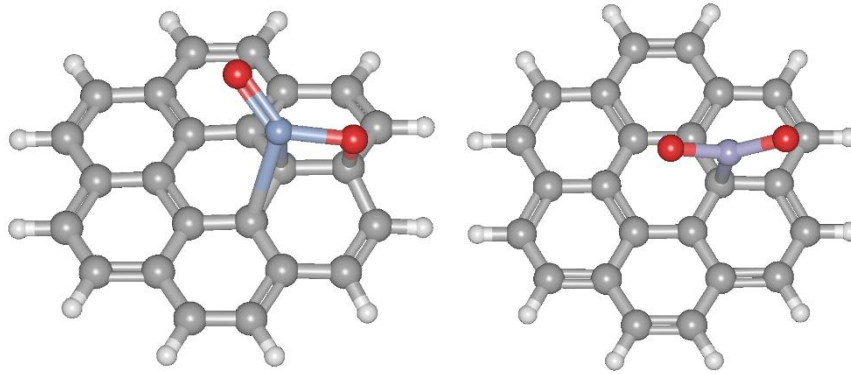
Fuente: Elaboración propia

2.3.1.2 Sistemas con Óxido de Grafeno

En estos sistemas los óxidos metálicos se agregaron en posición paralela sobre la superficie de la lámina de OG de siete anillos (ver estructura en la parte derecha de la Figura 2.10) a una distancia inicial al carbono más cercano de 2.6 Å y al átomo del oxígeno de la lámina del OG de 2.5 Å, para observar su interacción intermolecular. Los cálculos mostraron que los metales se unieron en el sitio T y también formaron un enlace con el oxígeno del OG, esto puede observarse en la Figura 3.4. En el sistema OG–FeO estudiado el átomo de oxígeno del OG se separó de la lámina de Grafeno para unirse al átomo de hierro.

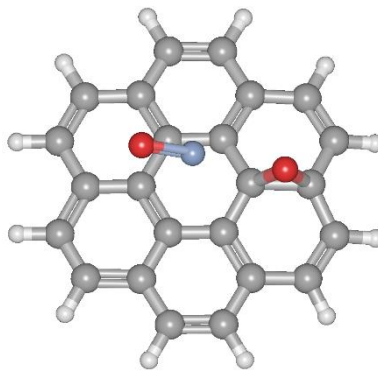
También se presentan los resultados del sistema OG-NiO al colocar el NiO en posición diagonal a la lámina de OG y a una distancia inicial al carbono más cercano de 2.9 Å y a una distancia al átomo de oxígeno del OG mayor a 2.5 Å. En este nuevo sistema OG-NiO se alcanzó su energía de estabilidad optimizada a una distancia aproximada de 2.8034 Å. A esta distancia el metal se posicionó sobre el sitio de unión H y no se formó el enlace entre el NiO y el oxígeno del OG (Figura 2.11) como en el sistema OG-NiO anterior.

Figura 2.10 Estructuras de Óxido de Grafeno con NiO (izquierda) y FeO (derecha)



Fuente: Elaboración propia

Figura 2.11 Interacción de NiO en Óxido de Grafeno



Fuente: Elaboración propia

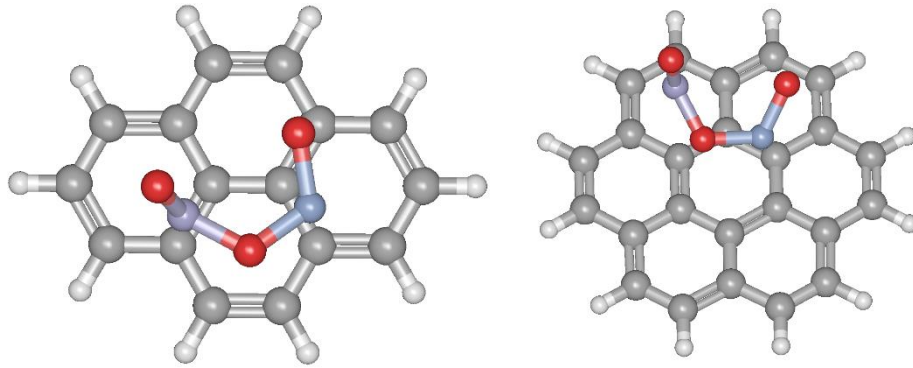
2.3.1.3 Sistemas Ferrita de Níquel – Grafeno prístino

En este sistema se estudió la interacción de la ferrita de níquel (NiFe_2O_4) simplificada sobre la superficie del Grafeno prístino de cuatro y siete anillos (Figura 2-12). En base a las simulaciones optimizadas previas, donde el NiO interactúa con el Grafeno y el OG a través de interacciones intermoleculares, se optimizó el sistema NiFeO_3 -Grafeno Prístino partiendo de una distancia inicial entre el carbono más cercano del Grafeno al níquel de 2.9 Å. En este estudio solo se determinó la energía total de estado fundamental y antes de obtener la energía total se restringió la molécula de NiFe_2O_4 simplificada (NiFeO_3), inmovilizando los átomos durante la optimización, para que el cálculo computacional de funcionales de la densidad no cambiara la geometría de la estructura de NiFeO_3 agregada a la lámina de Grafeno.

La estructura de NiFeO_3 se estabilizó en la lámina de cuatro anillos con una energía de -98.2665 keV y la distancia de interacción del Ni con el carbono más cercano fue de aproximadamente 2.9 Å muy cercana a la distancia propuesta. En la lámina de siete anillos la energía de estabilización con la estructura de NiFeO_3 corresponde a -106.5855 keV y la distancia de interacción del Ni con el carbono más cercano fue de aproximadamente 2.9005 Å.

Estos sistemas mostraron las mayores energías de estabilización, en comparación con los sistemas previos.

Figura 2.12 Estructura de NiFe_2O_4 simplificada sobre Grafeno prístino



Fuente: Elaboración propia

2.4 Conclusiones y recomendaciones

La unión del Grafeno con las estructuras de los óxidos metálicos FeO , NiO y NiFe_2O_4 simplificada (NiFeO_3) dieron como resultado estructuras con mayor estabilidad al obtener sus energías optimizadas a través de cálculos computacionales utilizando la teoría de funcionales de la densidad, concluyendo que la interacción de estos óxidos metálicos con las láminas de grafeno estudiadas provoca que sean más estables.

En la mayoría de los sistemas el sitio más favorable para los óxidos metálicos resultó ser el sitio hueco (H) en el centro de un anillo bencénico de las láminas de Grafeno estudiadas.

También, para los sistemas de estos óxidos metálicos FeO y NiO con el óxido de grafeno (OG) FeO-OG y NiO-OG se obtuvieron las geometrías y energías optimizadas más estables.

Finalmente, es muy importante tener en cuenta las características del equipo de cómputo a emplear en estos cálculos, ya que, al incrementar el tamaño de las estructuras de las láminas de grafeno y óxidos metálicos, mayor será el coste computacional; por lo tanto, si el equipo no es suficientemente potente se recomienda reducir el tamaño de las estructuras a estudiar.

2.5 Referencias

- Abergel, D. S. L., Apalkov, V., Berashevich, J., Ziegler, K., & Chakraborty, T. (2010). Properties of graphene: a theoretical perspective. *Advances in Physics*, 59(4), 261–482. <https://doi.org/10.1080/00018732.2010.487978>
- Al-Bagawi, A. H., Bayoumy, A. M., & Ibrahim, M. A. (2020). Molecular modeling analyses for graphene functionalized with Fe_3O_4 and NiO . *Heliyon*, 6(7), e04456. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2020.e04456>
- Allouche, A.-R. (2011). Gabedit-A graphical user interface for computational chemistry softwares. *Journal of Computational Chemistry*, 32(1), 174–182. <https://doi.org/10.1002/jcc.21600>
- Aza, A. H., Pena, P., & Aza, S. (2004). Ternary System $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-MgO-CaO}$: I, Primary Phase Field of Crystallization of Spinel in the Subsystem $\text{MgAl}_2\text{O}_4\text{-CaAl}_4\text{O}_7\text{-CaO-MgO}$. *Journal of the American Ceramic Society*, 82(8), 2193–2203. <https://doi.org/10.1111/j.1151-2916.1999.tb02062.x>
- Balandin, A. A., Ghosh, S., Bao, W., Calizo, I., Teweldebrhan, D., Miao, F., & Lau, C. N. (2008). Superior Thermal Conductivity of Single-Layer Graphene. *Nano Letters*, 8(3), 902–907. <https://doi.org/10.1021/nl0731872>
- Bharathi, K. K., Vemuri, R. S., Noor-A-Alam, M., & Ramana, C. V. (2012). Effect of annealing on the microstructure of $\text{NiFe}_{1.925}\text{Dy}_{0.075}\text{O}_4$ thin films. *Thin Solid Films*, 520(6), 1794–1798. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2011.08.086>

- Boehm, H. P., Clauss, A., Fischer, G. O., & Hofmann, U. (1962). Dünnsche Kohlenstoff-Folien. *Zeitschrift Für Naturforschung B*, *17*(3), 150–153. <https://doi.org/10.1515/znb-1962-0302>
- Boehm, H. P., Clauss, A., Fischer, G. O., & Hofmann, U. (1962). Das Adsorptionsverhalten Sehr Dünner Kohlenstoff-Folien. *Zeitschrift Für Anorganische Und Allgemeine Chemie*, *316*(3–4), 119–127. <https://doi.org/10.1002/zaac.19623160303>
- Bolotin, K. I., Sikes, K. J., Jiang, Z., Klima, M., Fudenberg, G., Hone, J., Kim, P., & Stormer, H. L. (2008). Ultrahigh electron mobility in suspended graphene. *Solid State Communications*, *146*(9–10), 351–355. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2008.02.024>
- Brabers, V. A. M. (1995). *Chapter 3 Progress in spinel ferrite research* (pp. 189–324). [https://doi.org/10.1016/S1567-2719\(05\)80032-0](https://doi.org/10.1016/S1567-2719(05)80032-0)
- Bragg, W. H. (1915). The Structure of Magnetite and the Spinel. *Nature*, *95*(2386), 561–561. <https://doi.org/10.1038/095561a0>
- Burke, K. (2012). Perspective on density functional theory. *The Journal of Chemical Physics*, *136*(15), 150901. <https://doi.org/10.1063/1.4704546>
- Castro Neto, A. H., Guinea, F., Peres, N. M. R., Novoselov, K. S., & Geim, A. K. (2009). The electronic properties of graphene. *Reviews of Modern Physics*, *81*(1), 109–162. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.81.109>
- Dreyer, D. R., Park, S., Bielawski, C. W., & Ruoff, R. S. (2010). The chemistry of graphene oxide. *Chem. Soc. Rev.*, *39*(1), 228–240. <https://doi.org/10.1039/B917103G>
- Dreyer, D. R., Ruoff, R. S., & Bielawski, C. W. (2010). From Conception to Realization: An Historical Account of Graphene and Some Perspectives for Its Future. *Angewandte Chemie International Edition*, *49*(49), 9336–9344. <https://doi.org/10.1002/anie.201003024>
- Geim, A. K., & Novoselov, K. S. (2007). The rise of graphene. *Nature Materials*, *6*(3), 183–191. <https://doi.org/10.1038/nmat1849>
- Georgakilas, V., Tiwari, J. N., Kemp, K. C., Perman, J. A., Bourlinos, A. B., Kim, K. S., & Zboril, R. (2016). Noncovalent Functionalization of Graphene and Graphene Oxide for Energy Materials, Biosensing, Catalytic, and Biomedical Applications. *Chemical Reviews*, *116*(9), 5464–5519. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.5b00620>
- Gore, S. K., & Jadhav, S. S. (2020). Chapter 1 - Basics of ferrites. In R. S. Mane & V. V. Jadhav (Eds.), *Spinel Ferrite Nanostructures for Energy Storage Devices* (pp. 1–11). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-819237-5.00001-8>
- Gore, S. K., Jadhav, S. S., Tumberphale, U. B., Shaikh, S. M., Naushad, M., & Mane, R. S. (2017). Cation distribution, magnetic properties and cubic-perovskite phase transition in bismuth-doped nickel ferrite. *Solid State Sciences*, *74*, 88–94. <https://doi.org/10.1016/j.solidstatesciences.2017.10.009>
- Grima, J. N., Winczewski, S., Mizzi, L., Grech, M. C., Cauchi, R., Gatt, R., Attard, D., Wojciechowski, K. W., & Rybicki, J. (2015). Tailoring Graphene to Achieve Negative Poisson's Ratio Properties. *Advanced Materials*, *27*(8), 1455–1459. <https://doi.org/10.1002/adma.201404106>
- Hehre, W. J., Ditchfield, R., & Pople, J. A. (1972). Self—Consistent Molecular Orbital Methods. XII. Further Extensions of Gaussian—Type Basis Sets for Use in Molecular Orbital Studies of Organic Molecules. *The Journal of Chemical Physics*, *56*(5), 2257–2261. <https://doi.org/10.1063/1.1677527>
- Hofmann, U., & Frenzel, A. (1934). Die Reduktion von Graphitoxyd mit Schwefelwasserstoff. *Kolloid-Zeitschrift*, *68*(2), 149–151. <https://doi.org/10.1007/BF01451376>

- Hofmann, U., & König, E. (1937). Untersuchungen über Graphitoxyd. *Zeitschrift Für Anorganische Und Allgemeine Chemie*, 234(4), 311–336. <https://doi.org/10.1002/zaac.19372340405>
- Hu, L., Hu, X., Wu, X., Du, C., Dai, Y., & Deng, J. (2010). Density functional calculation of transition metal adatom adsorption on graphene. *Physica B: Condensed Matter*, 405(16), 3337–3341. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2010.05.001>
- Hummers, W. S., & Offeman, R. E. (1958). Preparation of Graphitic Oxide. *Journal of the American Chemical Society*, 80(6), 1339–1339. <https://doi.org/10.1021/ja01539a017>
- Iijima, S. (1991). Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature*, 354(6348), 56–58. <https://doi.org/10.1038/354056a0>
- Iijima, S., & Ichihashi, T. (1993). Single-shell carbon nanotubes of 1-nm diameter. *Nature*, 363(6430), 603–605. <https://doi.org/10.1038/363603a0>
- Jadhav, V. V., Shirsat, S. D., Tumberphale, U. B., & Mane, R. S. (2020). Properties of ferrites. In *Spinel Ferrite Nanostructures for Energy Storage Devices* (pp. 35–50). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-819237-5.00003-1>
- Kaur, M., & Kaur, N. (2016). *Ferrites: Synthesis and Applications for Environmental Remediation* (pp. 113–136). <https://doi.org/10.1021/bk-2016-1238.ch004>
- Kim, W. Y., & Kim, K. S. (2008). Prediction of very large values of magnetoresistance in a graphene nanoribbon device. *Nature Nanotechnology*, 3(7), 408–412. <https://doi.org/10.1038/nnano.2008.163>
- Kroto, H. W., Heath, J. R., O'Brien, S. C., Curl, R. F., & Smalley, R. E. (1985). C₆₀: Buckminsterfullerene. *Nature*, 318(6042), 162–163. <https://doi.org/10.1038/318162a0>
- Lee, C., Wei, X., Kysar, J. W., & Hone, J. (2008). Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene. *Science*, 321(5887), 385–388. <https://doi.org/10.1126/science.1157996>
- Marcano, D. C., Kosynkin, D. V., Berlin, J. M., Sinitskii, A., Sun, Z., Slesarev, A., Alemany, L. B., Lu, W., & Tour, J. M. (2010). Improved Synthesis of Graphene Oxide. *ACS Nano*, 4(8), 4806–4814. <https://doi.org/10.1021/nn1006368>
- Nair, R. R., Blake, P., Grigorenko, A. N., Novoselov, K. S., Booth, T. J., Stauber, T., Peres, N. M. R., & Geim, A. K. (2008). Fine Structure Constant Defines Visual Transparency of Graphene. *Science*, 320(5881), 1308–1308. <https://doi.org/10.1126/science.1156965>
- Nakada, K., Fujita, M., Dresselhaus, G., & Dresselhaus, M. S. (1996). Edge state in graphene ribbons: Nanometer size effect and edge shape dependence. *Physical Review B*, 54(24), 17954–17961. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.17954>
- Neese, F. (2012). The ORCA program system. *WIREs Computational Molecular Science*, 2(1), 73–78. <https://doi.org/10.1002/wcms.81>
- Neto, A. C., Guinea, F., & Peres, N. M. (2006). Drawing conclusions from graphene. *Physics World*, 19(11), 33–37. <https://doi.org/10.1088/2058-7058/19/11/34>
- Nishikawa, S. (1915). Structure of Some Crystals of Spinel Group. *Proceedings of the Tokyo Mathemico-Physical Society. 2nd Series*, 8(7), 199-209_1. https://doi.org/10.11429/ptmps1907.8.7_199
- Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S. V., Grigorieva, I. V., & Firsov, A. A. (2004). Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science*, 306(5696), 666–669. <https://doi.org/10.1126/science.1102896>

- Novoselov, K. S., Jiang, Z., Zhang, Y., Morozov, S. V., Stormer, H. L., Zeitler, U., Maan, J. C., Boebinger, G. S., Kim, P., & Geim, A. K. (2007). Room-Temperature Quantum Hall Effect in Graphene. *Science*, 315(5817), 1379–1379. <https://doi.org/10.1126/science.1137201>
- Pauling, L. (1960). *The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals: An Introduction to Modern Structural Chemistry* (3rd ed.). Cornell University Press.
- Pawar, R. A., Desai, S. S., Patange, S. M., Jadhav, S. S., & Jadhav, K. M. (2017). Inter-atomic bonding and dielectric polarization in Gd³⁺ incorporated Co-Zn ferrite nanoparticles. *Physica B: Condensed Matter*, 510, 74–79. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2017.01.011>
- Pereyda Pierre, C., & Riera Aroche, R. (2018). *Mejoras en las interacciones de grafeno con metales y monosacárido* [Universidad de Sonora]. <http://www.repositorioinstitucional.uson.mx/handle/unison/1017>
- Sahoo, S., & Nayak, G. C. (2019). *Present Status and Prospect of Graphene Research* (pp. 1–29). https://doi.org/10.1007/978-3-030-30207-8_1
- Wallace, P. R. (1947). The Band Theory of Graphite. *Physical Review*, 71(9), 622–634. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.71.622>
- Zhang, Z. Z., Chang, K., & Peeters, F. M. (2008). Tuning of energy levels and optical properties of graphene quantum dots. *Physical Review B*, 77(23), 235411. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.235411>
- .

Capítulo 3 Implementación de un sensor LDV para la determinación de velocidad de un fluido bajo el régimen laminar

Chapter 3 Implementation of a LDV sensor for the determination of the velocity of a fluid under the laminar regime

LÓPEZ-RODRÍGUEZ, José del Carmen†*, FLORES-GIL, Aarón, SIERRA-GRAJEDA, Juan y MESA-CRUZ, Onésimo

Universidad Autónoma del Carmen, Campus III, con Fracc. Mundo Maya, C.P. 24115, Ciudad del Carmen, Campeche, México

ID 1^{er} Autor: *José del Carmen, López-Rodríguez* / **ORC ID:** 0000-0002-0404-0021, **CVU CONACYT ID:** 1006184

ID 1er Coautor: *Aarón, Flores-Gil* / **ORC ID:** 0000-0002-2302-2056, **CVU CONACYT ID:** 121166

ID 2^{do} Coautor: *Juan, Sierra Grajeda* / **ORC ID:** 0000-0002-0565-6450, **CVU CONACYT ID:** 219284

ID 3^{er} Coautor: *Onésimo, Mesa-Cruz* / **ORC ID:** 0000-0002-0875-6852, **CVU CONACYT ID:** 488085

DOI: 10.35429/H.2021.12.1.26.35

J. López, A. Flores, J. Sierra y O. Mesa

*020084@mail.unacar.mx

S. Figueroa, B. Pérez, J. Flores, L. Santis. (AA. VV.) Ingeniería y Ciencias Aplicadas. Handbooks-©ECORFAN-México, Campeche, 2021.

Resumen

Este trabajo presenta el diseño y la construcción de un sistema detector de velocidad láser Doppler (LDV), con elementos de bajo coste, para realizar medidas de velocidad de un fluido en régimen laminar. El sistema permite, con mínimos cambios, realizar la adquisición de datos en dos variantes experimentales, por prospección y por retrospección. Los resultados de ambos métodos fueron procesados con Matlab y comparados. Los resultados experimentales muestran que las velocidades obtenidas con ambas propuestas se ordenan según el perfil laminar parabólico de Poiseuille, verificando que la propuesta experimental describe el comportamiento esperado para fluidos en régimen laminar.

Fluido laminar, Doppler, Velocimetría, fotodiodo

Abstract

This paper presents the design and construction of a Laser Doppler Velocity (LDV) detector system, with low-cost elements, to perform velocity measurements of a fluid under laminar regime. The system allows minimal changes, to perform data acquisition in two experimental variants, by prospecting and by retrospection. The results of both methods were processed with Matlab and compared. The experimental results show that the speeds obtained with both proposals are ordered according to the Poiseuille parabolic laminar profile, verifying that the experimental proposal describes the expected behavior for fluids under laminar regime.

Laminar fluid, Doppler, Velocimetry, photodiode

3 Introducción

En este trabajo se presenta que el diseño y construcción de un sistema detector de Velocidades Láser Doppler (LDV, por sus siglas en inglés), con elementos de bajo costo, para efectuar mediciones de velocidad de un fluido bajo régimen laminar (A. Flores Gil, n.d.).

El sistema permite cambios mínimos, para realizar la adquisición de datos en dos variantes experimentales, por prospección y por retrospección. Los resultados de ambos métodos fueron procesados con Matlab y se confrontaron. Los resultados experimentales muestran que las velocidades obtenidas con ambas propuestas se ordenan según el perfil laminar parabólico de Poiseuille, comprobando que la propuesta experimental describe el comportamiento esperado para fluidos bajo régimen laminar.

3.1 Objetivos

Implementar un sistema experimental que pueda medir la velocidad de un fluido bajo régimen laminar con características específicas, a diferentes velocidades y elementos constituyentes de bajo costo.

Objetivos específicos

- Construir un prototipo para hacer fluir una muestra líquida, con velocidad de bombeo controlado y hacer fluir un fluido con características newtonianas.
- Reproducir el arreglo óptico LDV.
- Medir las velocidades de flujo de un sistema con ayuda de un láser y la técnica LDV en medios transparentes o semitransparente.

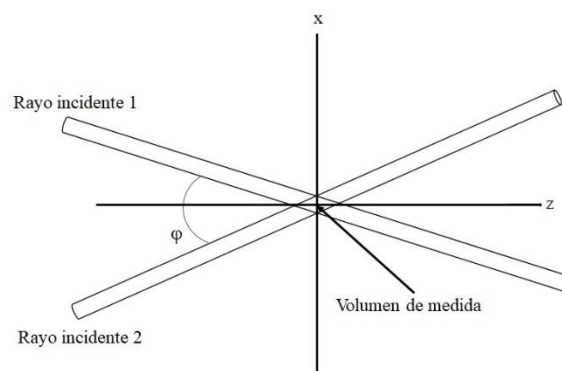
3.2 Justificación

El interés de esta propuesta de tesis es implementar un diseño similar al de (Fingerson & Menon, 2016), pero bajo la hipótesis de utilizar un láser de 650 nm de bajo costo y un sensor tipo fotodiodo de alta velocidad de respuesta, por la simplicidad del diseño se tiene una gran versatilidad, ya que con cambios mínimos en configuración de elementos, se pueden hacer pruebas en diferentes ángulos y con diferentes fluidos. De ser cierta la hipótesis, se tendrá un sistema menos robusto y costoso para medir la velocidad de fluidos en medios transparentes o semi transparentes.

3.3 Descripción de Método

La construcción e implementación de un sensor que se capaz de determinar la velocidad de un fluido bajo el régimen laminar aprovechando el funcionamiento de la técnica de anemometría láser Doppler más conocida como LDA o LDV (Haddadi et al., 2018), en esta técnica vemos cómo dos haces procedentes de un único láser se cruzan para formar el volumen de medida (Figura 3.1).

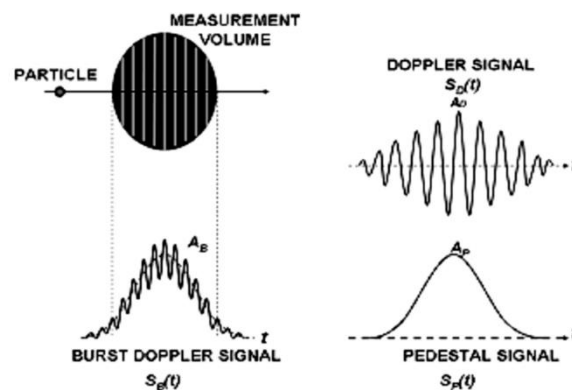
Figura 3.1 Fenómeno Doppler, volumen de medida



Fuente: Elaboración propia

La interferencia de estos dos haces produce el patrón de franjas que puede observarse en la Figura 3.2. Cuando las partículas arrastradas por el flujo atraviesan el volumen de medida, la luz dispersada por aquéllas tiene una variación en la frecuencia respecto a la luz original por efecto Doppler. Esta variación de frecuencia se denomina frecuencia Doppler f_D , y su valor es igual a la velocidad de la partícula dividida entre el espaciado entre franjas de interferencia d_f . La luz dispersada es recogida por el fotodetector que convierte la luz en señal eléctrica y hace posible la medida de su frecuencia.

Figura 3.2 Volumen de medida y señal Doppler



Fuente: (Ord, 2013)

Donde λ es la longitud de onda de la luz del láser, y φ es el ángulo entre los dos haces de luz láser. La fuente de luz utilizada en este experimento es un láser a 650 nm, se usa un cubo divisor de haz 50/50, para dividir el haz original en dos haces con intensidades aproximadamente iguales. Los dos haces paralelos mediante el uso de un espejo pasan a través de una primera lente cuyo punto focal está alineado con el centro del tubo de flujo.

La propuesta experimental se montó en un módulo como se muestra en la Figura 3.3, dicho módulo se subdivide en tres sistemas (Sistema de recirculación de fluido, Fuente laser, prismas ópticos y sistema de desplazamiento horizontal y Módulo de adquisición de datos) cada uno de los elementos de dicha propuesta se describirán posteriormente.

Figura 3.3 Propuesta experimental LDV



Fuente: Elaboración propia

3.4 Sistema de recirculación de fluido

Bomba

Para el sistema de circulación de agua empleamos una bomba jhonson modelo 2853 con voltaje de operación de 12 voltios y 3 amperes de corriente. La bomba tiene una conexión de salida de una pulgada un octavo (1-1/8"). Esta bomba es auto refrigerante, ya que es sumergible. Por la geometría y el diseño del impulsor, tiene una gran capacidad para dejar pasar partículas milimétricas (si en algún momento si tuviera que dopar el fluido con partículas).

Figura 3.4 Bomba sumergible Jhonson 2853



Fuente: Elaboración propia

Tubo de policarbonato claro

Para el área de detección se usó un tubo claro de policarbonato de una pulgada y un octavo (1-1/8”), como se muestra en la Figura 3.5, el tubo es lo suficientemente “cristalino” para dejar ver claramente a través de él. En la propuesta experimental se montó un tramo de longitud de 40 centímetros para poder tomar muestras en diferentes puntos del trayecto del fluido.

Figura 3.5 Tubo de policarbonato transparente 40 cm



Fuente: Elaboración propia

Medidor de flujo digital

Para tener un patrón de referencia de velocidad de fluido, se optó por un medidor de fluido digital, el medidor tipo turbina con lectura digital de alta confiabilidad y precisión ($\pm 1\%$). Este medidor de fluido digital es capaz de soportar diferentes fluidos como diésel, urea, queroseno, gasolina, etc.

Figura 3.6 Medidor de flujo digital (patrón de referencia)



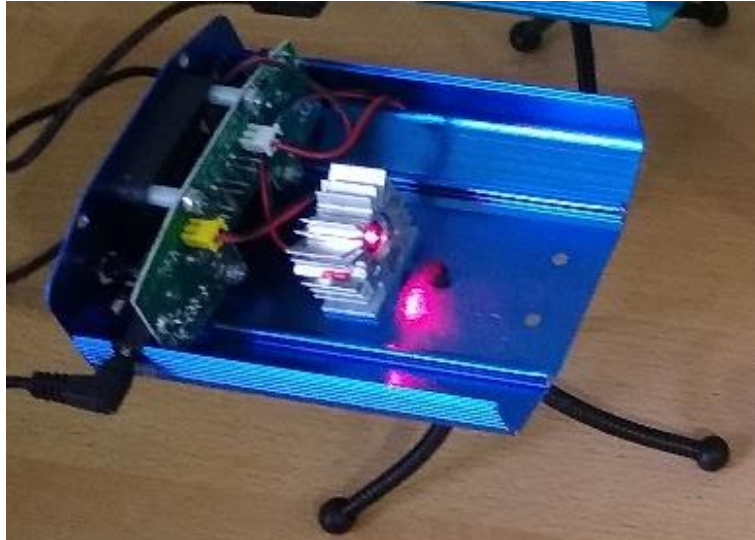
Fuente: Elaboración propia

3.5 Fuente laser, prismas ópticos y sistema de desplazamiento horizontal

Láser

Fuente láser de 650 nanómetros con 60 mW, este láser es usado como fuente de luz para nuestro sistema de emisión monocromática. Se eligió este láser por sus características de bajo costo y presencia en el mercado haciéndolo idóneo para nuestro propósito.

Figura 3.7 Laser 650 nanómetros, 60 mW



Fuente: Elaboración propia

Arreglo de prismas ópticos

La posición de las lentes biconvexas y prismas que reproducen el fenómeno Doppler, se sitúan de manera tal que el punto focal se focaliza dentro de nuestro volumen de medida. En la Figura 3.8 se muestran los elementos debidamente ubicados para la recreación del fenómeno óptico.

Figura 3.8 Arreglo óptico de prismas y lentes biconvexas

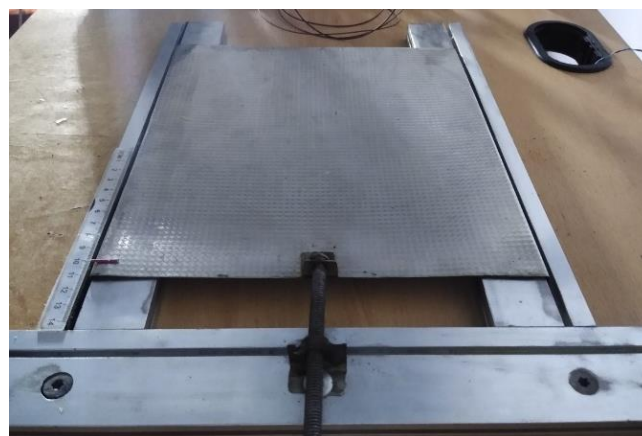


Fuente: Elaboración propia

Sistema de desplazamiento horizontal

El sistema de desplazamiento horizontal (respecto a la superficie) consta de una bandeja de acero inoxidable con rieles laterales, estos actúan como guía para que el sistema tenga un desplazamiento uniforme. Para tener control de los saltos milimétricos nos apoyamos en una escala graduada longitudinal grabada en un lateral de nuestra bandeja de desplazamiento, con esta escala determinamos visualmente el deslizamiento de nuestro sistema.

Figura 3.9 Bandeja de desplazamiento horizontal



Fuente: Elaboración propia

3.6 Módulo adquisición de datos y sistema detector

Módulo de adquisición de datos

Para la toma de muestras se optó por un osciloscopio digital “Owon” modelo SDS1022, con ancho de banda de 20 MHz, que debido a sus características consideramos que era ideal para nuestro propósito. Cuando el osciloscopio detecta ya una señal, se despliega en el display una forma de onda que hemos de interpretar como fluctuaciones de amplitud provenientes del sensor. Para ajustar los parámetros deseados usamos la escala de 500 nanosegundos con división en canal uno de 200 milivolts. Los datos son almacenados en un archivo de texto (.txt) y ordenado en dos columnas, numero de muestra y amplitud. Con este desplegado de datos podemos extraerlos de manera fácil para análisis posterior.

Figura 3.10 Osciloscopio Owon SDS1022

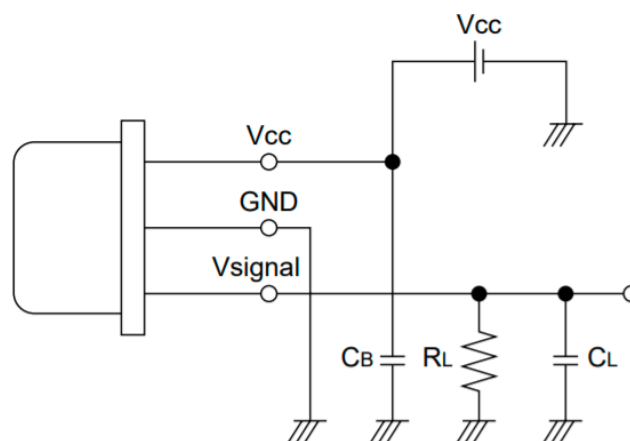


Fuente: Elaboración propia

Circuito detector

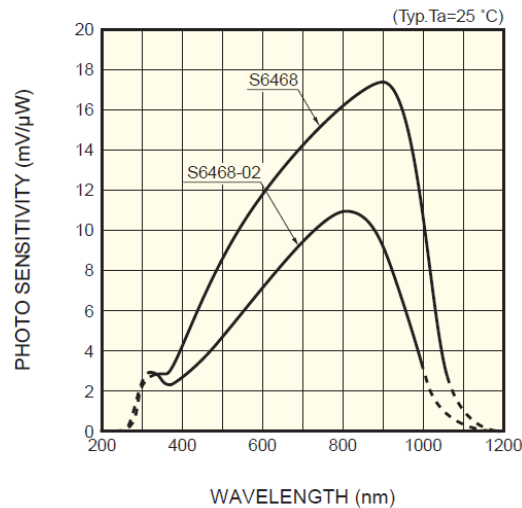
El sistema de detección con base en un fotodiodo se montó en una placa fenólica conforme a la especificación del fabricante en la Figura 3.11, se muestra el fotodiodo acompañado de elementos resistivos y capacitivos, dichos elementos tienen la función de reducir las señales parasitas (ruido), que se pudieran presentar en nuestro sistema y que son ajenas a las señales deseadas.

Figura 3.11 Diagrama de conexión de fotodiodo s6468



Fuente: (Pin, n.d.)

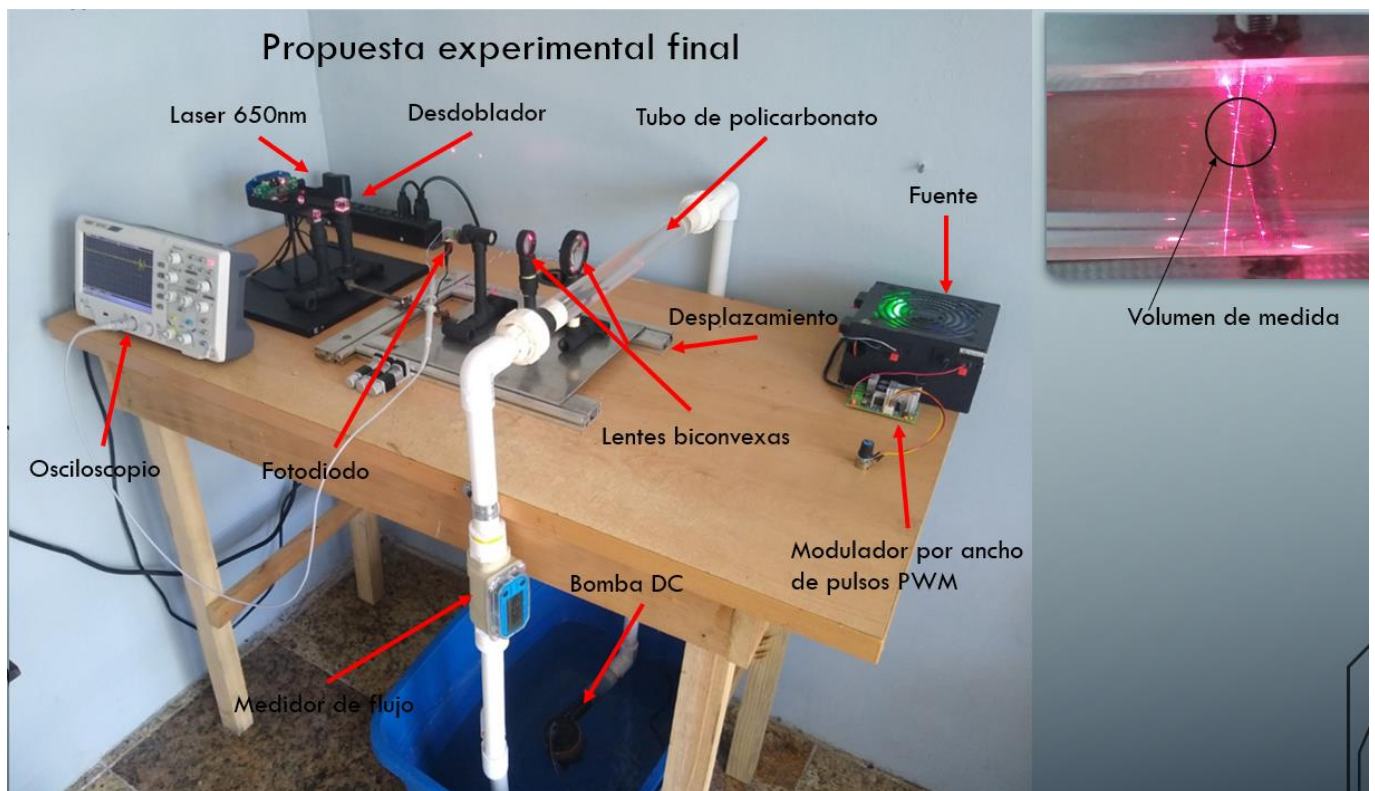
Según las características del fabricante el fotodiodo S6468 cuenta con una respuesta espectral entre 320 y 1060 nm, con una temperatura de operación típica de 25 grados Celsius. Como podemos observar en la Figura 3.11, el fotodiodo tiene la máxima sensibilidad en 900 nm, pero cuenta con una buena sensibilidad que va desde los 600 a los 1060 nm.

Figura 3.11 Foto sensibilidad fotodiodo S6468

Fuente: (Pin, n.d.)

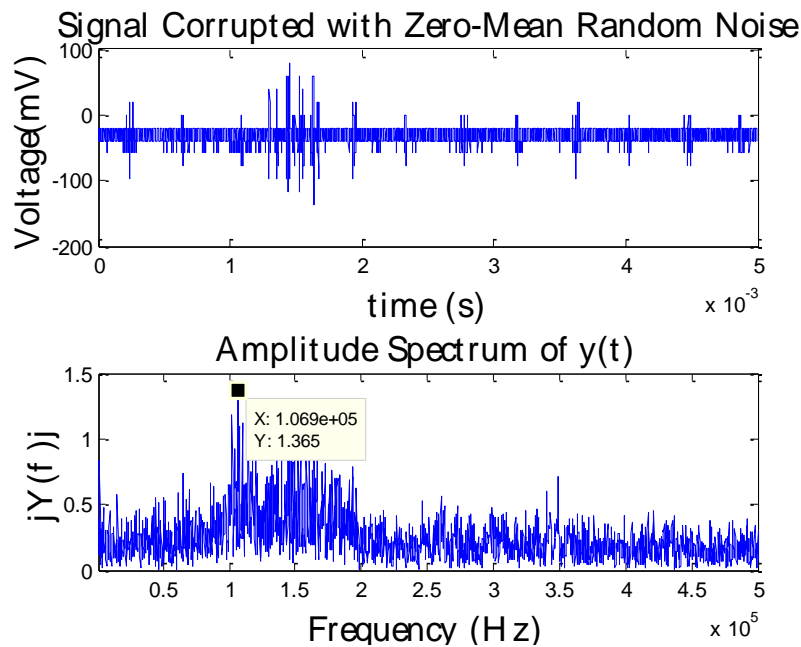
3.7 Experimento y resultados

Conforme a los datos recabados se analizaron con el programa Matlab, pasando del estado temporal al estado frecuencial usando la transformada rápida de Fourier, las gráficas resultantes muestran un cambio de estado temporal al frecuencial y nos muestra la amplitud máxima la cual interpretamos como la frecuencia Doppler experimental f_D . Posterior al análisis y durante todo el recorrido del medio, reproducimos el contorno parabólico necesario para determinar el perfil característico de los fluidos laminares.

Figura 3.12 Propuesta experimental integrando los tres submódulos

Fuente: Elaboración propia

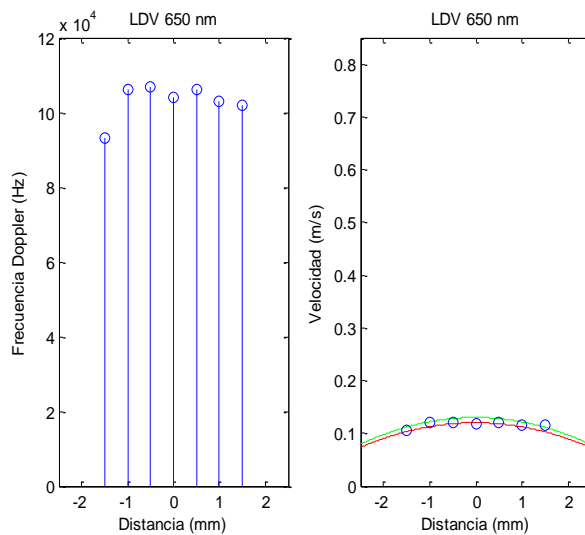
Gráfico 3.1 Transformada rápida de Fourier de temporal a frecuencial



Fuente: Elaboración propia

Con el universo de datos recabados y tomando en cuenta solo las amplitudes máximas de frecuencia se delimitaron los datos, se desplegaron los valores gráficamente de los puntos ya acotados, que demuestran que nuestro fluido se comporta de manera laminar, ya que se reproduce la parábola característica de nuestro perfil laminar.

Gráfico 3.2 Relación de frecuencia Doppler contra velocidad



Fuente: Elaboración propia

Tabla 3.1 Concentrado de velocidades en barrido horizontal del tubo de policarbonato

Dist. en mm	Muestra 1 velocidad (m/s)	Muestra 2 velocidad (m/s)	Muestra 3 velocidad (m/s)	Muestra 4 velocidad (m/s)	Muestra 5 velocidad (m/s)	Muestra 6 velocidad (m/s)
2	0.1115	0.1176	0.1165	0.1685	0.1697	0.1719
6	0.181	0.121	0.1595	0.1131	0.1244	0.1278
10	0.1629	0.1278	0.1233	0.1267	0.1188	0.1188
14	0.121	0.121	0.1165	0.1289	0.1165	0.1855
18	0.1188	0.1154	0.1482	0.1685	0.1278	0.1188
22	0.1154	0.1176	0.1176	0.1697	0.1674	0.1222
26	0.1855	0.1697	0.1165	0.1176	0.1357	0.1222

Fuente: Elaboración propia

3.8 Conclusiones

Los resultados obtenidos fueron satisfactorios, ya que se logró determinar la velocidad de flujo de un fluido bajo el régimen laminar con el método propuesto, por lo tanto, la propuesta de la implementación y construcción de un sistema de bajo costo para medir velocidad de flujo a través del fenómeno óptico Doppler fue satisfactoria, podemos aseverar que este sistema es capaz de determinar la velocidad de fluidos newtonianos que se comporten de manera laminar. El arreglo óptico con láser de 650nm y sensor tipo diodo nos proporcionaron los elementos suficientes para determinar el comportamiento de nuestro fluido.

Vale la pena resaltar que aunque bien nuestro sistema se construyó para el objetivo planteado, para realizar mediciones de frecuencias Doppler en el volumen de medida o zona de interferencia, también se le pueden hacer adecuaciones, en la cual se tenga que incluir lentes cilíndricas, y una cámara rápida y de alta sensibilidad, se puedan realizar estudios de velocimetría por imágenes de partículas, para identificar el comportamiento del fluido entre otras variantes, al pasar por zonas con obstáculos VILLA HERRERA, J. E. (2021).

3.9 Referencias

- Flores Gil, A (n.d.). *Implementación de un velocímetro láser Doppler unidimensional con fibras ópticas*.
- Fingerson, L. M., & Menon, R. K. (2016). Laser doppler velocimetry. *Handbook of Fluid Dynamics: Second Edition*, 47.1-47.14. <https://doi.org/10.2184/lj.8.484>
- Haddadi, B., Gasser, C., Jordan, C., Harasek, M., & Lendl, B. (2018). Simultaneous Laser Doppler Velocimetry and stand-off Raman spectroscopy as a novel tool to assess flow characteristics of process streams. *Chemical Engineering Journal*, 334(August 2017), 123–133. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2017.10.027>
- Ord, C. F. (2013). Implementation and calibration of a laser Doppler velocimeter in order to measure liquids velocity. *Revista Mexicana de Física*, 59(1), 84–89.
- Pin, S. (n.d.). *Si PIN photodiode with preamp S6468 series*. 4–5.
- Villa herrera, J. E. (2021). *evaluación del efecto de la obstrucción de una columna en el flujo de agua en un canal mediante velocimetría por imágenes de partículas (doctoral dissertation, universidad autónoma de chihuahua)*.

Capítulo 4 Identificación de la fuente de hidrocarburos aromáticos policíclicos persistentes en un núcleo de sedimento del sistema fluvio lagunar Atasta-Pom

Chapter 4 Identification of the source of persistent polycyclic aromatic hydrocarbons in a sediment core of the Atasta-Pom lagoon fluvial system

QUEB-SUÁREZ, José Emilio†*, RUIZ-MARÍN, Alejandro, CANEDO-LÓPEZ, Yunuen y FLORES-TRUJILLO, Juan Gabriel

Universidad Autónoma del Carmen, Facultad de Química, Calle 56 Num. 4 esq. Av. Concordia col. Benito Juárez, Ciudad del Carmen, Campeche, 24180.

ID 1^{er} Autor: *José Emilio, Queb-Suárez* / **ORC ID:** 0000-0002-4530-5233, **CVU CONACYT ID:** 1082478

ID 1^{er} Coautor: *Alejandro, Ruiz-Marín* / **ORC ID:** 0000-0001-5075-9611, **CVU CONACYT ID:** 208285

ID 2^{do} Coautor: *Yunen, Canedo-López* / **ORC ID:** 0000-0003-1791-4899, **CVU CONACYT ID:** 91434

ID 3^{er} Coautor: *Juan Gabriel, Flores-Trujillo* / **ORC ID:** 0000-0002-6221-216X, **CVU CONACYT ID:** 36684

DOI: 10.35429/H.2021.12.1.36.48

J. Queb, A. Ruiz, Y. Canedo y J. Flores

*091534@mail.unacar.mx

S. Figueroa, B. Pérez, J. Flores, L. Santis. (AA. VV.) Ingeniería y Ciencias Aplicadas. Handbooks-©ECORFAN-México, Campeche, 2021.

Resumen

En el presente trabajo se recogió un núcleo de sedimento para identificar las fuentes de contaminación por hidrocarburos aromáticos policíclicos persistentes del sistema fluvial de la laguna de Atasta-Pom. Se determinaron dos grupos de compuestos por métodos cromatográficos, los hidrocarburos alifáticos (HAs) y los hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAPs). Los HAs presentaron concentraciones entre 3.9 y 384.6 ng g⁻¹, que se asocian a un tipo de origen biogénico. Las concentraciones de HAPs se situaron entre 75.6 y 527.04 ng g⁻¹. El índice molecular LMW/HMW muestra un claro predominio de HAPs o de origen pirolítico. Los compuestos más frecuentes fueron el benzo (A) pireno con un 15.48%, seguido del fluoranteno con un 13.57%, cada uno de los cuales tiende a ser persistente y a proceder de las emisiones vehiculares, por lo que son tóxicos y mutagénicos. Mediante un análisis granulométrico se determinan los porcentajes de arenas, arcillas y limos, teniendo estos últimos una mayor predominancia en los tramos B y C (0.2-0.6 m y 0.6-1 m de profundidad respectivamente) asociando esto a un mayor contenido de materia orgánica, fuentes alóctonas y condiciones de baja energía. En el caso de las arenas hubo un mayor porcentaje en la sección A (0-0.2 m de profundidad) al que se atribuyen bajos porcentajes de materia orgánica y condiciones de alta energía (mayor dinámica).

HAPs, persistentes, fuentes de contaminación, núcleo de sedimento, índice molecular

Abstract

In the present work, a sediment core was collected to identify the sources of contamination by persistent polycyclic aromatic hydrocarbons of the Atasta-Pom lagoon fluvial-system. Two groups of compounds were determined by chromatographic methods, aliphatic hydrocarbons (HAs) and polycyclic aromatic hydrocarbons (HAPs). The HAs presented concentrations between 3.9 and 384.6 ng g⁻¹, which are associated with a type of biogenic origin. The concentrations of HAPs were between 75.6 and 527.04 ng g⁻¹. The molecular index LMW/HMW shower a clear dominance of HAPs or pyrolytic origin. The most frequent compounds were benzo (A) pyrene with 15.48%, followed of fluoranthene with 13.57%, each one tends to be persistent and coming from vehicular emissions, therefore, they are toxic and mutagenic. By a granulometric analysis, the percentages of sand, clay and silt are determined, the latter having a greater predominance in sections B and C (0.2-0.6 m y 0.6-1 m depth respectively) associating this with a higher content of organic matter, alloctonic sources and low energy conditions. For sands there was a higher percentage in section A (0-0.2 m deep) to which low percentages of organic matter and high energy conditions (greater dynamics) are attributed.

HAPs, persistent, sources of contamination, sediment core, molecular index

4.1 Introducción

Como consecuencia de actividades antropogénicas, en las cuales se incluye la actividad industrial y la agricultura, así como al proceso acelerado de urbanización (Contreras-Espinosa y Warner, 2004), muchos contaminantes orgánicos tienen como depósito principal y final a los sedimentos, en particular los grupos de contaminantes orgánicos persistentes incluidos los hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAPs), que son de especial interés, debido a que son cancerígenos, bioacumulativos, mutagénicos y difíciles de biodegradar (Vagi et al., 2005). Estos HAPs se distribuyen ampliamente en diversos medios ambientales como la atmósfera, el agua, el suelo, los sedimentos y los organismos (García-Martínez et al., 2005). Los HAPs de origen antropogénico pueden ingresar al medio acuático de forma directa e indirecta por escorrentías, transporte atmosférico y deposición, para luego ser adsorbidos por partículas sedimentarias en ecosistemas (Sánchez-Palencia et al., 2015; Yunker et al., 2002).

Debido a su persistencia, los HAPs se han encontrado distribuidos en océanos, zonas costeras y ríos; tanto en agua como en sedimentos (Botello et al., 1995; Loviso et al., 2015). Es evidente que las concentraciones de HAPs son mayores en sedimento que en la fase líquida. Esta dinámica ocurre con la mayoría de HAPs que entran a los cuerpos de agua, por lo que eventualmente se acumulan en los sedimentos superficiales (García-Martínez et al., 2005), constituyendo a un reservorio del contaminante a largo plazo (Jiao, 2009), esto representa una amenaza para los organismos acuáticos debido a una acumulación a niveles que puedan perjudicar las funciones biológicas normales y transferir dichos contaminantes a través de las redes tróficas, provocando impactos en el medio ambiente, en las poblaciones de vida silvestre y riesgos para la salud humana (Calamari, 2002).

La Agencia de Protección Ambiental de los Estados Unidos (US EPA) clasifica dieciséis HAPs como contaminantes prioritarios (Qiao et al., 2006). La mayoría se generan por combustión incompleta de material orgánico, principalmente fuentes fósiles (origen pirolítico), descarga de petróleo y sus derivados (origen petrogénico) y transformación biogénica (origen biagénico) (Tolga-Gonul y FilizKucuksezgin 2012).

Los sistemas de manglares son los ecosistemas más desarrollados y ecológicamente diversos en el sureste de México. Situados en zonas costeras y estuarinas, las cuales presentan una inmensa biodiversidad, también son importantes para prevenir la erosión costera, así como ayudar en el control de inundaciones y presentan un entorno primario para la deposición y acumulación de contaminantes (Agrawala et al., 2004). Otra característica del manglar es que tiene un alto contenido de carbono orgánico, lo que crea condiciones anóxicas en sedimentos con alto contenido de detritus (Raza et al., 2013).

La región costera del Golfo de México es particularmente vulnerable a cambios climáticos por su topografía relativamente plana (Fernández et al., 2011), además es un sistema muy dinámico, debido a su relación entre ambientes marinos y terrestres, en el cual se llevan a cabo procesos físicos, químicos y ecológicos (Ridgway y Shimmield, 2002). El Área de Protección de Flora y Fauna de la Laguna de Términos (APFFLT) presenta una biodiversidad de asociaciones vegetales tanto acuáticas como terrestres, hábitats críticos para especies pesqueras de interés comercial, una importante zona de anidación para tortugas marinas y aves migratorias. También tiene una gran importancia por la abundancia de recursos naturales renovables de interés comercial, así como las actividades de exploración y explotación de petróleo (PEMEX), entre otras (Ayala-Pérez et al., 2003). Por este motivo, la amenaza continua al deterioro ambiental por las actividades antropogénicas en esta región ha propiciado al estudio, monitoreo en agua y sedimento de contaminantes, lo cual contribuye a propuestas que minimicen el impacto ambiental y al desarrollo de una gestión ambiental eficiente (Fuentes et al., 2012).

Dentro del APFFLT se ubican las lagunas de Atasta-Pom comunicadas entre sí por un angosto canal, que cubren un área aproximada de 80 km^2 . Este canal es el remanente de la porción central del cuerpo lagunar que por los procesos hidrodinámicos y de sedimentación ha experimentado un profundo angostamiento, con acreción de pantanos de manglar.

Bajo ciertas condiciones los núcleos de sedimento son capaces de conservar las secuencias históricas de contaminación y permiten determinar los niveles en el fondo, así como las variaciones en las entradas por largos periodos de tiempo (Liaghati et al., 2003). También permite estudiar la respuesta de los contaminantes tanto por las distintas poblaciones, como las actividades desarrolladas a lo largo de estas, así como la gestión realizada para la protección ambiental.

Por este motivo el presente estudio tiene como objetivo determinar los niveles de hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAPs) en núcleos de sedimentos extraídos dentro del sistema fluvio lagunar Atasta-Pom de la Laguna de Términos, con la finalidad de identificar las concentraciones, persistencia o tasa de degradación, relación con las características sedimentarias y posibles fuentes de emisión que se han dado a lo largo del tiempo. Para esto, el estudio se dividió en 7 secciones metodológicas, iniciando con el muestreo para la extracción del núcleo de sedimento, seguido del submuestreo y acondicionamiento de la muestra, para posteriormente realizar el análisis de hidrocarburos para la identificación y cuantificación, así como determinar las posibles fuentes de estos. En las últimas tres etapas se realiza la determinación de la materia orgánica, carbono orgánico e inorgánico y granulometría, todo esto para analizar la relación que existe entre estas características y la concentración de los HAPs.

4.2 Descripción del método

4.2.1 Área de estudio

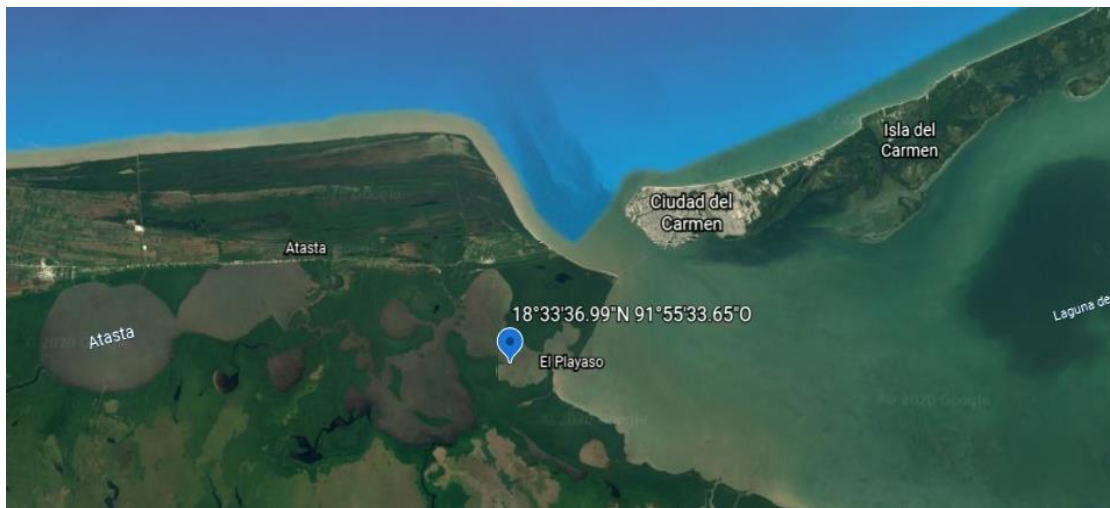
El sistema Atasta-Pom se encuentra en la porción occidental de la Laguna de Términos entre los $18^{\circ}30'$ y $18^{\circ}35'$ N y los $91^{\circ}50'$ y $92^{\circ}20'$ W. Queda comprendido dentro de la llanura costera de Campeche formada por los ríos Grijalva y Usumacinta (Gutierrez-Estrada et al., 1982).

Este sistema alargado y paralelo a la línea de costa, queda limitado por la Boca de Atasta, la cual lo comunica con la Laguna de Términos, y por la Laguna Colorada. Parte del drenaje estacional de agua dulce de los ríos San Pedro y San Pablo, en el límite entre los estados de Tabasco y Campeche, fluye a través del sistema. Ramos-Miranda y colaboradores (2006) mencionan que este sistema está formado por más de 10 lagunas interiores de dimensiones variables, con una superficie total aproximada de 300 km², y una profundidad promedio de 2.7 m. Atasta y Pom son las más grandes lagunas interiores y sostienen bancos de almeja (*Rangia cuneata*) y de ostión (*Crassostrea virginica*). El sistema lagunar está dominado por sedimentos limo arcillosos con gran cantidad de concha entera y bajo contenido de carbonato de calcio (<25%). El manglar circunda al sistema y se encuentra representado en las partes más bajas, por *Rhizophora mangle*, seguido por *Avicenia germinans* y escasos árboles de *Laguncularia racemosa*.

4.2.2 Muestreo

La obtención del núcleo de sedimento se realizó el 29 de septiembre del 2018, en la Laguna de los Negros (Figura 4.1) el cual forma parte del sistema lagunar Atasta-Pom. Para la obtención se preparó un tubo de PVC de aproximadamente 2 metros de largo, sellado en un extremo para evitar pérdida de sedimento.

Figura 4.1 Localización del núcleo de sedimento



Fuente: Google earth

Al llegar a las zonas de extracción se tomaron las coordenadas del lugar con un GPS para el registro, al mismo tiempo se hundió el tubo de PVC en el sedimento de la laguna y se martilló hasta obtener una profundidad que permitiera sellar el tubo de PVC en la parte superior fuera del agua. Una vez sellado el tubo, se extrajo manteniendo la verticalidad para ser sellado en la parte inferior y ser llevado al laboratorio.

4.2.3 Submuestreo

El núcleo se llevó al laboratorio de Centro de Investigación, Servicios Petroleros y Protección Ambiental (CEISPPA), ubicado en las instalaciones de la Facultad de Ingeniería en Campus III de la Universidad Autónoma del Carmen, donde se realizó el procedimiento de submuestreo. El primer paso fue seccionar el núcleo longitudinalmente, por lo que se obtuvieron dos partes. Posteriormente las dos mitades longitudinales del núcleo, se seccionaron centímetro a centímetro obteniendo 173 muestras individuales del núcleo, las cuales se mantuvieron en congelación.

4.2.4 Acondicionamiento de la muestra

El pretratamiento de muestra consistió en un proceso de secado en frío, en el cual se introdujeron 170 muestras en lotes de 36 en un liofilizador por 6 horas aproximadamente, una vez transcurrido el tiempo, se colocaron las muestras en crisoles de porcelana y se introdujeron al horno de secado a 60°C por 24 horas para eliminar rastros de humedad y así preservar la materia orgánica intacta. Posteriormente, se utilizó un mortero con pistilo para llevar a cabo el proceso de molienda para su posterior tamizado a través de un tamiz de 0.5 µm y luego regresar las muestras tamizadas a sus recipientes iniciales.

4.2.5 Análisis de hidrocarburos

4.2.5.1 Extracción de hidrocarburos

Para realizar el análisis de HAPs, después del secado y la molienda, se pesó aproximadamente 20 g de cada muestra y se colocó en dedales de fibra de vidrio. La extracción de hidrocarburos se realizó con un extractor Soxhlet usando 200 mL de diclorometano en un matraz redondo de fondo plano a reflujo durante ocho horas. Después del tiempo asignado, los extractos se enfriaron y cualquier disolvente restante se evaporó utilizando columnas Snyder hasta alcanzar un volumen de extracto de 5 ml. El extracto se colocó en viales de color ámbar y se concentró adicionalmente hasta un volumen de 1.5 ml usando flujo de nitrógeno. El control de calidad del procedimiento de extracción se logró mediante la inclusión de un estándar de arena pura en cada lote de muestra para evaluar la precisión del trabajo.

4.2.5.2 Purificación y extracción de los hidrocarburos

La purificación y separación de las fracciones alifáticas y aromáticas se realizó utilizando una columna cromatográfica de vidrio con válvula de teflón. Se insertó un tapón de lana de vidrio y la columna se empaquetó en seco en este orden: 1 cm de sulfato de sodio, 10 g de alúmina, 20 g de gel de sílice parcialmente desactivado, 1 cm de sulfato de sodio y finalmente 1 cm de polvo de cobre. Luego se agregaron 30 mL de cloruro de metileno y la válvula se abrió hasta un punto que permitió el flujo, pero asegurando que la columna siempre contenga solvente. Cuando el disolvente alcanzó la superficie del cobre, se añadió inmediatamente un extracto de muestra concentrado. La elución de la primera fracción (hidrocarburos alifáticos) se realizó con 100 ml de hexano. A esto siguió la elución de la segunda fracción (hidrocarburos aromáticos) con 100 ml de hexano y 100 ml de cloruro de metileno. Ambas fracciones se concentraron evaporando el disolvente con un flujo de nitrógeno puro (99,99%) hasta alcanzar un volumen de 1.5 mL. Estas fracciones concentradas se almacenaron para su posterior análisis y cuantificación por cromatografía de gases.

4.2.5.3 Cuantificación de los hidrocarburos

La concentración de hidrocarburos se determinó por extracción de las muestras de sedimento de acuerdo con la metodología descrita en el método estándar NOM-138-SEMARNAT/SS y método 9071-EPA. El análisis de la fracción de hidrocarburos se realizó por cromatografía de gases (CG). Un cromatógrafo Agilent Technology modelo 7890 fue usado, con detector de ionización de flama (FID) y columna capilar de 30 m x 0.32 mm y, 0.25 μm de capa de espesor. Fue utilizado nitrógeno como gas acarreador a un flujo de 1.5 mL min^{-1} . La temperatura del inyector y detector fue de 350°C y 360°C, respectivamente, y un programa de calentamiento del horno de 50°C por 4 min y una tasa de 10° min^{-1} hasta 300°C y mantenido por 15 min. Se realizaron análisis para 16 congéneres de HAP: acenafteno, 2-metilnaftaleno, antraceno, acenaftileno, fenantreno, fluoreno, fluoranteno, pireno, criseno, dibenzo [a] antraceno, benzo [a] fluoranteno, benzo [k] fluoranteno, benzo [a] pireno, indeno [1,2,3-cd] pireno, benzo [g, h, i] perileno y dibenzo [a, h] antraceno.

4.2.6 Determinación de la materia orgánica (M.O)

La determinación de materia orgánica se realizó en base a la NOM-021-RECONT-200, utilizando el método de Walkley y Black. La determinación de materia orgánica en suelos se evaluó a través del contenido de carbono orgánico. El método de Walkley y Black se basa en la oxidación del carbono orgánico del suelo por medio de una disolución de dicromato de potasio y el calor de reacción que se genera al mezclarla con ácido sulfúrico concentrado. Después de un cierto tiempo de espera la mezcla se diluye, se adiciona ácido fosfórico para evitar interferencias de Fe^{3+} y el dicromato de potasio residual se valoró con sulfato ferroso.

Se pesaron 0.5 g de sedimento y se colocó en un matraz Erlenmeyer de 500 mL, posteriormente se adicionaron 10 mL de $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ 1N y se giró lentamente el matraz para que la muestra entrara en contacto con todo el suelo. Se agregaron 20 mL de H_2SO_4 concentrado a la suspensión utilizando una pipeta volumétrica graduada de 20 mL, se giró nuevamente el matraz durante un minuto y se dejó reposar por 30 min. Después, se adicionaron 200 mL de agua destilada y 5 mL de H_3PO_4 concentrado y además se agregaron 5 gotas de indicador de difenilamina y se tituló con una solución de sulfato ferroso hasta su punto final verde claro.

Desarrollo matemático.

Para los cálculos se utilizó la ecuación (1)

$$\%C_{org} = \frac{BT}{g} (N)(0.39)mcf \quad (1)$$

Donde:

B = Volumen de sulfato ferroso gastado para valorar el blanco de reactivos (ml)

T = Volumen de sulfato ferroso gastado para valorar la muestra (ml)

N = Normalidad exacta del sulfato ferroso anteriormente valorado

g = Peso de la muestra empleada (g)

mcf = Factor de corrección de humedad

El factor 0.39 resulta de multiplicar el peso miliequivalente del C con un factor de corrección donde se supone que el método sólo oxida el 77% del C y convertirlo a porcentaje.

$$\left(\frac{12}{4000} \times \frac{1}{0.77} \times 100 = 0.39 \right) \quad (2)$$

$$\%M.O = \%C_{org} \times 1.724 \quad (3)$$

Se usa el factor de Van Benmeien de 1.724 para estimar la materia orgánica (M.O), a partir del C_{org} , el cual resulta de la suposición de que la materia orgánica contiene 58% de C.

4.2.7 Determinación del carbono inorgánico

Para el análisis de carbono inorgánico (C_i), se utilizó el método de titulación simple (Loeppert y Suarez, 1996). Para ello se pesó 5 g de muestra y se colocó en un frasco de reacción, distribuyendo la muestra alrededor de las paredes del frasco para aumentar la superficie de contacto, posteriormente se colocó un vaso de precipitado con 5 mL de solución de NaOH 2 M en el centro del frasco. Después se le agregó 20 mL de HCl 2M sobre la muestra de suelo evitando verter ácido en el vaso de precipitado y se cerró el frasco de reacción inmediatamente para evitar pérdidas de dióxido de carbono. Se movió suavemente el frasco para garantizar el contacto total del ácido con el sedimento y se dejó reposar por 24 h. Una vez transcurrido el tiempo de reacción, se extrajo el vaso de precipitado con la muestra de NaOH (donde se captura el H_2CO_3 y reacciona produciendo nuevamente la sal), se traspasó a un matraz Erlenmeyer de 250 mL, se adicionó 5 mL de agua destilada para obtener un volumen final de 10 mL. Posteriormente se le agregó 3 gotas de indicador de fenolftaleína y se tituló con HCl 1 M hasta que la muestra perdiera completamente el color rosado. Seguidamente se le agregó 5 gotas de indicador verde bromocresol y se tituló hasta el punto final (de un color azul claro hasta una coloración amarilla) con HCl 0.1 M. Se registró el volumen de HCl 0.1M para calcular el % de C_i .

4.2.8 Determinación de granulometría

El análisis granulométrico se llevó a cabo en el laboratorio de biogeoquímica y contaminación marina del Instituto de Investigaciones Oceanográficas de la Universidad Autónoma de Baja California utilizando un granulómetro por difracción láser LA-960 Horiba, granulómetro por difracción láser fabricado por la marca Horiba el cual cuenta con 87 detectores de fotodiodos de silicón espaciados logarítmicamente cubriendo un rango de 0.006 – 165.7 grados para medir las distribuciones del tamaño de partículas. Se hacen las mediciones con dos fuentes de luz, un diodo láser rojo y luz led azul, lo cual permite la detección de nanómetros a milímetros con un solo equipamiento óptico. La luz LED (azul) y el diodo láser, ambos de alta durabilidad y estado sólido son enviados a través de lentes de proyección hacia una celda de flujo, la cual, difracta los rayos de luz a sensores de luz de amplio ángulo dispersados al frente y a tras de la celda de flujo. Se analizaron 50 muestras de los 100 centímetros superiores.

4.3 Resultados

4.3.1 Hidrocarburos alifáticos (HAs)

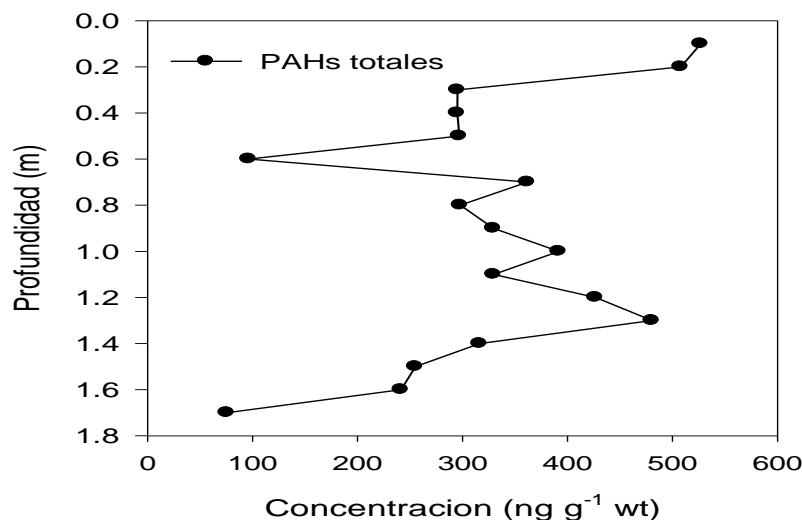
Los HAs se encontraron en concentraciones bajas en un intervalo de 3.99 a 384.61 ng g⁻¹ este último en la parte superficial del núcleo. La baja concentración de estos compuestos se debe a que hay procesos de degradación, siendo estos los primeros en degradarse. La ausencia de HAs como el fitano y el pristano indican que estos no son derivados del petróleo, sino de un proceso de biogénesis.

4.3.2 Hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAPs)

Los HAPs pueden llegar de diferentes formas a los ambientes marinos entre los cuales están, la deposición atmosférica, descargas de ríos en aguas costeras o descargas directas de actividades antropogénicas (Yunker et al., 2002). Una vez en los ambientes acuáticos, los HAPs se combinan con la fase disuelta (DP), la suspensión de material particulado (SPM) y el sedimento.

La concentración de HAPs totales variaron entre 75.67 y 527.04 ng g⁻¹ peso en seco (Figura 4.2). Si se analiza desde el fondo se observa una menor concentración (75.67 ng g⁻¹) hacia la superficie se observa un aumento en la concentración de los HAPs, la cual se mantiene constante hasta tener un aumento a los 0.2 m y posteriormente a los 0.1 m de profundidad donde se encuentra la mayor concentración (527.04 ng g⁻¹) que es la parte superficial lo que explica la alta concentración de estos.

Figura 4.2 Perfil de concentración de HAPs totales



Según Soclo et al., (2000) para tratar de establecer el origen de estos compuestos en los sedimentos se utiliza un índice de HAPs el cual es LMW/HMW (bajo peso molecular/alto peso molecular) el cual indica que valores <1 tienen un origen de tipo pirolítico y valores >1 tienen un origen de tipo petrogénico.

En el Figura 4.3 en general se observa que, a partir de los índices calculados, indica que los HAPs son originados por fuentes de tipo pirolítica principalmente. Esto coincide con lo reportado por Ponce y Botello (2005) quienes señalan que las fuentes de HAPs presentes en los diversos ambientes marinos y costeros del Golfo de México son los procesos pirolíticos, originados por la combustión de combustibles fósiles a altas temperaturas. También se observa que en la parte superficial (0.4-0.1 m) hay una predominancia de origen petrogénico los cuales pueden ser debido a derrames de pequeñas embarcaciones y aguas residuales.

De acuerdo con Sidiqqi et al., (2009) en general el petróleo y sus productos contienen una alta concentración de HAPs de dos y tres anillos bencénicos, mientras que Sanders et al. (2002) mencionan que los HAPs de 4 a 6 anillos bencénicos provienen principalmente de fuentes pirolíticas como la combustión de madera y de combustibles fósiles, emisiones vehiculares e incendios forestales.

Lo anterior se demuestra con los porcentajes de los HAPs totales que estuvieron presentes en el núcleo (Figura 4.4), en el que se observa que el compuesto con mayor porcentaje es en benzo (A) pireno con un 15.48 %, seguido del fluoranteno con un 13.57%. También se puede observar bajos porcentajes de algunos compuestos como el fenantreno, acenaftileno, indeno (1,2,3-Cd) y Benzo (A) antraceno, así como ausencia del pireno.

El Benzo(A) pireno y el Dibenzo (A,H) antraceno son compuestos que se derivan de la combustión de combustible fósil llegando al ambiente mediante emisiones vehiculares (Xiao et al., 2008; Dickhut et al., 2000).

El Indeno (1,2,3- Cd) pireno también es característico de emisiones vehiculares, así como de la quema de carbón (Dickhut et al., 2000), el Benzo (GHI) perileno es un HAPs típico generado por la combustión de petróleo (Zhang et al., 1993).

El Benzo (a) antraceno y el Criseno se originan por la combustión de carbón (Wang-Li et al. 2010), aunque el último mencionado también se ha encontrado en el petróleo crudo (Cutz y Rendón, 2007).

Figura 4.3 Perfil de fuentes de emisión de los HAPs

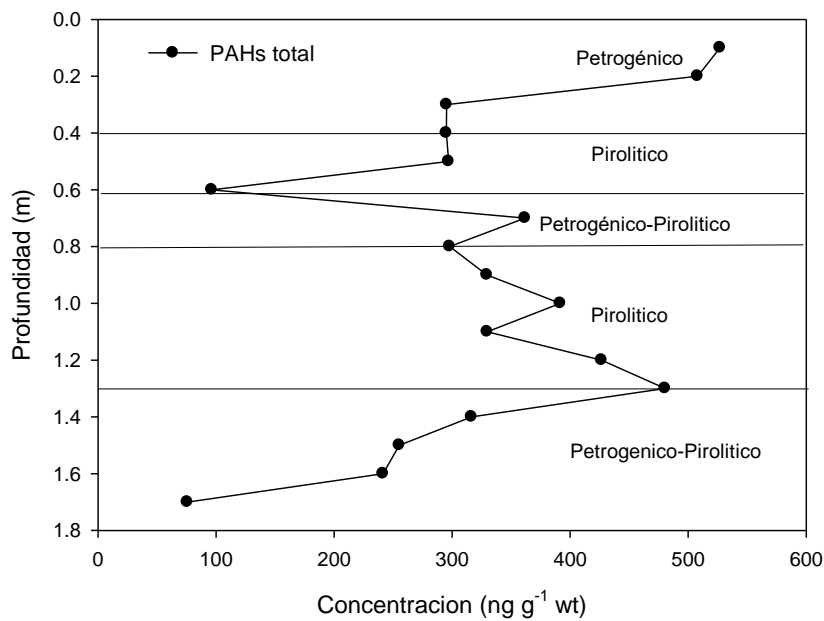
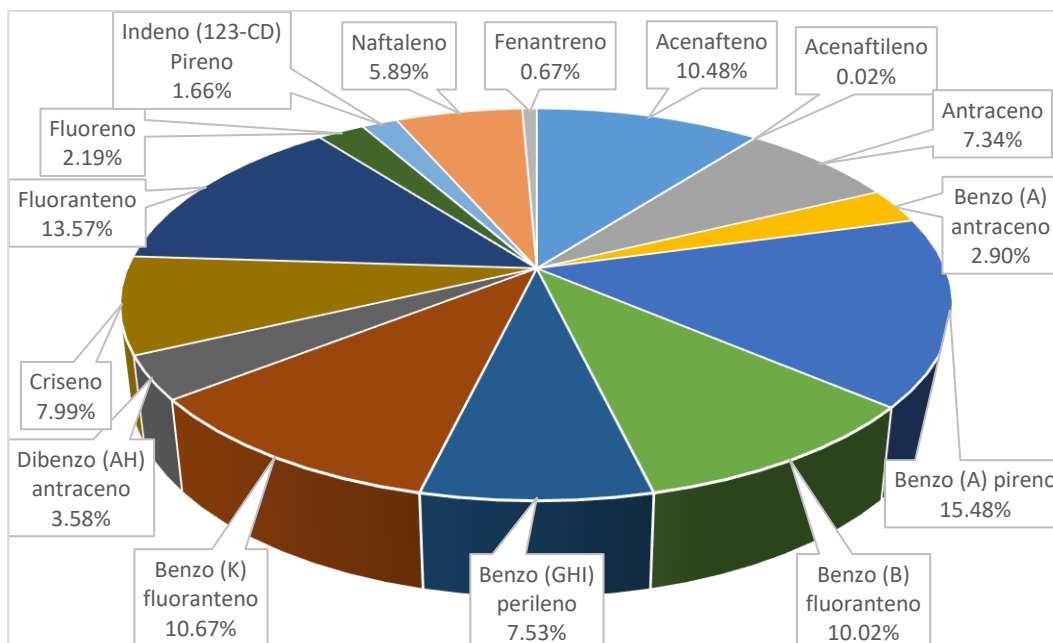


Figura 4.4 Porcentaje de HAPs totales presentes en el núcleo de sedimento



4.3.2 Determinación de la materia orgánica y carbón inorgánico

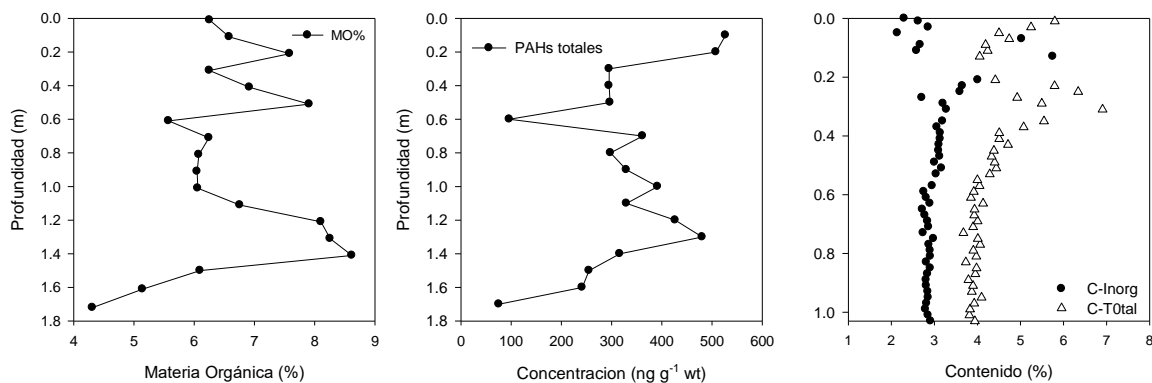
La determinación de CO en sedimentos se utiliza como indicador de contaminación ya que sus niveles son proporcionales a los de la materia orgánica, la cual tiene afinidad por metales traza y compuestos orgánicos (EPA, 2002). Los menores porcentajes de carbono inorgánico con respecto al orgánico, indica procesos de degradación el cual se mantiene constante.

Los sedimentos con alto contenido de CO se caracterizan por aportes alóctonos, mientras que los sedimentos con porcentajes bajos de CO son atribuidos a fuentes autóctonas. (Stephen et al., 2008).

En la Figura 4.5 se muestran las características de los sedimentos que se obtuvieron para el núcleo, las cuales se dividen en 4 secciones (A, B, C, D). La gráfica de materia orgánica (a) muestra que de la sección D a la sección C hay un incremento de materia orgánica y de la sección C a la sección A hay una disminución de este mismo, en el caso de la gráfica de contenido de carbón orgánico e inorgánico se observa que de la sección D a la sección B tiene un comportamiento homogéneo y de la sección B a la sección A presenta una variación.

El gráfico de materia orgánica tiene un patrón similar a las gráficas de concentración de HAPs totales (b) y al contenido de carbón orgánico total (c), lo que demuestra la relación que existe entre estas características. Además de su relación estas gráficas muestran un alto porcentaje tanto de materia orgánica como de contenido de carbón orgánico total el cual es un factor favorable que conduce a la persistencia de hidrocarburos en los sedimentos. Esto se debe principalmente a que se encuentra en una zona de manglar (fuente autóctona) y al material erosionado y lixiviado, así como los aportes antropogénicos como las descargas industriales y municipales que llegan principalmente a través de los ríos como el Grijalva-Usumacinta y drenajes (Flores et al., 1990; Preston y Prodduturu, 1992), lo que coincide con Gutiérrez et al. (2000) el cual menciona que los valores altos de CO en las zonas estuarinas se asocian con el aporte de materia orgánica derivada de la presencia de pastos marinos y manglar.

Figura 4.5 Características sedimentológicas observadas en el núcleo de sedimento: a) materia orgánica; b) concentración de HAPs totales; c) contenido de carbón orgánico total y carbón inorgánico



4.3.3 Determinación de granulometría

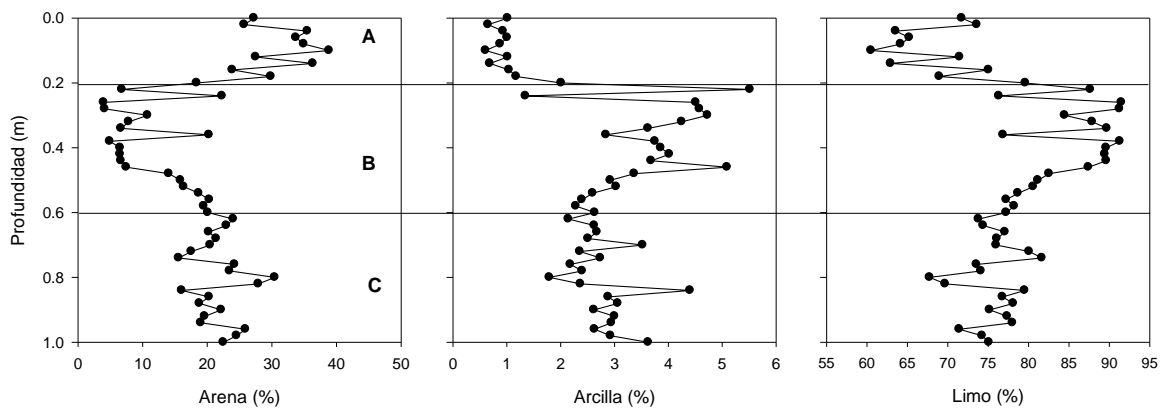
Con este análisis se busca establecer los cambios estratigráficos que están relacionados con los distintos procesos que afectan el nivel de energía en el área de estudio. Debido a la variación temporal de mareas, norte y tormentas tropicales, así como los fenómenos interanuales del niño y la niña con los cuales se depositan partículas con mayor tamaño debido a la alta energía en el sistema y en ausencia de los procesos antes mencionados existe un sistema de baja energía, con el cual se tendrá un menor tamaño de partículas depositadas en el área. También se busca definir la relación que tienen los tamaños de estas partículas con la concentración de los HAPs.

En la Figura 4.6 se muestra un perfil granulométrico de 1 m de profundidad de los porcentajes de arenas, arcillas y limo, la cual se divide en 3 secciones (A, B, C). El análisis se inicia desde el fondo sección C en el que se observa un contenido medio de arenas (aproximadamente 23%), un bajo contenido de arcilla (3%) y un alto contenido de limo (67% a 82%). Stephen et al., (2008) mencionan que alto contenido de sedimento fino está asociado con zonas protegidas, someras y de escasa circulación con presencia de pastos marinos y/o manglar.

En la sección B se observa una disminución en el porcentaje de arenas (de 22 a 8% aproximadamente), mientras que para las arcillas y limos hubo un aumento considerable principalmente en los limos (de 75 a 92% aproximadamente) lo que puede estar relacionado con un sistema de baja energía y con aportes fluviales (Calva y Torres, 2011).

En la sección A se observa una disminución de las arcillas (casi nulo) y limos (60% aproximadamente), para el caso de las arenas hay un incremento (40% aproximadamente) lo que puede estar relacionado con que está cerca de la superficie donde hay un sistema con mayor energía (oleaje). Esto coincide con lo mencionado por Flemming (2000) y Grentz et al., (2010) quienes mencionan que los sedimentos arenosos indican deposición bajo condiciones de alta energía, presentándose mayores porcentajes en las bocas de comunicación con el mar, así como en zonas cercanas a estas o con mayor influencia marina.

Figura 4.6 Perfil granulométrico de arenas, arcillas y limos



4.4 Agradecimiento

Un agradecimiento especial al Programa de Investigación en Cambio Climático (PINCC), de la universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), por el apoyo económico al proyecto “Variabilidad climática en el siglo XX en la región hidrológica prioritaria Laguna de términos, Campeche” del cual surgió el presente trabajo. Igualmente, agradecemos a la Dra. Maricarmen Ávila López por su apoyo en el Laboratorio de Ambiente y Desarrollo en el Instituto de Investigaciones Oceanológicas (IIO) de la Universidad Autónoma de Baja California (UABC); y al M. C. César Antonio Cima Mukul del Depto. de Enlace en la Coordinación General de Vinculación de la Universidad Autónoma del Carmen, por su apoyo en el uso de las instalaciones del Laboratorio Ambiental del CEISPPA. Este estudio fue financiado por becas nacionales (tradicional) 2020-2 del programa nacional de posgrado de calidad (PNPC) del consejo nacional de ciencia y tecnología (CONACYT) México.

4.5 Conclusiones

En base al índice LMW/HMW obtenido (<1) se determinó que en general los hidrocarburos aromáticos policíclicos son de origen pirolítico.

Los HAPs con mayor porcentaje fueron los de alto peso molecular (4 a 6 anillos) siendo el benzo (A) pireno el de mayor porcentaje 15.48 %, seguido del fluoranteno con 13.57 %, que se consideran compuestos muy persistentes, considerando al primero como tóxico y mutagénico, provenientes de la combustión de combustible fósil llegando al ambiente mediante emisiones vehiculares.

En las secciones B y C (0.2-0.6 m y 0.6-1 m de profundidad respectivamente) se encontró una mayor predominancia en los porcentajes de limos, asociando esto a un mayor contenido de materia orgánica, fuentes alóctonas y condiciones de baja energía.

En la sección A (0-0.2 m de profundidad) hubo un aumento considerado de los porcentajes de arenas, lo cual se les atribuye a bajos porcentajes de materia orgánica y condiciones de alta energía.

En el gráfico de porcentaje de materia y carbono orgánicos se observa una relación directamente proporcional entre ellos, así como un alto porcentaje de estos los cuales tienen una alta afinidad con los HAPs. El gran incremento de carbón orgánico se puede interpretar como aportes orgánicos provenientes de actividades humanas, material continental erosionado y lixiviado. La concentración de HAPs en el núcleo de sedimento está afectada por el contenido de CO y la cantidad de limos y arcillas que se caracterizan por valores elevados de HAPs.

Referencias

- Agrawala S., Ota T., Risbey J., Hagenstand M., Smith J., Aalst M.v., Koshy K., Prasad B. (2004) Development and climate change in Egypt: focus on coastal resources and the Nile. Environment Directorate and Development Cooperation Directorate, Organization for Economic Cooperation and Development (OECD), Paris.
- Ayala Pérez, L. A., Ramos Miranda, J., & Flores Hernández, D. (2003). La comunidad de peces de la Laguna de Términos: estructura actual comparada. *Revista de Biología Tropical*, 51 No 3-4, 783–793. www.ots.ac.cr.
- Botello, A. v., Villanueva, S., Díaz, G., & Pica, Y. (1995). Contaminación por hidrocarburos aromáticos policíclicos en sedimentos y organismos del Puerto de Salina Cruz, Oaxaca, México. *Revista Internacional de Contaminación Ambiental*, 11 No 1, 21–30.
- Calamari, D. (2002). Assessment of persistent and bioaccumulating chemicals in the aquatic environment. *Toxicology*, 183–186. www.elsevier.com/locate/toxicol.
- Calva, B. L. y Torres, A. M. 2011. Carbono orgánico y características texturales de sedimentos en áreas del pasto marino *Thalassia testudinum* en ecosistemas costeros del sureste del Golfo de México. *Universidad y Ciencia* 27(2):133-144.
- Contreras-Espinosa, F., & Warner, B. G. (2004). Ecosystem characteristics and management considerations for coastal wetlands in Mexico. *Hydrobiologia*, 511, 233–245.
- Cutz, V.F y Rendón-Von Osten, J. 2007. Los hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAP's). *JAINA Boletín Informativo* 16(1):1-5.
- Dickhut. R., Canuel. E., Gustafson.K., Liu.K., Arzayus.K., Walker.S., Edgecombe, G., Gaylor, M., Macdonald, E. 2000. Automotive sources of carcinogenic polycyclic aromatic hydrocarbons associated with particulate matter in the Chesapeake Bay region. *Environmental Science & Technology* 34:4635-4640.
- Environmental Protection Agency (EPA). 2002. Mid Atalntic Integrated Assessment (MAIA) Estuaries 19978-1998: Summary Report. EPA/620/r-02/003. 115p.
- Fernández, J. I., Álvarez-Torres, P., Arreguín-Sánchez, F., López-Lemus, L. G., Ponce, G., Díaz-de-León, A., ... & del Monte-Luna, P. (2011). 10. Coastal fisheries of Mexico. *Coastal fisheries of Latin America and the Caribbean*, 231.
- Flemming, B.W. 2000. A revised textural classification of gravel-free muddy sediments on the basis of ternary diagrams. *Continental Shelf Research* 20(10-11): 1125-1137.
- Flores, V.F., González, F.F., Ramírez, F.F., Amezcua, L.A., Yañez, A.M., Álvarez, R.M y Day, J.W. (1990). Mangrove ecology, aquatic primary productivity, and fish community dynamics in the Teacapán-agua Brava Lagoon-Estuarine system (Mexican Pacific). *Estuaries* 13:219-230.
- Fuentes H, M. V., Dakdouk, S., Rojas de Astudillo, L., Escalona, A. A., & Ramírez, A. (2012). presencia y fuentes de hidrocarburos policíclicos aromáticos en los sedimentos superficiales del Saco del Golfo de Cariaco, Venezuela. *Interciencia*, 37 N° 2, 99–106.

- García Martínez, M. J., Canoira López, L. J., & Llamas Borrajo, J. F. (2005). *los hidrocarburos policíclicos aromáticos asociados a combustibles fósiles. caracterización, análisis y remediación.*
- Grenz, C., Álvarez, C.S, Calva, B.L., Chifflet, S., Conan, P., Denis, L., Douillet P, Renaud Fichez, Gutierrez, F., Origel, M., Pinazo, C., Solis, V., Torres, A.R. 2010. JEST. Joint Environmental Study of terminos Lagoon. Informe Final. IRD (Institute de Recherche pour le Développement), Francia-Universidad Autónoma Metropolitana. 68p.
- Gutierrez-Estrada, M., Malpica-Cruz V.M. y Martínez-Reyes, J. (1982). Geomorfología y sedimentos recientes del sistema lagunar Atasta-Pom, Campeche, México. *Anales del Instituto de Ciencias del Mar y Limnología. Universidad Nacional Autónoma de México.* 9 (1).
- Gutiérrez, A. M., Fuente, M. G., Cervantes, A. M. (2000). Biomasa y densidad de dos especies de pastos marinos en el sur de Quinta Roo, México. *Revista Biología Tropical* 48(2-3):313-316.
- Jiao, Y. (2009). Regime shift in marine ecosystems and implications for fisheries management, a review. *Reviews in Fish Biology and Fisheries*, 19(2), 177–191. <https://doi.org/10.1007/s11160-008-9096-8>.
- Liaghati T., Preda M., and Cox M. 2003. Heavy metal distribution and controlling factors within coastal plain sediments, Bells Creek catchment, southeast Queensland, Australia. *Environmental International*, 29: 935-948.
- Loeppert, R. H., & Suarez, D. L. (1996). Carbonate and Gypsum. In *Soil Science Society of America and American Society of Agronomy*, (Vol. 5, pp. 437–474). <https://www.researchgate.net/publication/238764741>.
- Loviso, C. L., Hebe, D., & Dionisi, M. (2015). *Análisis metagenómico de la biodegradación de hidrocarburos aromáticos policíclicos en sedimentos marinos subantárticos.*
- NOM-138-SEMARNAT/SSA1-2012, Límites Máximos Permisibles de Hidrocarburos en Suelos y lineamientos para el muestreo en la caracterización y especificaciones para la remediación, (2012).
- Ponce, V. G. y Botello A.V. 2005. Niveles de hidrocarburos en el Golfo de México, p.269-298. En: A.V. Botello, J. Rendón-von Osten, G. Gold-Bouchot y C. AgrazHernández (Eds.). *Golfo de México contaminación e impacto Ambiental: Diagnóstico y Tendencias*, 2da Edición. Universidad Autónoma de Campeche, Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto Nacional de Ecología 696 p.
- Preston, M.R. y Prodduturu, P.1992. Tidal variations of particulate carbohydrates in the Mersey Estuary. *Estuarine, Coastal and Marine Science* 34:37-48
- Qiao M., Wang C., Huang S., Wang D., Wang Z. (2006) Composition, source, and potential toxicological significance of PAHs in the surface sediments of the Meiliang Bay, Taihu Lake, China. *Environ Int* 32(1):28-33.
- Ramos-Miranda, J., Flores-Hernández, D., Ayala-Perez, L. A., Rendon-Von Osten, J., Villalobos-Zapata, G., y Sosa-López, A. (2006). Atlas hidrológico e ictiológico de la Laguna de Términos. Universidad de Campeche. 173 p.
- Raza M., Zakaria M.P., Hashim N.R., Yim U.H., Kannan N., Ha S.Y. (2013) Composition and source identification of polycyclic aromatic hydrocarbons in mangrove sediments of Peninsular Malaysia indication of anthropogenic input. *Environ Earth Sci* 70:2425-2436
- Ridgway, J., & Shimmiel, G. (2002). Estuaries as repositories of historical contamination and their impact on shelf seas. *Estuarine, Coastal and Shelf Science*, 55(6), 903–928. <https://doi.org/10.1006/ecss.2002.1035>.
- Sánchez-Palencia, Y., Ortiz, J. E., de Torres, T., & Carro, C. (2015). Origen y distribución de los hidrocarburos policíclicos aromáticos en sedimentos actuales de la Laguna de El Hito (España central). *GEOGACETA*, 57.

- Sanders, M., Sivertsen, S., Scott, G. 2002. Origin and distribution of polycyclic aromatic hydrocarbons in surficial sediments from the Savannah River. *Archives of Environmental Contamination and Toxicology* 43:438-448.
- Siddiqi, H.A., Ansari, F.A., Munshi, A.B. 2009. Assessment of hydrocarbons concentration in marine fauna due to Tasman Spirit oil spill along the Clifton beach at Karachi coast. *Environmental Monitoring and Assessment* 148:139-148.
- Soclo, H.H, Garrigues, P., Ewald, M. 2000. Origin of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAH) in coastal marine sediments: case studies in Cotonou (Benin) and Aquitaine (France). *Marine Pollution Bulletin* 40:387-396.
- Stephen, V., Smith, V., Silvia, E., Ibarra, O., Díaz, C. 2008. Sediment organic carbon in Todos Santos Bay, Baja California, Mexico. *Estuaries and Coasts* 31:719-727.
- Tolga-Gonul L., Filiz-Kucuksezgin. (2012) Aliphatic and polycyclic aromatic hydrocarbons in the surface sediments from the Eastern Aegean: assessment and source recognition of petroleum hydrocarbons. *Environ Sci Pollut Res* 19: 31-41.
- Vagi, M., Kostopoulou, M., Petsas, A., Vagi, M. C., Kostopoulou, M. N., Petsas, A. S., Lalousi, M. E., & Lekkas, T. D. (2005). Toxicity of organophosphorous pesticides to the marine alga *Tetraselmis suecica*. *Global NEST Journal*, 7(2), 222–227. <https://www.researchgate.net/publication/291025132>.
- Wang-Li, M., Yin-Fan, L., Hong, Q., De-Zhi, S., Li-Yan, L., De-Gao, W. 2010. Seasonal variations of sources of polycyclic aromatic Hydrocarbons (PAHs) to northeastern urban city, China. *Chemosphere* 79:441-447.
- Xiao, J., She, J., Bi, X., Guo, Y., Jia, M., Eddy, Y. 2008. Distribution, source apportionment, and transport of PAHs in sediments from the Pearl River delta and Northern south China Sea. *Archives of Environmental Contamination and Toxicology* 55:11-20.
- Yunker, M. B., Macdonald, R. W., Vingarzan, R., Mitchell, R. H., Goyette, D., & Sylvestre, S. (2002). PAHs in the Fraser River basin: a critical appraisal of PAH ratios as indicators of PAH source and composition. *Organic Geochemistry*, 33, 489–515. www.elsevier.com/locate/orggeochem.
- Zhang, X., Christensen, E., Gin, M. 1993. Polycyclic aromatic hydrocarbons in dated sediments from green Bay and Lake Michigan. *Estuaries* 16(3B):638-652.

Capítulo 5 Construcción de un sistema de velocimetría láser Doppler con un sensor dieléctrico de fibras ópticas

Chapter 5 Construction of a Doppler laser velocimetry system with fiber optic dielectric sensor

LUNA-REYES, Martha María†*, FLORES-GIL, Aarón, LÓPEZ-RODRÍGUEZ, José del Carmen y DE LA CRUZ-MAY, Lelio

Universidad Autónoma del Carmen, Facultad de Ingeniería y Tecnología, México.

ID 1^{er} Autor: *Martha María, Luna-Reyes* / **ORC ID:** 0000-0002-5106-2020, **CVU CONACYT ID:** 1088488

ID 1^{er} Coautor: *Aarón, Flores-Gil* / **ORC ID:** 0000-0002-2302-2056, **CVU CONACYT ID:** 121166

ID 2^{do} Coautor: *José del Carmen, López-Rodríguez* / **ORC ID:** 0000-0002-0404-0021, **CVU CONACYT ID:** 1006184

ID 3^{er} Coautor: *Lelio, De la Cruz-May* / **ORC ID:** 0000-0003-3918-0582, **CVU CONACYT ID:** 75160

DOI: 10.35429/H.2021.12.1.49.55

M. Luna, A. Flores, J. López y L. De la Cruz

*101051@mail.unacar.mx

S. Figueroa, B. Pérez, J. Flores, L. Santis. (AA. VV.) Ingeniería y Ciencias Aplicadas. Handbooks-©ECORFAN-México, Campeche, 2021.

Resumen

Se presenta una propuesta experimental para el desarrollo de un Velocímetro Láser Doppler que permita detectar frecuencias de vibración de manera más precisa, con niveles de ruido en las señales significativamente más bajos que los presentados en un sistema de auto manufactura basado en un arreglo de prisma y lentes, mediante la implementación de un sistema de fibras ópticas que definirán la distancia focal para establecer el volumen de medida, en el que puedan ser detectadas las variaciones de frecuencia ocasionadas por vibraciones mecánicas inducidas. Se presentan pruebas preliminares de vibración con la adecuación de la fibra óptica, desde la toma de datos hasta su procesamiento mediante un programa de FFT desarrollado en Matlab, donde serán localizados los picos más altos producto de las vibraciones.

Fibras, Ópticas, Velocimetría, Láser, Doppler, Vibración

Abstract

Experimental proposal for the development of a Doppler Laser Velocimeter that allows to detect vibrations frequencies more precisely, with lower noise levels in the signal than those presented in a self manufacturing system based on a prism arrangement and lenses through the implementation of an optical fiber system that will define the focal length to establish the measurement volumen, in wich the frequency variations caused by induced mechanical vibrations can be detected. Preliminary tests are presented with the adaptation of the optical fiber, from data collection to processing through an FFT program developed in Matlab, where the highest peaks caused by vibrations will be located.

Optical, fiber, LDV, Vibration, Doppler

5.1 Introducción

El efecto Doppler describe el desplazamiento existente en la frecuencia temporal de una onda percibida por un observador cuando la fuente que lo genera, el observador o ambos se encuentran en movimiento relativo. La Velocimetría Láser Doppler es una técnica no invasiva que basa su funcionamiento en el efecto Doppler producido por la interferencia de un haz de luz dividido en dos haces de igual intensidad, mediante el uso de un desdoblador de haz, que se enfocan interceptándose en un punto común. Dicha interferencia de haces forma lo que se conoce como “Volumen de Medida”.

En el modelo de Haz de Referencia se utiliza, generalmente, un arreglo de prisma y lentes para generar el Volumen de Medida, zona donde se lleva a cabo la medición y es captada por el elemento fotodetector del sistema LDV. Este tipo de sistemas tienen un amplio rango de aplicaciones, desde la medición de velocidad en fluidos laminares o turbulentos (Gómez & Portador, 2005), diagnósticos biomédicos aplicados a arterias y tejidos (Agrawal, 2005), hasta para la medición de vibraciones de sistemas dinámicos que incluyan rodamientos (White, 2010). Presentan ventajas muy claras, como son su respuesta lineal en un rango amplio de velocidades, respuesta rápida, independencia de temperatura y alta resolución espacial (Agrawal, 2005); Sin embargo, también presenta algunas limitaciones en su implementación, tales como una relación de señal ruido deficiente debido a una falta de coincidencia en la relación entre la señal y las potencias del haz de referencia y condiciones estrictas de alineación (Charrett et al., 2012).

Las fibras ópticas permiten superar muchas de estas limitaciones, además de ofrecer la capacidad de suministro y recogida de luz flexibles en regiones que de otro modo serían inaccesibles (Charrett et al., 2012). Es por esta razón, que se propone el uso de fibra óptica multi modo para la generación del volumen de medida y demostrar su funcionalidad aplicada a la recolección de muestras mediante la detección de variaciones de frecuencia ocasionadas por vibraciones mecánicas inducidas.

En este capítulo se presentarán los componentes del Sistema LDV propuesto experimentalmente, enfatizando la fibra óptica y su funcionamiento como el elemento que define el punto focal y, en consecuencia, generador del Volumen de Medida, la toma de muestras preliminares de los espectros de frecuencia temporal y su procesamiento mediante un programa de FFT desarrollado en Matlab que demuestra su eficacia para la recolección de espectros armónicos o vibratoriales.

Objetivo General

- Desarrollar un Sistema de Velocimetría Láser Doppler simplificado con un sensor dieléctrico de fibra óptica, adecuado para la detección de frecuencias vibracionales.

Objetivos Específicos

- Probar la eficacia detectando señales de vibración mecánica mediante la toma de espectros vibracionales.
- Identificar los picos máximos en los espectros, producto de la presencia de vibración mecánica inducida.

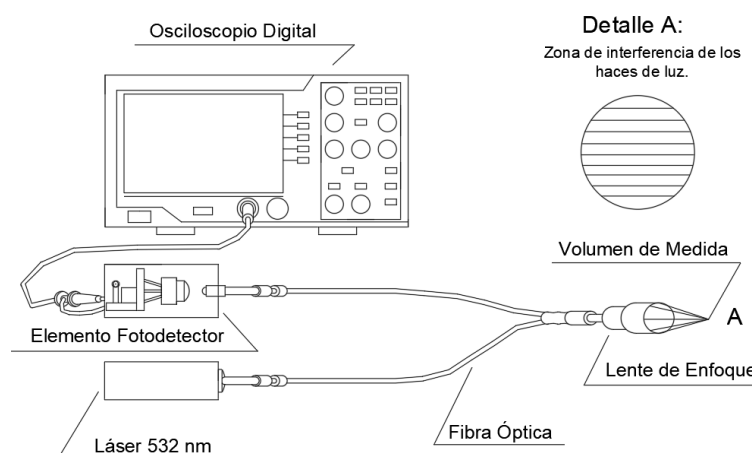
Metodología

El desarrollo de la propuesta experimental está basado principalmente en el trabajo de López et al., (2021), en donde 2 haces procedentes de un único láser se cruzan para formar el volumen de medida (López et al., 2021), explorando aplicaciones sobre ondas mecánicas e implementando, en base a la información recabada, un arreglo con un sensor dieléctrico de fibra óptica que determine la distancia focal y genere con ello el volumen de medida.

Componentes del Sistema

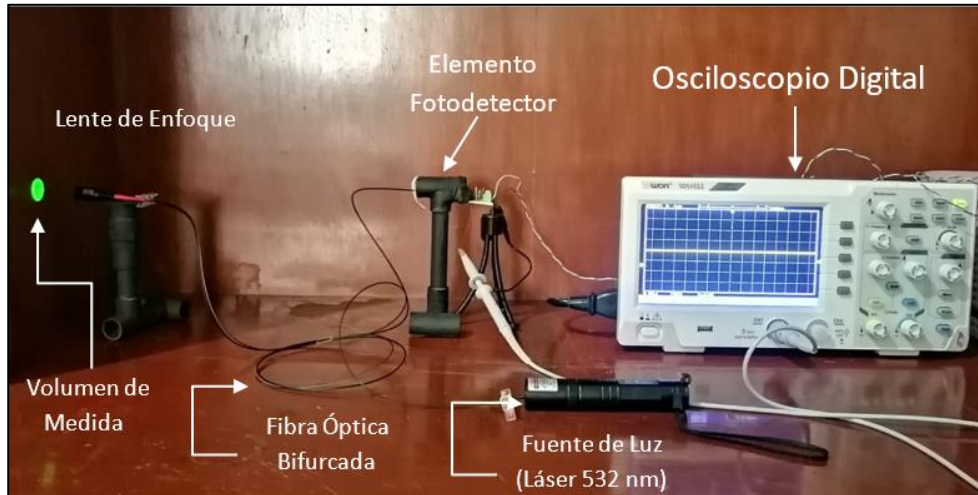
Los componentes principales de nuestro sistema experimental son un láser de 532 nm, con potencia <math><1000\text{mW}</math>, marca D. X, modelo H851, clase III, un sensor dieléctrico de fibra óptica multi modal (9 modos) modelo FFRC-310, lentes de enfoque del sensor amplificador de fibra óptica modelos 617, 517 y 417 (35 mm, 15 mm y 7 mm de distancia focal, respectivamente), un Foto diodo marca Hamamatsu modelo S-6468 como sistema fotodetector, un Osciloscopio Digital marca Owon, modelo SDS1022 como adquisidor de datos en tiempo real y un programa de FFT (Transformadas Rápidas de Fourier, por sus siglas en inglés) que permitirá procesar las señales obtenidas con el osciloscopio. En la Figura 5.1, es posible apreciar de manera esquemática el sistema LDV completo, mientras que en la Figura 5.2, se muestra el sistema ya montado.

Figura 5.1 Diagrama de Componentes de la propuesta experimental de un sistema LDV con sensor dieléctrico por fibra óptica



Fuente: Elaboración propia

Figura 5.2 Propuesta experimental de un sistema LDV con sensor dieléctrico por fibra óptica.



Fuente: Elaboración propia.

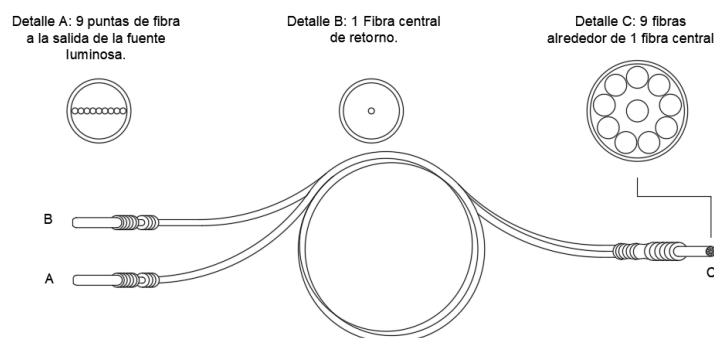
En el LDV tradicional, un haz de luz láser inicial pasa por un desdoblador de haz, cuya componente transmitida sigue su trayecto normal, mientras que la componente reflejada se dirige a un espejo con el propósito de que siga su trayecto paralelo al haz de luz láser transmitido. Estas dos componentes paralelas pasan posteriormente por una lente convexa, para finalmente superponerse en el punto focal de la lente, dando lugar al efecto de interferencia en dicho punto.

Nuestra propuesta consiste en un láser de semiconductor de 532 nm de longitud de onda, una sonda de 10 fibras ópticas bifurcada. Diseñada de tal forma que en uno de sus extremos se tienen ordenadas 9 fibras en forma lineal. Este extremo se conecta directamente al láser, pasan por un conector (que es el equivalente al desdoblador de haz), y en el otro extremo las 9 fibras se ordenan alrededor de una fibra central tal y como se muestra en la Figura 5.3. Para generar la interferencia, se adapta una lente convexa de distancia focal de 35 cm, y justamente a esa distancia se forma lo que se denomina el volumen de medida, o la región de interferencia.

En la experimentación, este extremo de la fibra se acerca (a la distancia de 35 cm) al objeto de estudio, que será un objeto en régimen dinámico, ya sea en vibración, circulación, rotación, etc. Cuando el objeto de estudio pasa por el volumen de medida, se produce un efecto de dispersión de los haces incidentes. Desplazando su frecuencia por efecto Doppler (ver Tsutomu Tajikawa et al. 2012). La misma lente recoge por reflexión, la información de la luz dispersada, la dirige ahora a la fibra central, que está conectada al elemento detector, y finalmente se registran las señales en un osciloscopio, tal y como se muestra en la Figura 5.1, y Figura 5.2.

Una vez obtenidas las señales, se extraen del osciloscopio digital para ser procesadas en el ordenador por medio de un código Matlab de FFT, para convertirlas de variaciones temporales a espectros de frecuencia.

Figura 5.3 Fibra Óptica Bifurcada.



Fuente: Elaboración propia

La implementación de la fibra óptica pretende corregir algunas de las limitaciones de los modelos tradicionales, basados en arreglos de prisma y lentes, como son algunos problemas de alineación y la relación señal-ruido presente en las muestras.

En la Figura 5.3, se observan la configuración del sensor dieléctrico de fibra óptica a aplicar al sistema, en ella se destacan 3 puntos principales: el punto A con un arreglo mapeado de entrada, el punto C, que muestra el arreglo de 9 fibras alrededor de 1 fibra central y el B, que ilustra la sonda de recolección que viaja desde el punto C, por medio de la fibra central, hasta el elemento fotodetector que se interconecta al sistema adquisidor de datos.

Toma de muestras

Se seleccionó el sensor de enfoque 617 de 35mm de distancia focal para realizar la toma de muestras de vibración. Se utilizó una bomba sumergible unida a un tubo de policarbonato, sitio en el cual se colocó el volumen de medida para la toma de muestras de vibración. Se encendió la bomba en velocidad baja, media y alta y se observó el comportamiento en tiempo real de la frecuencia de las señales proyectadas en el osciloscopio digital, para posteriormente congelar la imagen y extraer la muestra, como ilustra en la Figura 5.3. Se obtuvieron un total de 3 muestras, 1 por cada velocidad.

Figura 5.4 Volumen de Medida y Bomba sumergible Johnson 2855

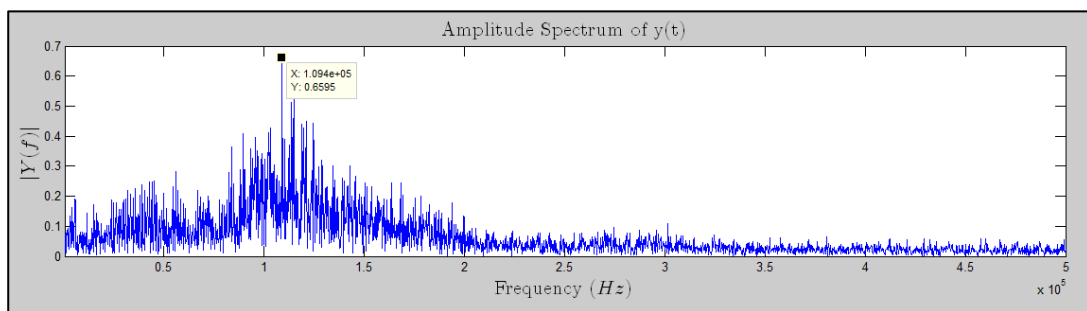


Fuente: Elaboración propia

5.2 Resultados

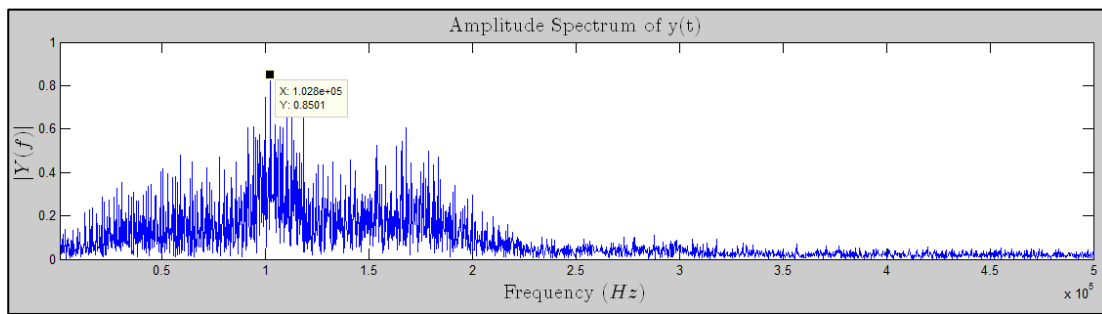
Las muestras extraídas del Osciloscopio se procesaron mediante el programa de FFT en Matlab para transformar las señales obtenidas en el dominio del tiempo a espectros de frecuencia, donde se aprecia notablemente la interferencia de la vibración inducida.

Gráfico 5.2 Espectro Vibracional del tubo de Policarbonato conectado a bomba sumergible, encendida en velocidad baja



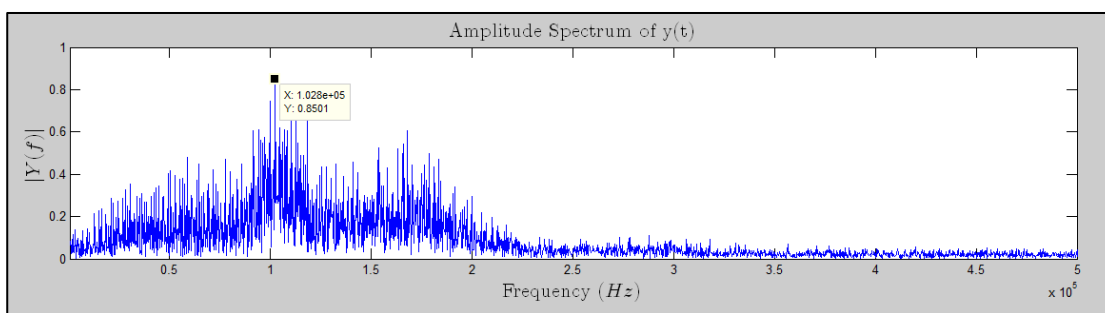
Fuente: Elaboración propia

Gráfico 5.2 Espectro Vibracional del tubo de Policarbonato conectado a bomba sumergible, encendida en velocidad media



Fuente: Elaboración propia

Gráfico 5.3 Espectro Vibracional del tubo de Policarbonato conectado a bomba sumergible, encendida en velocidad alta



Fuente: Elaboración propia

En cada uno de los espectros obtenidos, es posible identificar una cantidad considerable de frecuencias o picos, cada uno puede llegar a corresponder a algún tipo de frecuencia característica del sistema dinámico. Se ha marcado el pico más alto como ejemplo de la presencia de una interferencia por vibración en el volumen de medida.

5.3 Conclusiones

La primera fase experimental del sistema ha demostrado ser viable para la detección de frecuencias armónicas por medio del arreglo de sensor dieléctrico por fibra óptica en lugar de los arreglos ópticos convencionales (prisma y lentes). En la experimentación y resultados preliminares pudo observarse con claridad la presencia de múltiples frecuencias de vibración, confirmando así que es posible detectar este tipo de señales con este equipo experimental.

Destacan su flexibilidad para llevar el volumen de medida a sitios inaccesibles para un arreglo de prisma, permitiendo un monitoreo más completo de la región a examinar en caso de requerirse; Presenta una facilidad de alineación destacable y un ruido reducido en las señales, así como buena sensibilidad a los cambios en la vibración.

Se recomienda continuar la línea de investigación con la caracterización de las frecuencias encontradas (identificando las frecuencias características de los elementos dinámicos a analizar) y llevar un seguimiento de su comportamiento bajo diferentes condiciones.

5.4 Agradecimiento

Agradecemos a la UNACAR por el apoyo brindado para la realización de este trabajo, a través del proyecto 069/DGIP/2019. Los autores declaramos que no hay conflicto de interés acerca de la publicación de este artículo.

5.5 Referencias

Agrawal, A. K. (2005). *FIBER-OPTIC LASER DOPPLER VELOCIMETER FOR MICROCIRCULATORY FLOW MEASUREMENTS*. The University of Utah.

Charrett, T. O. H., James, S. W., & Tatam, R. P. (2012). Optical fibre laser velocimetry: A review. *Measurement Science and Technology*, 23(3). <https://doi.org/10.1088/0957-0233/23/3/032001>

Gómez, V. C., & Portador, R. I. P. (2005). Diagnóstico de condiciones de operación de rodamientos en máquinas usando espectros de alto orden. *Centro Nacional de Investigación y Desarrollo*, 1–205.

José, I., Rodríguez, L., Gil, A. F., Manuel, J., & Sierra, T. (2021). *Construcción de un Sensor de Velocidad Unidireccional, para Medición de Velocidades de un Fluido Bajo el Régimen Laminar*. 13(8), 291–295.

Tsutomu Tajikawa, Wataru Ishihara, Shimpei Kohri, Kenkichi Ohba, "Development of Miniaturized Fiber-Optic Laser Doppler Velocimetry Sensor for Measuring Local Blood Velocity: Measurement of Whole Blood Velocity in Model Blood Vessel Using a Fiber-Optic Sensor with a Convex Lens-Like Tip", *Journal of Sensors*, vol. 2012, Article ID 426476, 11 pages, 2012. <https://doi.org/10.1155/2012/426476>

White, G. (2010). Introducción al Análisis de Vibraciones. *International Computer Music Conference*, 18–30.

Capítulo 6 Concentración de metales pesados en suelos de la península de Atasta, Campeche

Chapter 6 Heavy metal concentration in soils of the Atasta peninsula, Campeche

BENÍTEZ-PINEDA, Paulo Alberto*, RAMÍREZ-ELÍAS, Miguel Ángel, ANGUEBES-FRANSESCHI, Francisco y AGUILAR-UCÁN, Claudia Alejandra

Universidad Autónoma del Carmen, Facultad de Química. Calle 56 No. 4 Esq. Avenida Concordia Col. Benito Juárez C.P. 24180 Cd. del Carmen, Campeche, México

ID 1^{er} Autor: *Paulo Alberto, Benítez-Pineda* / **ORC ID:** 0000-0002-4340-318X, **CVU CONACYT ID:** 920418

ID 1^{er} Coautor: *Miguel Ángel, Ramirez-Elías* / **ORC ID:** 0000-0002-3962-1117, **CVU CONACYT ID:** 226557

ID 2^{do} Coautor: *Francisco, Anguebes-Franzeschi* / **ORC ID:** 0000-0002-8190-2211, **CVU CONACYT ID:** 217824

ID 3^{er} Coautor: *Claudia A., Aguilar-Ucan* / **ORC ID:** 0000-0002-1733-2867, **CVU CONACYT ID:** 93717

DOI: 10.35429/H.2021.12.1.56.68

P. Benítez, M. Ramírez, F., Anguebes y C. Aguilar

* paulo_1809@hotmail.com

S. Figueroa, B. Pérez, J. Flores, L. Santis. (AA. VV.) Ingeniería y Ciencias Aplicadas. Handbooks-©ECORFAN-México, Campeche, 2021.

Resumen

El presente estudio tuvo como objetivo determinar los niveles de concentración de metales pesados presentes en los suelos de la región de Atasta, Campeche. El trabajo contribuye a un mejor conocimiento de las propiedades físicas y químicas de los suelos de Atasta dentro de las zonas semiurbanas e industriales. La hipótesis supone que existe contaminación por metales pesados en los suelos de la zona, derivada de la actividad industrial y del tráfico vehicular permanente. Se recolectaron muestras de suelo superficial durante dos temporadas en 10 sitios seleccionados, con las cuales se realizaron análisis de parámetros fisicoquímicos mediante la NOM-021-SEMARNAT-2000; así como el análisis de metales pesados (As, Cd, Cr, Ni, Pb) mediante el método (EPA 3050-B) y espectrofotometría de emisión atómica. Los resultados obtenidos se muestran en el siguiente perfil promedio de los parámetros físicos y químicos de los suelos durante la estación seca y lluviosa, respectivamente: concentraciones de 6,44 y 6,52 $\mu\text{g g}^{-1}$ para el As; 0,001 y 0,004 $\mu\text{g g}^{-1}$ para el Cd; de 90,41 y 73,03 $\mu\text{g g}^{-1}$ para el Cr; 100,9 y 117,16 $\mu\text{g g}^{-1}$ para el Ni; de 14,94 y 21,01 $\mu\text{g g}^{-1}$ para el Pb; pH entre 7,2 y 8,5, CE entre 0 y 7 dS/m y MO entre 0 y 16,5%. En cuanto a la textura, los suelos en el 80% de los sitios presentaron un perfil arenoso. El ANOVA indicó que no hay diferencias significativas ($p > 0,05$) entre las estaciones de estudio en las concentraciones medias de As, Cd y Cr.

Metales pesados, Contaminación del suelo, pH, Materia orgánica, Textura

Abstract

The present study aimed to determine the concentration levels of heavy metals present in soils of the Atasta region, Campeche. The work contributes to a better knowledge of the physical and chemical properties of Atasta soils within semi-urban and industrial areas. The hypothesis assumes that there is contamination by heavy metals in soils in the zone, derived from industrial activity and permanent vehicular traffic. Surface soil samples were collected during two seasons in 10 selected sites, with which analyzes of physicochemical parameters were carried out by NOM-021-SEMARNAT-2000; as well as the analysis of heavy metals (As, Cd, Cr, Ni, Pb) using the method (EPA 3050-B) and atomic emission spectrophotometry. The results obtained are shown in the following average profile of physical and chemical parameters of the soils during the dry and rainy season, respectively: concentrations of 6.44 and 6.52 $\mu\text{g g}^{-1}$ for As; 0.001 and 0.004 $\mu\text{g g}^{-1}$ for Cd; of 90.41 and 73.03 $\mu\text{g g}^{-1}$ for Cr; 100.9 and 117.16 $\mu\text{g g}^{-1}$ for Ni; of 14.94 and 21.01 $\mu\text{g g}^{-1}$ for Pb; pH between 7.2 and 8.5, EC between 0 and 7 dS / m and MO between 0 and 16.5%. Regarding the texture, the soils in 80% of the sites presented a Sandy profile. The ANOVA indicated that there are no significant differences ($p > 0.05$) between the study seasons in the average concentrations of As, Cd and Cr.

Keywords: heavy metals, soil contamination, pH, organic matter, texture

6.1 Introducción

La Península de Atasta, Campeche, forma parte del Área Natural Protegida de Flora y Fauna de la Laguna de Términos, de ahí la importancia de la conservación de sus suelos; dado que estos contribuyen de forma directa a la conservación de flora y fauna silvestre; así como, en la reducción de la erosión de estos, en el borde costero del sistema lagunar Pom-Atasta. Por lo anterior, surge el interés de determinar si existe o no contaminación de los suelos de la península, por metales pesados. Se presume que la actividad petrolera en la región de la planta de compresión de gas de Atasta; así como el tráfico vehicular permanente en la zona, son factores que representan las principales fuentes de contaminación de los suelos por metales pesados. Es por esto, que el objetivo del presente estudio fue determinar la concentración de metales pesados en suelos de la Península de Atasta, Campeche.

6.2 Metodología

En esta investigación se seleccionaron 10 sitios de muestreo (Tabla A.1), en los cuales se colectaron muestras de suelo superficial en dos temporadas climáticas (secas y lluvias). Las muestras del suelo se colectaron en bolsas de plástico por triplicado de cada sitio de muestreo y se conservaron a 4°C para su posterior análisis en laboratorio de pH, materia orgánica, textura y metales pesados (As, Cd, Cr, Ni, Pb).

El pH se analizó aplicando el método potenciométrico, la materia orgánica por el método de Walkey & Black y la textura se realizó mediante la técnica de Bouyoucos; métodos contenidos en la NOM-021-SEMARNAT-2000. La cuantificación de metales pesados se realizó mediante la digestión ácida de los suelos aplicando el método 3050B de la EPA y se cuantificaron por Espectrofotometría de Emisión Óptica por Plasma Acoplado Inductivamente (ICP-OES).

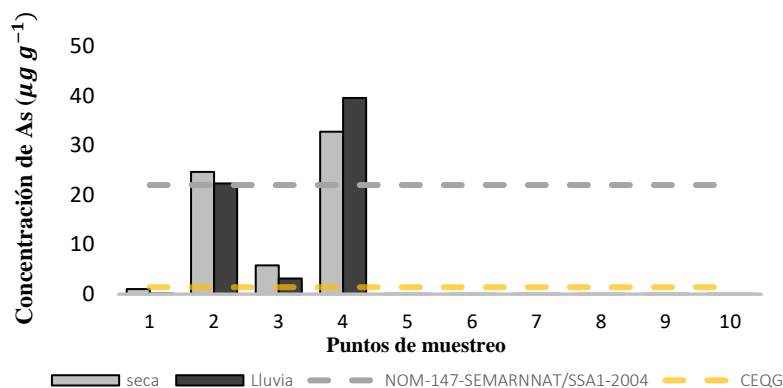
Para el desarrollo del trabajo estadístico, se empleó el software InfoStat® 2017. Se determinaron las medidas de tendencia central por sitio y temporada. El análisis de varianza se realizó mediante el método de comparación múltiple, propuesto por Fisher (LSD Fisher), para comparar las medias de pares. Por último, se determinó el coeficiente de correlación de Spearman para determinar la relación lineal entre variables fisicoquímicas y metales pesados de los suelos de Atasta, Campeche.

6.3 Resultados

6.3.1 Concentración de Arsénico (As)

Las concentraciones promedio de As presentes en los suelos de Atasta, fueron: $6.44 \pm 12.02 \mu\text{g g}^{-1}$ en temporada de secas y $6.52 \pm 13.53 \mu\text{g g}^{-1}$ en temporada de lluvias (Gráfico 6.1).

Gráfico 6.1 Concentración promedio de Arsénico en suelos de la península de Atasta en la temporada de lluvias y secas



Las diferencias significativas de la concentración promedio de As en las dos épocas estudiadas son importancia para conocer el comportamiento del metal en el ambiente, ya que los datos muestran que en la temporada de lluvia hay mayor movilidad del As en el suelo, pudiendo ingresar a los cultivos, a cuerpos de agua y de esta manera convertirse en un elemento tóxico para los organismos vivos, en especial para el ser humano.

El contenido de As, en la temporada de secas tuvo un valor mínimo de $0.01 \frac{\mu\text{g}}{\text{g}}$ y un valor máximo de $32.75 \frac{\mu\text{g}}{\text{g}}$. Para la época de lluvia, la concentración mínima fue de $0.01 \frac{\mu\text{g}}{\text{g}}$ y la concentración máxima fue de $39.57 \frac{\mu\text{g}}{\text{g}}$. Esta variación entre ambas épocas del año se debe a las altas precipitaciones que se presentaron en los meses de marzo, junio, provocando la lixiviación del As en el suelo. Se encontró que los sitios 2, 3 y 4 presentan altas concentraciones de As, superando la concentración natural de As en el suelo.

En la época de secas y lluvias, el valor más alto de As, se obtuvo en el sitio 4 con $32.75 \frac{\mu\text{g}}{\text{g}}$ y $39.57 \frac{\mu\text{g}}{\text{g}}$, respectivamente. Los sitios 2 y 4, en las dos épocas estudiadas (lluvias y secas), rebasan los límites máximos permisibles de NOM-147.

6.3.2 Concentración de Cadmio (Cd)

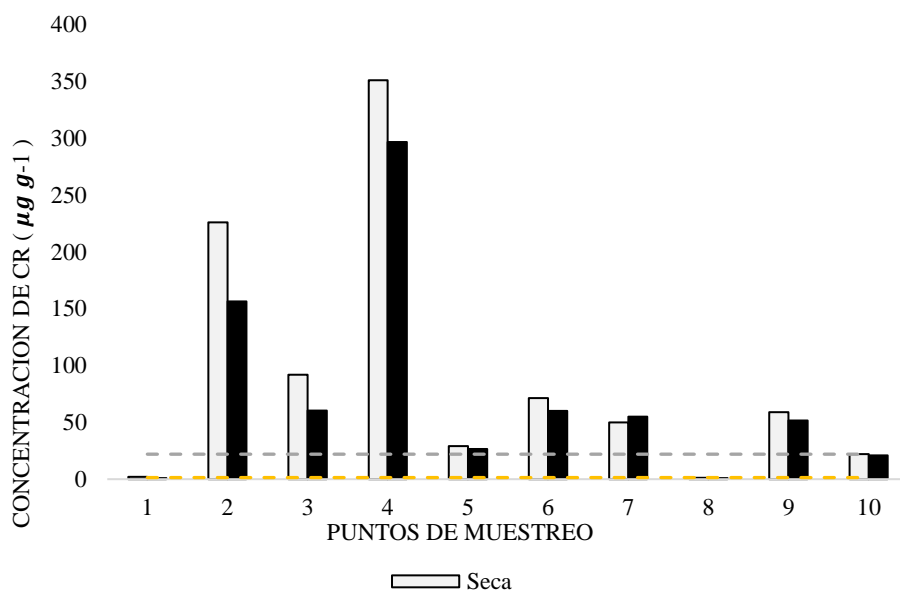
Las concentraciones promedio de Cd presentes en los suelos de Atasta, fueron: $0.001 \pm 0.0032 \mu\text{g g}^{-1}$ en temporada de secas y $0.004 \pm 0.01 \mu\text{g g}^{-1}$ en temporada de lluvias.

Las concentraciones de obtenidas de Cd en los diez sitios de muestreo durante las dos temporadas, fueron muy bajas y no detectables. Lo anterior, probablemente se deba a que los sitios de muestreo se caracterizaron por presentar alto porcentaje de arenas (textura franco-arenosa), las cuales mantienen espacios grandes, entre partículas que facilitan el paso del agua en el suelo y por lo tanto la migración de los metales pesados de canalizan hacia horizontes más profundos y a cuerpos de agua. Lo anterior, sugiere que el Cd sufrió un proceso de lixiviación resultando imposible su cuantificación en los sitios de estudio. Las únicas concentraciones que se obtuvo fue en los sitios 2,4 en la temporada de lluvia de $0.2 \frac{\mu g}{g}$ y que resulto insignificante, reafirmando que la presencia del Cadmio se debe a la proximidad de la planta de recompresión de gas ubicada en estos sitios.

6.3.3 Concentración de Cromo (Cr)

Las concentraciones promedio de Cr presentes en los suelos de Atasta, fueron: $90.41 \pm 112.35 \mu g g^{-1}$ en temporada de secas y $73.03 \pm 90.28 \mu g g^{-1}$ en temporada de lluvias (Gráfico 6.2).

Gráfico 6.2 Concentración promedio de Cromo en suelos de la península de Atasta en la temporada de lluvias y secas



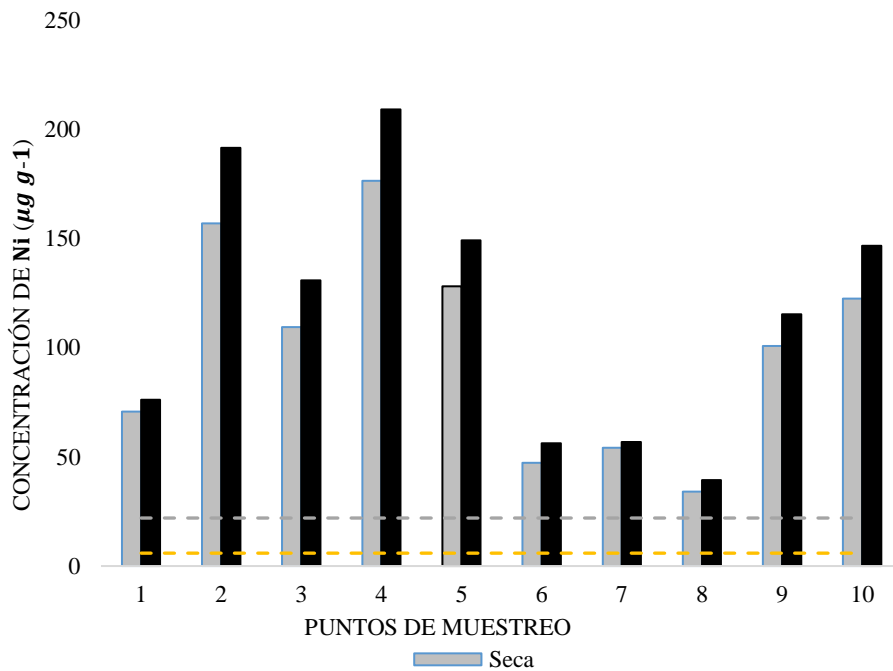
La concentración de Cromo en la época de lluvias muestra como valor mínimo una de concentración de $0.96 \frac{\mu g}{g}$ en el sitio 1, como valor máximo $296.75 \frac{\mu g}{g}$ en el sitio 4 (Gráfico 6.2). En relación a la temporada de secas, se obtuvo un valor mínimo de Cr en el sitio 8 de $1.14 \frac{\mu g}{g}$, un valor máximo se registro para el sitio 4 de $351.25 \frac{\mu g}{g}$. Esta variación entre ambas épocas del año se debe a las altas precipitaciones que se presentaron en los meses de junio y septiembre, provocando la lixiviación del Cromo en el suelo. Con la realización de este estudio, se encontró que el sitio de estudio presentó altas concentraciones de Cromo, superando la concentración natural de Cr en el suelo. De acuerdo con el Gráfico 6.2 en la época de secas el valor más alto se obtuvo en el sitio 4 con una concentración de $296.75 \frac{\mu g}{g}$ de Cr, en la época de lluvias en el sitio 4 con $351.25 \frac{\mu g}{g}$.

Los elementos como el Cr presentan una mayor movilidad debido a la solubilidad relativa de los complejos que se pueden formar en suelos neutros o alcalinos. Con esto se espera obtener más concentración de As y Cr soluble, los cuales son biodisponibles para las plantas a bajas concentraciones. En el sitio de estudio los valores son muy diferentes, ya que los resultados estadísticos muestran que existe una alta diferencia significativa ($0.0001, p < 0.05$), por lo que su origen puede ser antrópico. De acuerdo con la NOM-147-SEMARNAT/SSA1-2004 y las normas canadienses, en ambas temporadas los sitios 2,3,4,5,6,7,9,10 sobrepasaron los límites máximos de concentración de Cromo (Tabla 6.2). Lo anterior, indica que los sitios están contaminados, existiendo un riesgo al cual está expuesta la población, con la probabilidad de tener efectos adversos en la salud.

6.3.4 Concentración de Níquel (Ni)

Las concentraciones promedio de Ni presentes en los suelos de Atasta, fueron: $100.9 \pm 47.79 \mu\text{g g}^{-1}$ en temporada de secas y $117.16 \pm 58.85 \mu\text{g g}^{-1}$ en temporada de lluvias (Gráfico 6.3).

Gráfico 6.3 Concentración promedio de Níquel en suelos de la península de Atasta en la temporada de lluvias y secas



El contenido de Ni en la época de secas, muestra como valor mínimo de concentración $34.06 \frac{\mu\text{g}}{\text{g}}$ en el sitio 8 San Antonio Cárdenas (Casa), el valor máximo se obtuvo en el sitio 4 con $176.46 \frac{\mu\text{g}}{\text{g}}$ en la planta de recompresión de gas I (Atasta) (Gráfico 6.3).

Para la época de lluvias, la concentración mínima fue de $39.41 \frac{\mu\text{g}}{\text{g}}$ en el sitio 8, y el valor máximo se obtuvo en el sitio 4 con $209.18 \frac{\mu\text{g}}{\text{g}}$. En la época de secas, el valor más alto se obtuvo para el sitio 4 con una concentración de $176.46 \frac{\mu\text{g}}{\text{g}}$ de Ni, en la época de lluvias en el sitio 4 con $209.18 \frac{\mu\text{g}}{\text{g}}$.

El níquel es liberado al medio ambiente a partir de una gran variedad de fuentes naturales y antropogénicas. Una cantidad considerable deriva de la combustión del carbón, petróleo, y otros combustibles fósiles. La porción más grande de níquel y sus compuestos son adsorbidas sobre los sedimentos, se inmovilizan, se captan por las plantas cultivadas y a través de los alimentos llegan al ser humano (Olivares, 2015).

En el sitio de estudio, los valores son muy diferentes ya que los resultados estadísticos muestran que existe una alta diferencia significativa (0.0001 , $p < 0.05$). El sitio tiene una gran influencia sobre la abundancia del Ni, su origen se debe a que es antrópico.

Sastre Conde et al., (2003) estudiaron la distribución de metales pesados en el sedimento del sistema fluvial – lagunar Pom – Atasta, Campeche (México). En ambas lagunas se observaron altos contenidos de metales considerados altamente tóxicos para los organismos. También se observó que el Ni predomina en los diferentes puntos de muestreo en ambas lagunas, siendo este elemento el que parece controlar el comportamiento del resto de los metales, al igual con los datos obtenidos de la península de Atasta el níquel predominó en todos los sitios.

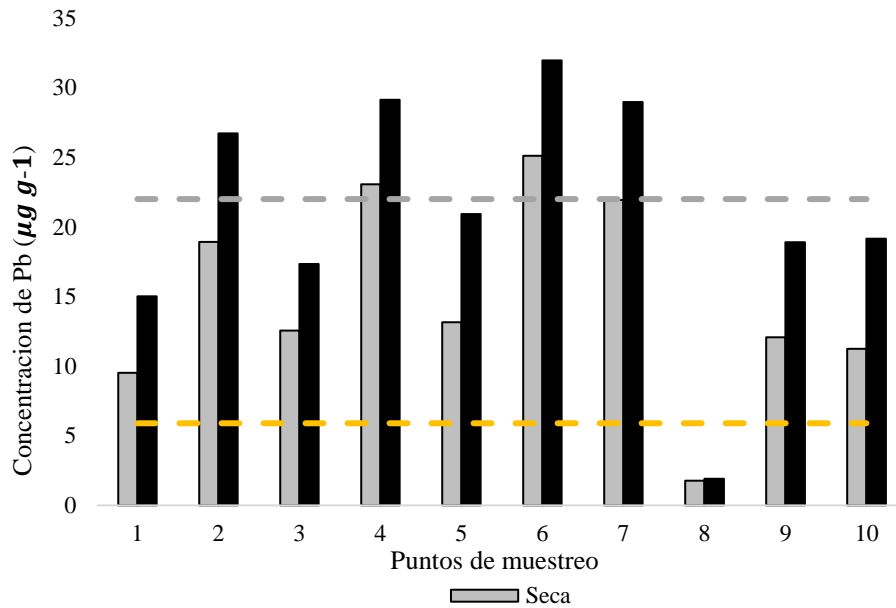
De acuerdo con la NOM-147-SEMARNAT/SSA1-2004 y las normas canadienses, para ambas temporadas los diez sitios sobrepasaron los límites máximos de concentración de níquel (Tabla 6.2).

ATSDR et al., (2005) Menciona que puede deberse a que el níquel es liberado por plantas de energía, quema de basura, aguas residuales. También depositadas en el suelo o son removidas del aire en la lluvia o la nieve.

6.3.5 Concentración de Plomo

Las concentraciones promedio de Pb presentes en los suelos de Atasta, fueron: $14.94 \pm 7.21 \mu\text{g g}^{-1}$ en temporada de secas y $21.01 \pm 8.85 \mu\text{g g}^{-1}$ en temporada de lluvias (Gráfico 6.4).

Gráfico 6.4 Concentración promedio de Plomo en suelos de la península de Atasta en la temporada de lluvias y secas



El valor máximo en la temporada de seca fue $25.11 \frac{\mu\text{g}}{\text{g}}$ en el sitio 6, el valor mínimo fue de $1.78 \frac{\mu\text{g}}{\text{g}}$ en el sitio 8. En la temporada de lluvia el valor máximo fue de $31.97 \frac{\mu\text{g}}{\text{g}}$ en el sitio 6, el valor mínimo $1.91 \frac{\mu\text{g}}{\text{g}}$ en el sitio 8. En la época de secas el valor más alto se obtuvo en el sitio 6, con una concentración de $25.11 \frac{\mu\text{g}}{\text{g}}$ de Pb, en la época de lluvias en el sitio 6 con $31.97 \frac{\mu\text{g}}{\text{g}}$.

En el sitio de estudio, los resultados estadísticos muestran que existe una alta diferencia significativa ($0.0001, p < 0.05$). El sitio tiene una gran influencia sobre la abundancia del Pb, su origen se debe a que es antrópico.

De acuerdo con la NOM-147-SEMARNAT/SSA1-2004 y las normas canadienses (CEQG), para la época de secas y lluvias, los sitios 2,4,6,7 sobrepasaron los límites máximos de concentración de plomo (Tabla 6.2). Lo que indica, que los sitios anteriores están contaminados, existiendo un riesgo al cual está expuesta la población de la localidad, generando específicamente efectos adversos a la salud.

Las principales causas de la contaminación del Pb en el suelo se deben a plaguicidas, venenos industriales, soldaduras, corrosión de metales, etc. (Lozada, 2007).

Tabla 6.2 Niveles de referencia para la identificación de suelos contaminados en algunos países del mundo.

País	As $\frac{\text{mg}}{\text{kg}}$		Cd $\frac{\text{mg}}{\text{kg}}$		Cromo $\frac{\text{mg}}{\text{kg}}$		Níquel $\frac{\text{mg}}{\text{kg}}$		Plomo $\frac{\text{mg}}{\text{kg}}$		Fuente
	RSH	RE	RSH	RE	RSH	RE	RSH	RE	RSH	RE	
Canadá	12	12	10	1.4	64	64	50	50	140	70	CEQG (2002)
México	20	20	20	20	20	20	20	20	200	100	PROFEPA (2000)

Nota: RSH: riesgo a la salud humana; RE: riesgo ecológico; NR: datos no reportados. – No disponible. * En los Estados Unidos de Norte América (EUA), los niveles de referencia varían entre las diferentes regiones. En esta tabla se presentan los que corresponden a la región 9 (Arizona, California, Hawái e Islas del Pacífico) (Gutiérrez,2007).

6.3.6 Parámetros fisicoquímicos

Los diez sitios mostraron un valor de pH mínimo de 7.72, un valor máximo de 8.3. Todos son medianamente alcalinos, lo que proporciona condiciones factibles para la disponibilidad nutrimental de los elementos esenciales para el suelo y las plantas.

El pH es un factor importante para la disponibilidad de los metales pesados, ya que a pH ácido, la mayoría de los metales están más disponibles, excepto el Arsénico (As) y Cromo (Cr), los cuales están más disponibles a un pH alcalino.

Con esto se espera obtener más concentración de As y Cr soluble, los cuales son biodisponibles para las plantas, teniendo un tipo de suelo medianamente alcalino de acuerdo con los valores de pH (Roca, 2001).

La conductividad eléctrica (CE) en los suelos estudiados están en el intervalo de $0.00 - 13.0 \text{ dS m}^{-1}$, poniendo de manifiesto la presencia de sales en estos suelos. La Norma Oficial Mexicana NOM-021-SEMARNAT-2000, establece que cuando la CE tiene rangos menores a 7.0 dS m^{-1} , el suelo tiene efectos despreciables de salinidad.

Los porcentajes de materia orgánica en el sedimento oscilaron entre 0.0 y 12.0 %. La clasificación que hace la NOM-021-SEMARNAT-2000 en base a la materia orgánica, ubica a los suelos de la península de Atasta como suelos volcánicos. García et al., (2019) especifican que las sustancias que componen la MO regulan el pH del medio, influyen la disponibilidad de nutrientes y metales.

La MO mejora la condición estructural tanto de los suelos arenosos como arcillosos. (Argaez, 2013). La gran cantidad de MO en estos sitios se debe a que se encuentra en suelos que pertenecen a la región de la laguna de Términos, por la acumulación de sedimentos de bajo de la flora que existen en los alrededores; también por que la laguna atrae diversas MO de otras partes, que luego terminan formando parte del suelo de la península de Atasta. Otro motivo por el cual, la MO tuvo un incremento debido a que, en la temporada de lluvia, el nivel del agua crece, dispersando todo tipo de sedimentos en los poblados que conforman la península de Atasta, alterando el ecosistema de posibles niveles de concentración de metales pesados, pH.

Por otra parte, dado que predomina la presencia de arenas en los suelos de Atasta, se espera una posibilidad de una menor concentración de metales pesados, ya que estos suelos carecen de la capacidad de fijarlos, por lo cual estos elementos pasan rápidamente al subsuelo y consiguen frecuentemente contaminar los niveles freáticos. El limo fue el segundo sedimento que en más porcentaje se encontró en los sitios de la península de Atasta, en la temporada de seca, por su tamaño pequeño, ligero, es llevado por medio de las corrientes de los ríos, es depositado en diferentes áreas, particularmente cercanas a los cauces de los ríos, lagunas de la península de Atasta. Los suelos analizados en la temporada de seca tuvieron un mayor contenido de arcilla en los sitios 2,5,8,9, en la lluvia 5,7,9. Para este caso, la arcilla predominó más, en la temporada de secas, debido a esto se espera que se encuentre una mayor concentración de metales pesados; sin embargo, para que eso suceda debe considerarse otros parámetros fisicoquímicos. Este tipo de textura del suelo hace que la infiltración del agua sea escasa, por lo cual se considera que los sitios en donde predominaron altos porcentajes de arcillas, tengan una buena capacidad de retención de agua, teniendo en cuenta que las partículas más pequeñas (arcillas) tienen mayor área superficial en relación con su volumen. En las dos temporadas se determinó el tipo de sedimento, mediante el triángulo de textura, obteniendo el franco arenoso, arenoso.

Espinoza et al., (2008) menciona que los contenidos de limos y arcillas se correlacionan positivamente con metales potencialmente biodisponible, esto se debe a la mayor área superficial de los minerales de arcilla que favorecen la retención de metales pesados en formas intercambiables. En el suelo de la península de Atasta la granulometría tiene un papel importante en el tamaño de los granos que contiene y la proporción en que se encuentra cada uno de ellos, debido a que de ellos depende el volumen de huecos, cuanto menos es el volumen de huecos, más compacto será el suelo.

6.4 Análisis estadísticos

6.4.1 Arsénico (As)

El ANOVA y la correlación se evaluaron con el programa estadístico InfoStat® 2017. En la Tabla 3, se muestra el ANOVA para el As en relación con el sitio y temporada de muestreo.

Tabla 6.3 Resultados de análisis de varianza (ANOVA) para el As

Fuente	Suma de Cuadrados	Grados de libertad	Cuadrado Media	Estadístico F	Estadístico P
A= Sitio	2919.94	9	324.44	97.83	<0.0001
B= Temporada	0.04	1	0.04	0.01	0.9182
Residual	29.85	9	3.32		
Total	2949.82	19			

*Significativo con un nivel de confianza del 95%.

Los resultados revelan que para el As el valor estadístico “p” para el sitio si fue significativo (0.0001, $p < 0.05$). Lo que demuestra que si hay diferencias estadísticamente significativas por sitio para el As, sin embargo, para la temporada climática los valores no son diferentes, ya que los resultados estadísticos muestran que no existe diferencia significativa (0.9181, $p > 0.05$). En este caso los sitios tienen una gran influencia sobre la abundancia de As, contrario a lo que demuestra Bucio et al., (2008). En cuanto a los resultados de correlación con las fracciones de suelo, la materia orgánica, pH se muestran en la Tabla 4. Los resultados estadísticos demuestran que no existe una correlación significativa de As con la textura, materia orgánica y pH ($p > 0.05$).

Tabla 6.4 Valores de las correlaciones de textura, materia orgánica y pH con el As

Estadísticos de prueba	Arena	Limo	Arcilla	MO	pH
Valor del coeficiente de correlación r	-0.19	0.27	-0.07	0.22	0.01
Valor del estadístico p del modelo	0.4174	0.2535	0.7804	0.3617	0.9538

*Significativo con un nivel de confianza del 95%.

Como se menciona en estudios de Ruiz – Marin et al. (2014) el As no mostro relación con la MO, que sus concentraciones se explican por procesos biogeoquímicos naturales. Bundschuch et al. (2010) mencionan que el As se asocia a partículas muy finas en granos de arcilla, MO, sus altas concentraciones provienen de descargas de aguas residuales y manejo de hidrocarburos.

6.4.2 Cadmio (Cd)

Tabla 6.5 Resultados de análisis de varianza (ANOVA) para el Cd.

Fuente	Suma de Cuadrados	Grados de libertad	Cuadrado Media	Estadístico F	Estadístico P
A= Sitio	5.3E-04	9	5.8E-05	2.56	0.0887
B= Temporada	4.5E-05	1	4.5E-05	1.98	0.1934
Residual	2.1E-04	9	2.3E-05		
Total	7.8E-04	19			

*Significativo con un nivel de confianza del 95%.

Los resultados revelan que para el Cd el valor estadístico “p” para el sitio no existe una diferencia significativa (0.0887, $p > 0.05$). Lo que demuestra que no hay diferencias estadísticamente significativas por sitio para el Cd, tampoco para la temporada, ya que los resultados estadísticos muestran que no existe diferencia significativa (0.1934, $p > 0.05$) (Tabla 6.5). Aguilar et al., (2018) menciona que el análisis estadístico del cadmio por sitio no fue significativo ($p > 0.05$), pero si por temporada ($p = 0.000$), distinto a los obtenidos en suelos de la península de Atasta, donde no se encontraron diferencias significativas en las concentraciones por sitio y temporada de Cadmio. Los resultados de correlación indican que existe relación significativa de Cd con MO y pH; contrario a lo mencionado por Aguilar et al. (2009) que el Cd no muestra relación significativa con la materia orgánica (Tabla 6.6).

Tabla 6.6 Valores de las correlaciones de la textura, materia orgánica y pH con el Cd.

Estadísticos de prueba	Arena	Limo	Arcilla	MO	pH
Valor del coeficiente de correlación r	-0.34	0.35	-0.36	0.59	-0.50
Valor del estadístico p del modelo	0.1450	0.1258	0.1212	0.0060	0.0256
<i>*Significativo con un nivel de confianza del 95%.</i>					

Debido a la relación del Cd con la MO esto llega de manera al suelo, agua, alimentos, al ser tomados por las plantas y los animales, ya que proviene de manera antrópica, afectando la salud humana (ATSDR,2007).

6.4.3 Cromo (Cr)

En la Tabla 6.7, el ANOVA muestra solo diferencias significativas del Cr entre sitios. Los resultados revelan que para el Cr el valor estadístico “p” entre temporadas no fue significativo (0.0622, $p > 0.05$). Lo que demuestra que no hay diferencias estadísticamente significativas por temporada para el Cr, sin embargo, para el sitio los valores son muy diferentes ya que los resultados estadísticos muestran que existe una alta diferencia significativa (0.0001, $p < 0.05$). El sitio tiene una gran influencia sobre la abundancia del Cr, su origen se debe a que es antrópico como lo demuestra Carreño (2011).

Tabla 6.7 Resultados de análisis de varianza (ANOVA) para el Cr.

Fuente	Suma de Cuadrados	Grados de libertad	Cuadrado Media	Estadístico F	Estadístico P
A= Sitio	183957.93	9	20439.77	61.34	<0.0001
B= Temporada	1509.80	1	1509.80	4.53	0.0622
Residual	2999.14	9	333.24		
Total	188466.88	19			
<i>*Significativo con un nivel de confianza del 95%.</i>					

En la Tabla 6.8, se muestra principalmente la correlación significativa del Cr con la MO y pH. Existe una alta dependencia de los valores de la materia orgánica en el Cr, al ser este uno de los elementos más abundantes de la corteza terrestre no es fácil identificar si los incrementos son por fuentes antrópicas o de fuentes naturales; esta zona está fuertemente influenciadas por zonas extensas de manglares y de macrófitas que incrementan dramáticamente los niveles de materia orgánica que predispone la presencia y abundancia de metales pesados como del Cr al formar compuestos de óxidos y ligandos con la materia orgánica.

Tabla 6.8 Valores de las correlaciones de la textura, materia orgánica y pH con el Cr

Estadísticos de prueba	Arena	Limo	Arcilla	MO	pH
Valor del coeficiente de correlación r	-0.41	0.44	-0.06	0.56	-0.50
Valor del estadístico p del modelo	0.0761	0.0507	0.7906	0.0140	0.0286
<i>*Significativo con un nivel de confianza del 95%.</i>					

6.4.4 Níquel (Ni)

Tabla 6.9 Resultados de análisis de varianza (ANOVA) para el Ni

Fuente	Suma de Cuadrados	Grados de libertad	Cuadrado Media	Estadístico F	Estadístico P
A= Sitio	51134.42	9	5681.60	85.75	<0.0001
B= Temporada	1457.95	1	1457.95	22.00	0.0011
Residual	596.35	9	66.26		
Total	53188.72	19			
<i>*Significativo con un nivel de confianza del 95%.</i>					

En la Tabla 6.9, se indican que el Ni, presenta altas diferencias significativas entre sitios y temporadas. El níquel es un metal de transición con cinco estados de oxidación que puede formar una gran variedad de especies distintas (Olivares, 2012).

El níquel se encuentra en el aire, en el suelo, puede tardar días o meses para ser removidos. Una cantidad considerable deriva de la combustión del carbón, petróleo, y otros combustibles fósiles, la incineración de residuos y las aguas residuales. La porción de níquel en el suelo se capta por las plantas cultivadas y a través de los alimentos que llegan al ser humano (Olivares, 2015).

De acuerdo con Ruiz-Marin et al. (2014), el Ni presentó correlaciones significativas con limo y materia orgánica ($p \leq 0.05$), lo que indica que sus concentraciones se pueden explicar por procesos biogeoquímicos naturales. En cuanto a las correlaciones del Ni, la Tabla 10 muestra que hay diferencias significativas con el Limo, y la MO.

Tabla 6.10 Valores de las correlaciones de la textura, materia orgánica y pH con el Ni.

Estadísticos de prueba	Arena	Limo	Arcilla	MO	pH
Valor del coeficiente de correlación r	-0.37	0.45	0.03	0.48	-0.19
Valor del estadístico p del modelo	0.1124	0.0472	0.9149	0.0383	0.4052
<i>*Significativo con un nivel de confianza del 95%.</i>					

6.4.5 Plomo (Pb)

Tabla 6.11 Resultados de análisis de varianza (ANOVA) para el Pb

Fuente	Suma de Cuadrados	Grados de libertad	Cuadrado Media	Estadístico F	Estadístico P
A= Sitio	1147.58	9	127.51	47.22	<0.0001
B= Temporada	183.98	1	183.98	68.13	<0.0001
Residual	24.30	9	2.70		
Total	1355.86	19			
<i>*Significativo con un nivel de confianza del 95%.</i>					

En la Tabla 11, se indica que el Pb presentó diferencias altamente significativas entre sitios y temporadas y el aporte antrópico de las actividades ganaderas y agricultura que se realizan en los sitios cercanos de muestreo influyen en la concentración detectadas, tal como lo menciona Castañeda (2011); además que el Pb en temporada de seca registró la mayor concentración.

Tabla 6.12 Valores de las correlaciones de la textura, materia orgánica y pH con el Pb

Estadísticos de prueba	Arena	Limo	Arcilla	MO	pH
Valor del coeficiente de correlación r	-0.27	0.31	-0.31	0.42	-0.63
Valor del estadístico p del modelo	0.2565	0.1883	0.1890	0.0704	0.0057
<i>*Significativo con un nivel de confianza del 95%.</i>					

En cuanto a las correlaciones del Pb, la Tabla 6.12 muestra que no hay diferencias significativas con la textura del suelo, a diferencia de la MO y el pH. Lozada et al., (2007) menciona que al ser este uno de los elementos que se da de forma natural en el ambiente, pero las mayores concentraciones encontradas en el ambiente son el resultado por origen antrópico, sus principales causas de la contaminación ambiental con este metal son: la utilización en los aditivos antidetonantes de la gasolina, plaguicidas. Como mencionan en otros estudios Ruiz – Marín et al., (2014) que el Pb presento correlaciones significativas con la MO ($p \leq 0.05$), lo que indica que sus concentraciones se pueden explicar por procesos biogeoquímicos naturales, que una parte tiene relación antropogénica.

6.4.6 Análisis de correlación múltiple entre metal – metal

Se realizó un análisis de correlación entre metal – metal (Tabla 6.13), para determinar el grado de relación entre las variables y poder determinar si tienen fuentes de generación en común.

Tabla 6.13 Coeficientes de correlación de Spearman temporada de Lluvias

	As	Cd	Cr	Ni	Pb
As	1.00				
Cd	0.95*	1.00			
Cr	0.97*	0.90*	1.00		
Ni	0.74*	0.74*	0.71*	1.00	
Pb	0.41	0.41	0.56	0.35	1.00

**Correlación significativa ($p \leq 0.05$).*

Los resultados en la temporada de lluvias indican que existe una relación entre el Ni-As, Cr-As, Cd-As, Ni-Cd, Cr-Cd, Ni-Cr. Probablemente tienen fuentes en común de generación, otros estudios como el Aguilar et al. (2009) no observaron correlación significativa entre metal – metal.

Tabla 6.14 Coeficiente de correlación Spearman en temporada de Secas

	As	Cd	Cr	Ni	Pb
As	1.00				
Cd	0.77*	1.00			
Cr	0.97*	0.82*	1.00		
Ni	0.76*	0.56	0.74*	1.00	
Pb	0.44	0.40	0.59	0.28	1.00

**Correlación significativa ($p \leq 0.05$).*

Para la temporada de secas la relación fue Ni-As, Cr-As, Cd-As, Cr-Cd, Ni-Cr (Tabla 14). Los resultados son similares a la anterior, hay probabilidades de tener fuentes en común de generación, debido a que el As al presentar correlación significativa con metales como Ni, Cd y Cr; indica que existe una misma fuente de generación y, por tanto, mayor influencia antropogénica en la contaminación que presentan los suelos de Atasta, Campeche.

6.5 Agradecimientos

Paulo. A. Benítez Pineda, agradece al Laboratorio de Ing. Ambiental de la Facultad de Química de la Universidad Autónoma del Carmen, el apoyo brindado durante la presente investigación. así como al PNPC_CONACYT por la beca recibida durante los estudios de Maestría en Ciencias Ambientales (3a Generación: 2018-2020, CVU-920418)

6.6 Conclusiones

La ausencia de programas de vigilancia, control de contaminantes al ambiente costero mexicano, la creciente urbanización, la falta de una verdadera aplicación de normas ambientales, han ocasionado que los suelos de la Península de Atasta presenten problemas de contaminación por presencia de metales pesados principalmente de Cr, Ni y Pb.

Los sitios 2,3,4 de los suelos de la península de Atasta presentaron las concentraciones promedio más altas de As, Cd, Cr. Los sitios 2,3,4,5,9,10 mostraron las concentraciones más altas de Níquel y el Pb en los sitios 2,4,6,7; en ambas temporadas (lluvias y secas) en el estudio de metales pesados realizado en 2019.

En la época de lluvias el Cromo, Níquel y Plomo fueron los elementos con mayor concentración en los suelos estudiados, lo cual indica la presencia de niveles no permitidos para los tres elementos de acuerdo con la NOM-147-SEMARNAT/SSA1-2004, las normas canadienses y estadounidenses. Con respecto a la época de secas siguen siendo el Cromo, Níquel y el Plomo los de mayor concentración. Lo anterior, sugiere que los suelos localizados en la periferia de la Planta de recompresión de Atasta se encuentran contaminados por Cr, Ni y Pb y rebasaron los límites máximos permisibles establecidos en la Norma Mexicana (NOM-147) y Norma Canadiense (CEQG).

Los resultados del presente estudio servirán como antecedente en futuras investigaciones en la relación planta-suelo-microorganismos, para una posible aplicación de fitorremediación en los sitios con mayor concentración de metales en la península de Atasta, Campeche.

Conociendo que existen concentraciones elevadas de Cr, Ni y Pb, y que éstos son los más tóxicos, es necesario realizar una investigación sobre la especiación de estos tres metales estudiados. Del mismo modo realizar un plan de monitoreo del agua de río, riego y de consumo humano para conocer la calidad en cuanto a la concentración de metales pesados por el grado de toxicidad que éstos presentan para la salud pública.

6.7 Anexo

Tabla A.1 Sitios de muestreo en suelos de la península de Atasta.

Sitio No.	Lugar	Coordenadas	
		(Latitud N	– Longitud O)
1	Nuevo Progreso	18°37'32"	92°19'11"
2	Planta de Recompresión de Gas I	18°38'15"	92°9'43"
3	Nuevo Progreso	18°37'18"	92°16'45"
4	Planta de Recompresión de Gas II	18°38'15"	92°9'44"
5	San Antonio Cárdenas (Laguna Pom).	18°36'30"	92°13'8"
6	Atasta	18°37'9"	92°6'9"
7	Atasta (Laguna Atasta)	18°37'8"	92°6'9"
8	San Antonio Cárdenas (Casa)	18°37'2"	92°13'45"
9	San Antonio Cárdenas (patio GIPSA).	18°37'8"	92°16'38"
10	Atasta (Vereda al atracadero)	18°36'39"	92°9'40"

6.8 Referencias

- Aguilar Ucan, C. A. (2018). Cuantificación de los niveles de metales pesados en el río palizada. Universidad Autónoma de Campeche. Pág. 214
- ATSDR (2005). Agencia para sustancias tóxicas y el registro de enfermedades. Reseña toxicológica del níquel. Atlanta, GA: Departamento de salud y servicios humanos de EE. UU. Servicio de salud pública.
- ATSDR (2007). Agency for toxic substances & disease registry. Reseña toxicológica del Cadmio. Atlanta, GA: Departamento de salud y servicios humanos de EE. UU. Pág.8
- Bucio, J.L (2008).Contaminacion de la bahia de Chetumal por metales pesados, materia organica y nutrientes producidos por las descargas de aguas residuales municipales. *Caos Conciencia*.5-11.
- Bundschuh, J (2010). Possible treatments for arsenic removal in latin american waters for human consumption. *Environmental Pollution*. 158. 105-1118
- Canadian Environmental Quality Guidelines (CEQG), 2002, Summary of Existing Canadian Environmental Quality Guidelines (en línea): Canadian Council of Ministers of the Environment, Canadian Environmental Quality Guidelines.
- Carreño, C. (2011). Metal Content and Elemental Composition of Particles in Cohesive Sediments of the Lerma river, México. *Internacional de contaminación Ambiental*. 181-190.
- Castañeda, M. R. (2011). Metales Pesados en Sedimento el Sistema Lagunar Carmen-Machona-Pajonal, Tabasco. *SETAC*.
- Espinoza,Luisa Fernanda (2008). Distribution of heavy metals (Pb,Cd, and Zn) in sediment profiles. Associated to Rhizophora mangle in sevilla River-Ciénaga Grande de Santa Marta, Colombia. *Bol.Invest.Cost*. 37 (1). 95-110
- Garcia, Roberto. (2019). La materia orgánica disuelta en los ambientes dulceacuicolas. Efectos en los ecosistemas, transferencia y transformación.18. 1-7
- Lozada-Zarate, J. (2007). Determinación de la concentración de metales en Cyprinus Carpio, Linnaeus 1758 (carpa común) de la Laguna de Metztlán, Hidalgo, México. Tesis de Licenciatura. Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo. Hidalgo, México, 1-63

NOM-147-SEMARNAT/SSA1-2004. Establece criterios para la caracterización de concentraciones de remediación de suelos contaminados por arsénico,bario,berilio,cadmio,cromo hexavalente,mercurio,niquel,plata,plomo,selenio,talio,vanadio. (*Diario Oficial de la Federación*). Procuraduría Federal de Protección al Ambiente. México.

Olivares, V., Valverde, L., Quiros, R., Garcia, N., Muñoz, M.Navarro Alarcón y Cabrera, C. (2015). Niquel en alimentos y factores influyentes en sus niveles, ingesta, biodisponibilidad y toxicidad: Una revisión. *CyTa-Journal of food*. 13(1).87-101

Roca - Fernández, (2001). Compost de residuos sólidos urbanos: fertilizantes y enmienda.Centro de Investigaciones de Mabegondo. INGACAL. Xunta de Galicia.Agricultura, p. 608-6

Ruiz-Marin Alejandro.(2014). Diagnóstico de la contaminación por metales pesados en sedimento superficial de la laguna de términos, Campeche: una aproximación Estadística. *AIDIS*. 7. 95-104.

Sastre - Conde Isabel, Maria & C,RC & Lorenzo, ME & P, MY & Ruiz Marin, A. & González - O, J. (2003). Heavy metal distribution in the sediments of the fluvial - lagoon system Pom - Atasta, Campeche (México). *Remediation of contaminated sediments*.1-10.

Capítulo 7 Characterization of vermiculite+BaCl₂ composite for solar refrigeration

Capítulo 7 Caracterización del composite vermiculita+BaCl₂ para refrigeración solar

LARA-LUNA, Rubén Jayim†, MEZA-CRUZ, Onésimo, MARTINEZ-TEJEDA, Francisco Christian y PATIÑO-CARACHURE, Cristóbal*

†Universidad Autónoma del Carmen, Facultad de Ingeniería, Campus III, Avenida Central S/N, Esq. con Fracc. Mundo Maya, C.P. 24115, Ciudad del Carmen, Camp., Mex.

***Universidad Politécnica del Estado de Guerrero, Departamento de Ingeniería en Energía, México.*

ID 1^{er} Autor: *Rubén Jayim, Lara-Luna* / **CVU CONACYT ID:** 930958

ID 1^{er} Coautor: *Onésimo, Meza-Cruz* / **ORC ID:** 0000-0002-0875-6852, **CVU CONACYT ID:** 488085

ID 2^{do} Coautor: *Francisco Christian, Martínez-Tejeda* / **ORC ID:** 0000-0001-6951-5166, **CVU CONACYT ID:** 334729

ID 4^{to} Coautor: *Cristobal, Patiño-Carachure* / **ORC ID:** 0000-0002-1436-1259, **CVU CONACYT ID:** 226327

DOI: 10.35429/H.2021.12.1.69.77

R. Lara, O. Meza, F. Tejeda y C. Patiño

* cpatino@pampano.unacar.mx

S. Figueroa, B. Pérez, J. Flores, L. Santis. (AA. VV.) Ingeniería y Ciencias Aplicadas. Handbooks-©ECORFAN-México, Campeche, 2021.

Resumen

La refrigeración por energía solar es una alternativa al enfriamiento por compresión. En estos sistemas, se emplean materiales composites capaces de realizar una reacción termoquímica eficiente, por lo cual se implementa el fenómeno de absorción sólido-gas. En este trabajo, fue sintetizado y caracterizado un material composite a base de vermiculita y sal (BaCl_2) con el propósito de cumplir con las características de un composite útil para refrigeración solar. Fueron diseñadas muestras con variación en el porcentaje de sal y vermiculita para utilizar el método de impregnación en seco. Las muestras fueron caracterizadas por difracción de rayos X (DRX), microscopia electrónica de barrido (MEB) y área superficial por BET. Los análisis de MEB y DRX indican una mayor impregnación de sal sobre la superficie de vermiculita para las muestras de mayor porcentaje de solución acuosa. De la técnica de BET se puede deducir que en este composite, se incrementa la capacidad de absorción, porosidad y área superficial. Así, el composite obtenido cumple con la característica más importante de ser implementado en las mediciones de absorción sólido-gas en un reactor que utiliza energía solar térmica.

BaCl₂, Vermiculita, DRX, MEB, BET

Abstract

Solar energy refrigeration is an alternative to compression cooling. In these systems, composite materials capable of carrying out an efficient thermochemical reaction are used, therefore the solid-gas absorption phenomenon is implemented. In this work, a composite material based on vermiculite and salt (BaCl_2) was synthesized and characterized in order to comply with the characteristics of a useful composite for solar cooling. Samples with variation in the percentage of salt and vermiculite were designed to use the dry impregnation method. The samples were characterized by X-ray diffraction (XRD), scanning electron microscopy (SEM) and surface area by BET. The SEM and XRD analyzes indicate a greater permeation of salt on the vermiculite surface for the samples with a higher percentage of aqueous solution. From the BET technique it can be deduced that in this composite, the absorption capacity, porosity and surface area are increased. Thus, the composite obtained complies with the most important characteristic of being implemented in the solid-gas absorption measurements in a reactor that uses thermal solar energy.

BaCl₂, vermiculite, XRD, SEM, BET

7.1 Introducción

La generación de frío conlleva problemáticas de índole ambiental, económico y técnico. Es por ello, que el tema de la generación de frío sigue vigente y por ende se investigan y desarrollan técnicas alternativas a la refrigeración por compresión. Entre estas alternativas, se encuentra la refrigeración por sorción, y a su vez ésta contiene una técnica denominada refrigeración termoquímica o refrigeración por absorción sólido-gas. Esta es una técnica promisoría debido a que su ciclo termodinámico no utiliza energía eléctrica, esto sugiere no utilizar equipos electromecánicos para mover el refrigerante, tales como bombas o compresores. La energía que acciona el ciclo de la refrigeración termoquímica es en forma de calor y ésta puede provenir de alguna fuente de energía renovable. La sorción sólido-gas o termoquímica se caracteriza por la solubilidad que presentan los gases en estructuras sólidas, con la particularidad de generar una reacción química. En este tipo de reacciones químicas, se utilizan con frecuencia sales metálicas, en particular los halogenuros de metales alcalinos y alcalino-térreos, los cuales, en estado anhidro, pueden absorber grandes cantidades de amoníaco u otros refrigerantes (agua, alcoholes, aminas, etc.). Entre las sales que más se han utilizado, en las últimas dos décadas, están: el cloruro de calcio (CaCl_2) (Enibe & Iloeje, 1997), $\text{SrCl}_2\text{-NH}_3$ (Rao et al., 2015), el $\text{BaCl}_2\text{-NH}_3$ (Rivera et al., 2007), pero no son las únicas, Neveu P. y Castaing J. (1993) (Neveu & Castaing, 1993) reportan 36 reacciones sólido-gas, principalmente cloruros que reaccionan con amoníaco. Sin embargo, las sales mencionadas presentan problemáticas después de reaccionar con el amoníaco. La principal problemática de las sales puras es la conductividad térmica, ya que es muy baja con valores entre 0.1 y 0.3 W/mK (R. Wang et al., 2014), por lo cual esto conduce a una baja transferencia de calor. Por otro lado, una vez que la sal ha reaccionado con el amoníaco se presenta la aglomeración, esto disminuye la transferencia de masa al interior de la sal.

Con el objetivo de mejorar las condiciones de transferencia de calor y evitar la aglomeración, se han desarrollado materiales composites, mezclas entre las sales antes mencionadas y sólidos inertes como grafito expandido (Li et al., 2009), vermiculita (Zhong et al., 2007)(Veselovskaya et al., 2010), carbón sibunit y Al_2O_3 (Veselovskaya et al., 2010). Por lo tanto, en esta investigación se presenta las síntesis y caracterización de un composite a base de vermiculita y $BaCl_2$ utilizando la técnica de impregnación en seco, variando las composiciones en % peso. Se analiza y se discute por las técnicas de DRX, MEB y BET.

7.2 Metodología

En esta sección se describe el procedimiento experimental llevado a cabo para la obtención del composite de vermiculita y $BaCl_2$.

7.2.1 Síntesis del composite

Para la síntesis se utilizó la técnica de impregnación en seco, en la cual se utilizaron porcentajes desde 25 al 75 % peso de la vermiculita y la sal ($BaCl_2$). Los porcentajes en peso se muestran en la Tabla 7.1, donde se utilizó 1 g de vermiculita para todas las muestras variando solamente la composición de la sal. Las primeras 2 muestras fueron diluidas en 5 ml de agua destilada y en 15 ml las demás.

Tabla 7.2 Porcentaje de los materiales para la síntesis del composite

Muestra	% peso Verm	% peso Sal	peso sal (g)
1	60	40	0.667
2	40	60	1.5
3	60	40	0.667
4	50	50	1
5	40	60	1.5
6	25	75	3
7	60	40	0.667
8	50	50	1
9	40	60	1.5

Fuente: Elaboración propia

La impregnación consiste en verter lentamente la sal previamente disuelta en agua, la cual se impregna sobre las muestras de vermiculita. Una vez preparadas las muestras se ingresan a un horno de convección y se dejan reposar por 2 horas a 160 °C. Después se retiran del horno y se ingresan a un desecador de vacío para que se enfríen evitando el contacto con el ambiente. Una vez que se obtuvieron las primeras muestras a 5 ml de agua, por lo que se aumentó a 15 ml de agua para el resto de las muestras en las cuales se observó una mayor impregnación. En la figura 1 se puede observar la comparación de la impregnación empleando a) 5 ml y b) 15 ml de salmuera, en esta última se puede apreciar la sal distribuida uniformemente sobre toda la muestra.

Figura 7.1 Impregnación de salmuera diluida en a) 5 ml y b) 15 ml de agua, sobre la vermiculita



Fuente: Elaboración propia

7.2.2 Caracterización

La caracterización química, morfológica y estructural de los composites se llevó a cabo por la técnica de MEB en un equipo JEOL JSM-7600F con microanalizador marca BRUKER modelo XFlash y la DRX en un equipo marca BRUKER modelo D8 ADVANCE DAVINCI con una radiación de Cu-K α de longitud de onda de $\lambda=1.5406 \text{ \AA}$, con un rango de barrido de $2\theta = 10^\circ - 50^\circ$, con una velocidad de $0.02^\circ/\text{s}$. Para la técnica BET se utilizó un equipo Quantachrome TouchWin versión 1.11, St 1 on NOVA touch 1LX [s/n:17015072001], esta se aplica a los sistemas de absorción y cuantificar el área superficial específica. Además de esta variable también se puede medir la distribución del tamaño de los poros. Esta información es útil en la evaluación del rendimiento del composite y la consistencia de síntesis, también para determinar la velocidad de absorción y de difusión en los poros.

7.3 Resultados y discusión

Mediciones del área superficial específica de la sal BaCl₂ y el composite Vermiculita (60%) + BaCl₂(40%), utilizando la técnica BET son presentados en la Tabla 7.2. Donde es posible observar el área superficial específica, el volumen y el radio de poro que estos materiales poseen. Pocos trabajos han reportado estas características importantes para la aplicación de composites en esta área, y para tomar una referencia, se presenta la medición del área superficial de la fase vermiculita natural de un trabajo previo, en el primer renglón de la tabla. Se puede notar que esta medición se encuentra aproximadamente alrededor del promedio estadístico del anterior trabajo (Rafael Diaz, n.d.).

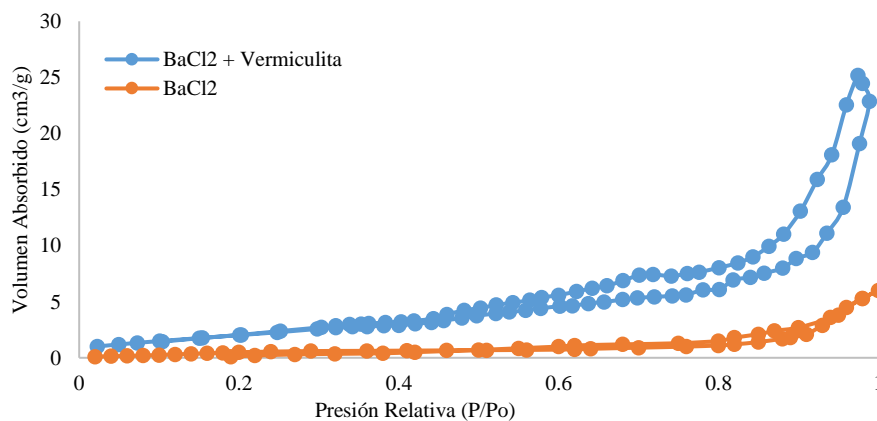
Tabla 7.2 Área superficial específica por BET

Material	Área superficial específica (m ² /g)	Volumen de poro total (cm ³ /g)	Radio de poro promedio de desorción
Vermiculita (Shinzato et al., 1999)	13.7	-	-
BaCl ₂	22.18	0.05286	1.897
Vermiculita+BaCl ₂	12.4975	0.04099	1.8114

Fuente: Elaboración propia

En el Gráfico 7.1 se muestran las curvas isotermas de absorción por el método BET, donde la relación entre la presión y el volumen absorbido de gas por un sólido, a temperatura constante, proporciona la capacidad de absorción. La prueba se le realizó a la sal pura BaCl₂ y al composite propuesto (muestra 1), dando como capacidad de absorción (curva abajo) logrando llegar a un valor máximo aproximado de $6 \text{ cm}^3/\text{g}$ y $25 \text{ cm}^3/\text{g}$ respectivamente. Con estos valores se puede apreciar que al agregar vermiculita a la sal pura se puede incrementar la cantidad de fluido que se puede absorber por cada gramo de composite. El objetivo principal de agregar una matriz porosa a una sal inorgánica es el de evitar que la sal, después de varios ciclos de refrigeración, se conglomeren y reduzca su eficiencia de absorción, otro objetivo sería el de mejorar su conductividad térmica y al mejorar sus propiedades de absorción, como en este caso, se obtendría un mejor resultado, esta última variable proporcionaría un incremento en el volumen de refrigerante que el composite es capaz de absorber/desorber dentro del sistema y de esta forma mejorar el rendimiento del ciclo.

Gráfico 7.1 Isotermas obtenidas a través de BET, a) BaCl₂ (L. Wang et al., 2009), b) Composite

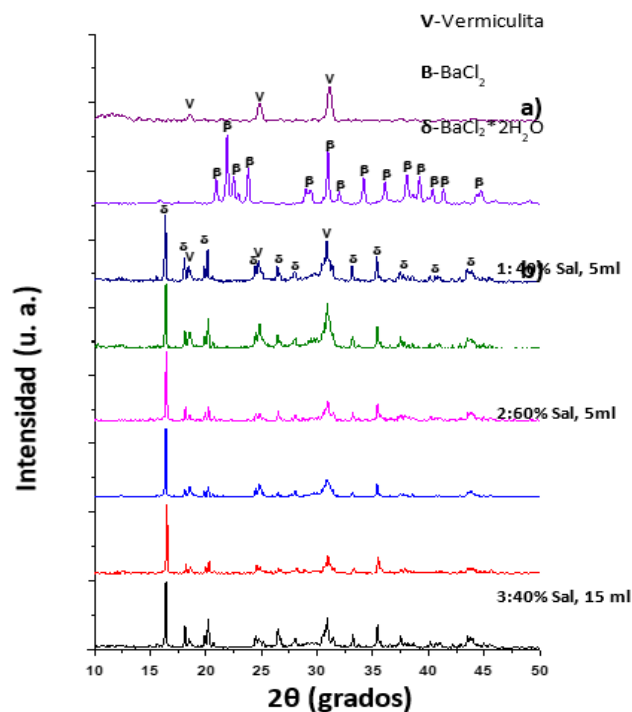


Fuente: Elaboración propia

El Gráfico 7.3 muestra los patrones de DRX de las diferentes muestras sometidas al método de impregnación. Los patrones a) y b) corresponden a las muestras de partida, de las cuales se pueden apreciar los picos característicos de las fases V-vermiculita y sal de β -BaCl₂. De acuerdo con la indexación con la base de datos AMCSD (American Mineralogist Crystal Structure Database) la fase cristalográfica de la vermiculita corresponde a una estructura cristalina monoclinica con grupo espacial C1c1(9), con parámetros de red $a=5.33$, $b=9.18$ y $c=28.9$ Å, $\beta=97^\circ$, con formula de $Mg_{1.338}Fe_{0.24}Al_{0.721}Si_{1.36}O_9H_{1.75}$, estos valores son obtenidos de la tarjeta PDF 100-0061. De la misma manera fue identificada la fase BaCl₂ con una estructura ortorrómbica, Pbnm (62), $a=9.415$, $b=7.878$ y $c=4.731$ Å. Con respecto a lo obtenido en las muestras de partida se obtuvieron resultados semejantes a los obtenidos por otros autores (Gordeeva et al., 2013) (Grekova et al., 2014).

Los difractogramas 1 y 2 corresponden a las muestras impregnadas con una concentración de 40 y 60 % de salmuera diluida en 5 ml de agua destilada. En estos perfiles se puede apreciar la presencia de las fases δ -BaCl₂*2H₂O (hidrato de cloruro de bario, estructura monoclinica) y vermiculita. De estos resultados se deduce que la fase BaCl₂ fue di-hidratada durante el manejo de la caracterización, dado que el BaCl₂ es una sustancia higroscópica y reacciona espontáneamente con la humedad del medio ambiente. Por otro lado, comparando en función del porcentaje de sal (40 y 60 %) en el sistema, se puede apreciar que ambos perfiles se mantienen ligeramente iguales, por lo cual se sugiere que la concentración de sal diluida en 5 ml sobre la vermiculita no presenta cambios significativos sobre este proceso de impregnación. De esto, se puede interpretar que la fase vermiculita tiene una presencia significativa, de esta forma se puede asumir que el composite ha tenido una baja impregnación. Para las muestras cuya impregnación se utilizó una variación de concentración del orden de 40, 50, 60 y 75 % de sal diluida en 15 ml de agua destilada, se presentan en los difractogramas 3, 4, 5 y 6 respectivamente. En estos difractogramas debido a la disminución de la intensidad de los picos (ángulos $2\theta \approx 25^\circ$ y 31°) de la fase vermiculita se puede observar que la fase BaCl₂*2H₂O aparece en mayor proporción y conforme incrementa el porcentaje de sal, así mismo, se observa la disminución sistemática de la fase vermiculita, por lo tanto, la impregnación para estas condiciones depende directamente del incremento de la concentración de sal sobre la vermiculita. También, es importante mencionar que experimentalmente, con una salmuera, las partículas de BaCl₂ fueron vertidas sobre la vermiculita, por lo que la sal se encuentra dispersa sobre toda la superficie de la vermiculita encapsulando las partículas cerámicas, promoviendo así, la síntesis de un composite con mayor impregnación de sal. Conforme se agrega mayor relación de sal, mayor es el espesor o recubrimiento de sal sobre las partículas de vermiculita, esto se comprueba con la desaparición de los picos de la vermiculita (observado esto en mayor proporción en el patrón 5), es decir ese espesor no permite el paso de los DRX que le permita difractar a la fase vermiculita.

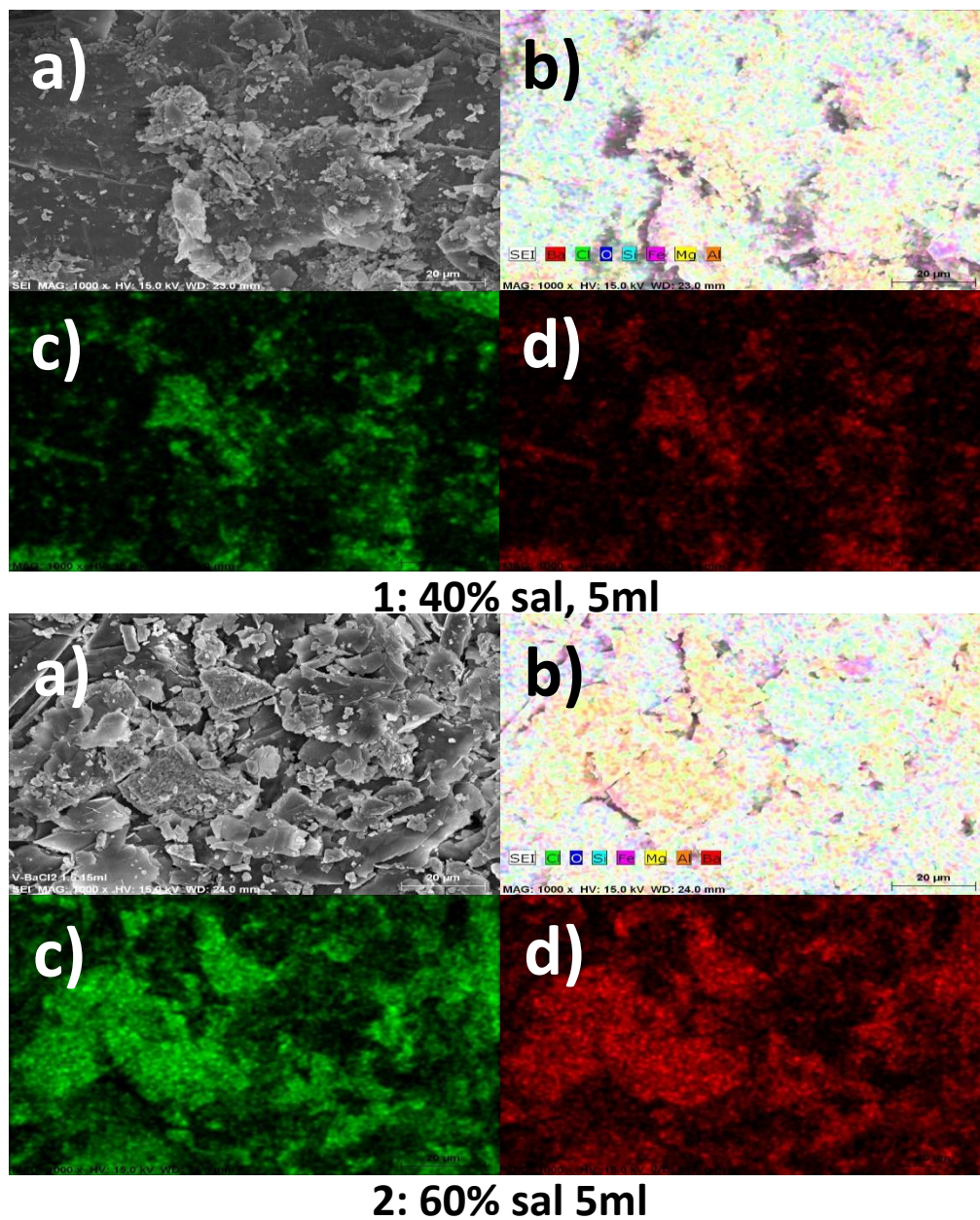
Gráfico 7.2 Patrones de DRX correspondientes de partida, a) vermiculita, b) BaCl₂ y las muestras impregnadas del 1 al 6+



Fuente: Elaboración propia

Para observar de manera directa la morfología, textura y composición química de la superficie de la vermiculita recubierta de sal, se llevó a cabo la microscopía electrónica de barrido (MEB). En la Figura 7.3 se muestran las micrografías obtenidas de las muestras 1 y 2 (impregnadas con 5 ml de agua), acorde a la nomenclatura de las tablas de experimentación. Se puede observar en la figura 4-1 y micrografía a) obtenida por electrones secundarios, donde se puede apreciar que la superficie posee un cúmulo de partículas irregulares y distribuidas en ciertas regiones de la imagen. Así, para determinar las composiciones de estas partículas se aplica la técnica de mapeo químico, que permite realizar un análisis químico bidimensional sobre la superficie expuesta. En la micrografía b) se aprecian los diferentes componentes químicos tal como Ba, Cl, O, Si, Fe, Mg y Al. A partir de estos resultados se procede a exponer los componentes principales de la sal, que corresponden al Cl y Ba, los cuales únicamente se muestran en las micrografías c) color rojo y d) color verde respectivamente. En estas micrografías se observa directamente la distribución de Ba y Cl en la misma región, deduciéndose así que la fase de sal $BaCl_2$ se encuentra ahí. Así, comparándose estas micrografías con respecto a la muestra 2 (figura 4-2), por ejemplo, en la micrografía a) se manifiesta una distribución de partículas distribuidas homogéneamente recubriendo la mayor parte de la superficie. De la misma manera comparando en b), c) y d) se aprecia una mayor distribución de la fase $BaCl_2$ sobre la superficie de la vermiculita, esto puede explicarse debido al incremento en porcentaje (60%) de la concentración de sal en el sistema.

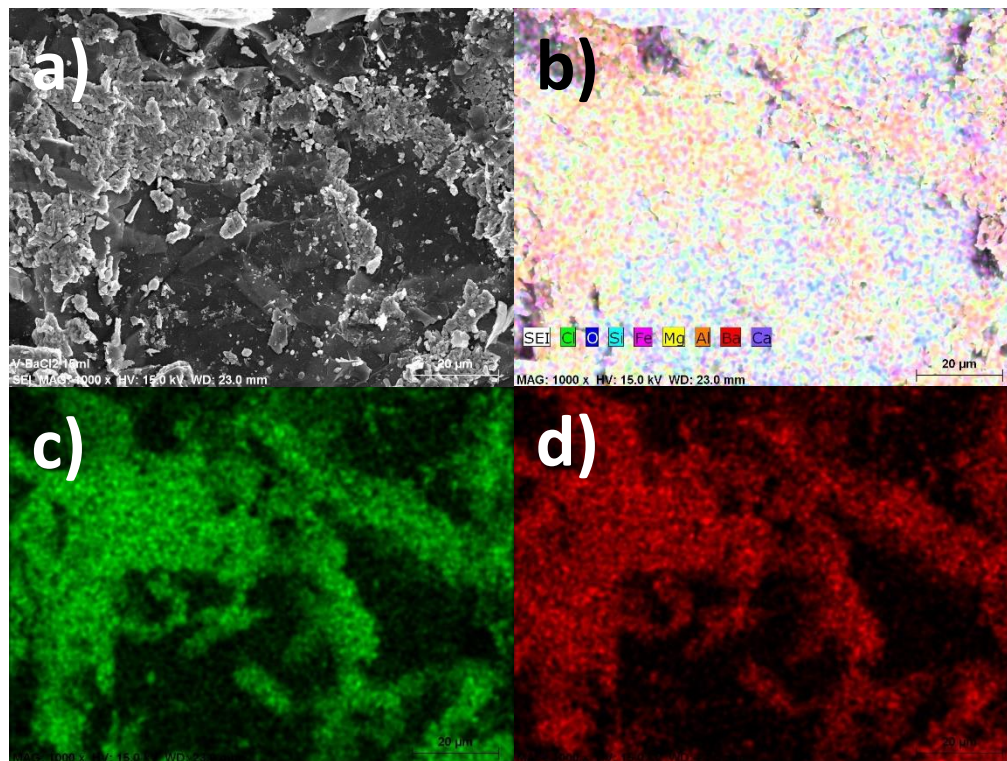
Figura 7.3 Micrografías en modo mapeo químico por MEB, muestras impregnadas de porcentajes 40 y 60 % de sal diluidas en 5 ml de agua



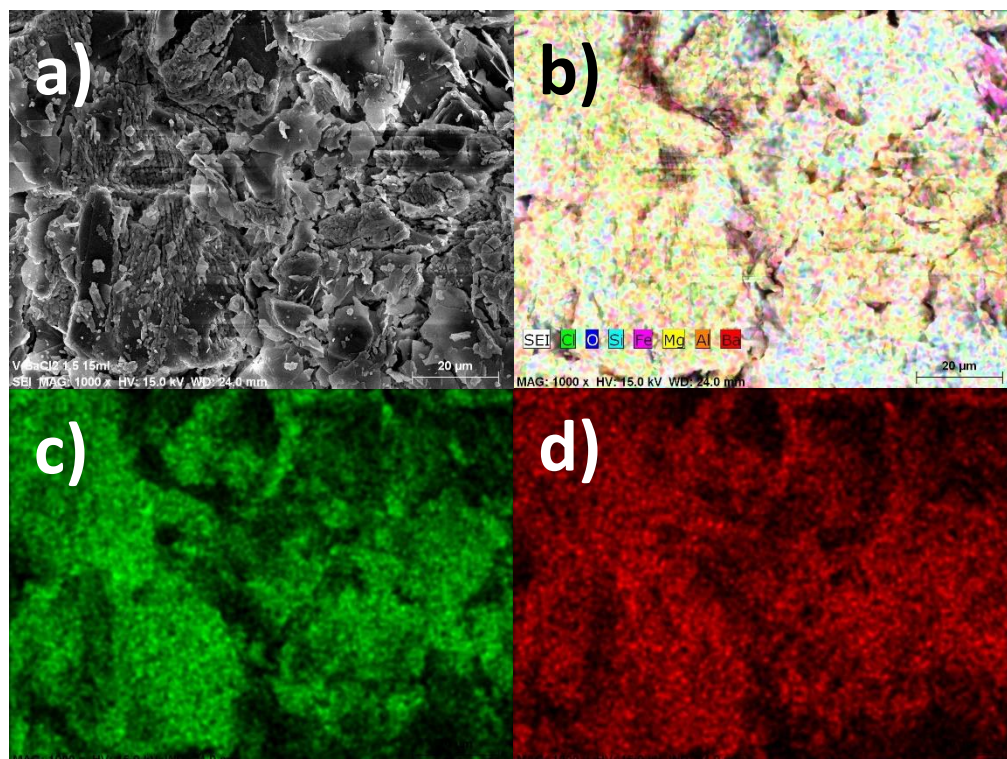
Fuente: Elaboración propia

Comparando estos resultados con las micrografías mostradas en la figura 7.4 que corresponden a las muestras de una mayor disolución (15 ml de agua) se puede observar cualitativamente como en la muestra 3 y 5 se aprecia una impregnación superficial más efectiva, es decir, un mayor porcentaje de sal sobre la superficie de la vermiculita.

Figura 7.4 Micrografías en modo mapeo químico por MEB, muestras impregnadas de porcentajes 40 y 60 % de sal diluidas en 15 ml de agua



3: 40% sal, 15 ml



5: 60% sal, 15 ml

Fuente: Elaboración propia

Se determinó el valor semi-cuantitativo de la sal impregnada, para esto se utilizó los resultados estadísticos de varios análisis químicos realizados en diferentes regiones de las muestras presentadas en la tabla 7.3. El valor de la última fila de la tabla 3 representa el porcentaje real de impregnación respecto al total de sal utilizada. Por ejemplo, para la muestra 1 sólo el 44% del total de sal utilizada se quedó impregnada en el composite, es decir que menos del 50% de la sal que se empleó para la síntesis fue aprovechada. Se puede observar como la muestra 1 y 2 son las que menor % de impregnación presentan, se debe recordar que estos dos composites son los que se sintetizaron con 5 ml de agua, mientras que el resto se sintetizaron con 15 ml de agua, uno de ellos alcanzando el 93% de impregnación.

Tabla 7.3 Resultados porcentuales de los elementos presentes en los composites

	Muestra 1	Muestra 2	Muestra 3	Muestra 4	Muestra 5
Vermiculita (%)	60	40	60	50	40
BaCl ₂ (%)	40	60	40	50	60
Elemento	norm wt. %				
Oxígeno	64.1014117	54.7716427	51.0394067	44.7090928	38.6400877
Magnesio	5.05545726	3.28774911	3.45716858	1.46318545	1.84476552
Silicio	6.94779337	4.47151127	4.46070285	2.94910894	2.23980832
Cloro	4.54439842	11.096951	11.3107123	13.7185486	16.357423
Calcio		0.88502167			
Hierro	4.40613541	3.93554202	3.93962623	3.96975366	2.81917469
Bario	13.2885572	20.7225368	24.5625523	32.7937604	37.670534
Aluminio	1.65624664	0.82904547	1.22983099	0.39655019	0.42820689
Suma	100	100	100	100	100
BaCl ₂	17.8329556	31.8194878	35.8732647	46.512309	54.0279569
% Impregnación	44.582389	53.0324797	89.6831618	93.024618	90.0465948

Fuente: Elaboración propia

7.4 Conclusiones

La implementación de composites a los sistemas de refrigeración resultaría en una práctica viable ya que la combinación de una matriz porosa con una sal inorgánica presenta mejoras como en la porosidad, permeabilidad y conductividad térmica. Con los resultados del BET se obtuvo que la capacidad de absorción del BaCl₂ se mejoró poco más de 4 veces al combinarlo con una matriz porosa, en este caso la vermiculita.

Un punto importante durante la síntesis de los composites es asegurar que la mayor cantidad de sal utilizada se impregne en la matriz, de esta forma se pueden obtener mejores composites y mejorar la metodología de síntesis. En este trabajo se pudo observar que la cantidad de agua con la que se mezcla la sal para preparar la salmuera es importante debido a que con menor volumen se obtuvo menor impregnación que al utilizar un mayor volumen de agua.

En el DRX se observa que el composite completamente molido muestra la presencia de ambos compuestos (vermiculita y BaCl₂) es decir, cuanto más fino se presente el composite, la sal que esta sobre las partículas de vermiculita se estaría desprendiendo.

De los resultados de DRX y MEB se puede deducir que cuando se incrementa la concentración de BaCl₂ diluida en 15 ml de agua, se incrementa la impregnación. Se debe señalar que la vermiculita, como todo material, posee un límite de impregnación, ese valor dependerá y se podrá conocer a partir del área de superficie.

Estos resultados también sugieren que al disminuir la cantidad de agua a diluir con la concentración de BaCl₂ la salmuera tiende a aglomerarse, motivo por el cual no es posible su dispersión homogénea sobre la superficie de la vermiculita.

Tanto de forma cualitativa con el DRX y el MEB como de forma cuantitativa con el MEB se comprobó que las muestras sintetizadas con más cantidad de agua presentan un mayor porcentaje de impregnación de sal sobre la superficie de la vermiculita estos andan en un rango del 63 al 90%.

7.5 Agradecimientos

R.J. Lara-Luna agradece a CONACyT por el financiamiento otorgado (Número de apoyo: 719530) para realizar sus estudios de posgrado. Asimismo, al Dr. Jose Enrique Flores Chan y el M.C. Ivan Eleazar Castro Cisneros por el apoyo técnico en las pruebas de BET y MEB.

7.6 Referencias

- Enibe, S. O., & Iloeje, O. C. (1997). Transient analysis and performance prediction of a solid absorption solar refrigerator. *Solar Energy*, *61*(1), 43–59. [https://doi.org/10.1016/S0038-092X\(96\)00155-7](https://doi.org/10.1016/S0038-092X(96)00155-7)
- Gordeeva, L., Grekova, A., Krieger, T., & Aristov, Y. (2013). Composites “binary salts in porous matrix” for adsorption heat transformation. *Applied Thermal Engineering*, *50*(2), 1633–1638. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2011.07.040>
- Grekova, A. D., Veselovskaya, J. V., Tokarev, M. M., Krieger, T. A., Shmakov, A. N., & Gordeeva, L. G. (2014). Ammonia sorption on the composites “(BaCl₂+BaBr₂) inside vermiculite pores.” *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, *448*(1), 169–174. <https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2014.02.025>
- Li, T. X., Wang, R. Z., Kiplagat, J. K., & Wang, L. W. (2009). Performance study of a consolidated manganese chloride-expanded graphite compound for sorption deep-freezing processes. *Applied Energy*, *86*(7–8), 1201–1209. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2008.06.004>
- Neveu, P., & Castaing, J. (1993). Solid-gas chemical heat pumps: Field of application and performance of the internal heat of reaction recovery process. *Heat Recovery Systems and CHP*, *13*(3), 233–251. [https://doi.org/10.1016/0890-4332\(93\)90014-M](https://doi.org/10.1016/0890-4332(93)90014-M)
- Rafael Diaz. (n.d.). *Ficha Técnica del BaCl₂*. Cloruro de Bario (BaCl₂): Fórmula, Propiedades, Usos y Riesgos. <https://www.lifeder.com/cloruro-de-bario/>
- Rao, K. N. M., Gopal, R. M., & Bhattacharyya, S. (2015). Analysis of a SrCl₂-NH₃ solid sorption refrigeration system. *International Journal of Low-Carbon Technologies*, *10*(4), 365–373. <https://doi.org/10.1093/ijlct/ctt046>
- Rivera, C., Pilatowsky, I., Méndez, E., & Rivera, W. (2007). Experimental study of a thermo-chemical refrigerator using the barium chloride-ammonia reaction. *International Journal of Hydrogen Energy*, *32*(15 SPEC. ISS.), 3154–3158. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2006.01.023>
- Shinzato, M. C., Hypolito, R., & Valarelli, J. V. (1999). Utilização de Vermiculita na Retenção de Íons Metálicos. *Anais Da Academia Brasileira de Ciencias*, *71*(3), 398–407.
- Veselovskaya, J. V., Tokarev, M. M., & Aristov, Y. I. (2010). Novel ammonia sorbents “porous matrix modified by active salt” for adsorptive heat transformation. 1. Barium chloride in various matrices. *Applied Thermal Engineering*, *30*(6–7), 584–589. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2009.11.001>
- Wang, L., Chen, L., Wang, H. L., & Liao, D. L. (2009). The adsorption refrigeration characteristics of alkaline-earth metal chlorides and its composite adsorbents. *Renewable Energy*, *34*(4), 1016–1023. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2008.08.003>
- Wang, R., Wang, L., & Wu, J. (2014). Adsorption Refrigeration Technology: Theory and Application. In *Adsorption Refrigeration Technology: Theory and Application*. <https://doi.org/10.1002/9781118197448>
- Zhong, Y., Critoph, R. E., Thorpe, R. N., Tamainot-Telto, Z., & Aristov, Y. I. (2007). Isothermal sorption characteristics of the BaCl₂-NH₃ pair in a vermiculite host matrix. *Applied Thermal Engineering*, *27*(14–15), 2455–2462. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2007.02.011>

Capítulo 8 Sistema de adquisición de temperatura para diferentes profundidades de suelo en Ciudad del Carmen Campeche

Chapter 8 Temperature acquisition system for different soil depths in Ciudad del Carmen Campeche

HERNÁNDEZ-HERNÁNDEZ, Marco Antonio†*, SILVA-MARTÍNEZ, Walter Ariel, PATIÑO-CARACHURE, Cristóbal y PALEMON-ARCOS, Leonardo

Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, México.

Universidad Autónoma del Carmen, Facultad de Ingeniería, México.

ID 1^{er} Autor: *Marco Antonio, Hernández-Hernández* / **ORC ID:** 0000-0002-5958-4456, **CVU CONACYT ID:** 947882

ID 1^{er} Coautor: *Walter Ariel, Silva-Martínez* / **ORC ID:** 0000-0002-9503-9922, **CVU CONACYT ID:** 392299

ID 2^{do} Coautor: *Cristóbal, Patiño-Carachure* / **ORC ID:** 0000-0002-5958-4456, **CVU CONACYT ID:** 947882

ID 3^{er} Coautor: *Leonardo, Palemon-Arcos* / **ORC ID:** 0000-0001-9743-0434, **CVU CONACYT ID:** 49334

DOI: 10.35429/H.2021.12.1.78.96

M, Hernández, S, Walter, P, Carachure y P. Leonardo

* mahernandez@pampano.unacar.mx

S. Figueroa, B. Pérez, J. Flores, L. Santis. (AA. VV.) Ingeniería y Ciencias Aplicadas. Handbooks-©ECORFAN-México, Campeche, 2021.

Resumen

En el presente trabajo se presenta la construcción y los resultados de un sistema de adquisición de datos de temperatura del suelo a diferentes profundidades. Se han hecho investigaciones sobre el suelo para conocer sus características térmicas en diferentes ciudades de México, sin embargo, no se han hecho estas investigaciones en la zona de Ciudad del Carmen Campeche. Se utilizaron 7 sondas de temperatura Dallas ds18b20. Para la transmisión y recepción inalámbrica se utilizó el transceptor NRF24L01. El sistema de lectura de sensores-transmisión y el sistema de recepción-adquisición de datos fue implementado con el microcontrolador Atmega328p en una tarjeta de desarrollo de prototipos Arduino uno. El sistema de lectura y transmisión de datos fue del tipo autónomo alimentado por un panel solar de 12 voltios y 450 mah de tipo mono cristalino. Se utilizó una batería de plomo-ácido de 12 voltios. La adquisición de datos del receptor a una computadora personal fue a través del puerto USB, utilizando el software Processing, el cual almacena los datos cada hora en una hoja de cálculo. Los datos fueron procesados para su visualización y análisis con un script de matlab. Se registraron datos de temperaturas de 0 a 23 horas desde nivel del suelo hasta 2 metros de profundidad, los sensores se distribuyeron a 50 cm de distancia entre cada uno. Las mediciones se realizaron de agosto de 2020 a julio de 2021. Se encontró una diferencia máxima de 6 grados Celsius entre el nivel del suelo y la profundidad de 2 metros

Sensores de temperatura, Microcontroladores, Temperatura del suelo

Abstract

The present work presents the construction and results of a soil temperature data acquisition system at different depths. Investigations have been made to know the thermal characteristics of the soil in different cities of Mexico, however, these investigations have not been done in Ciudad del Carmen, in the Campeche area. Seven Dallas ds18b20 temperature probes were used. The NRF24L01 transceiver was used for wireless transmission and reception. The sensor reading-transmitting system and the receiving-data acquisition system were implemented with the Atmega328p microcontroller on an Arduino uno prototype development board. The data reading and transmission system was autonomous powered by a 12 volt 450 mah mono crystalline type solar panel. A 12-volt lead-acid battery was used. The acquisition of data from the receiver to a personal computer was through the USB port, using the Processing software, which stores the data every hour in a spreadsheet. The data was processed for visualization and analysis with a matlab script. Temperature data from 0 to 23 hours were recorded from ground level to 2 meters deep, the sensors were distributed 50 cm apart from each other. Measurements were made from August 2020 to July 2021. A maximum difference of 10 degrees Celsius was found between ground level and depth of 2 meters.

Temperature Sensors, Micorcontrollers, Soil Temperature

8.1 Introducción

La temperatura de suelo constituye en uno de los parámetros más relevantes en la estimación de diversas variables de interés ambiental, geológica o de eficiencia energética. Dentro del campo de la eficiencia energética se han desarrollado sistemas de acondicionamiento de aire como las bombas de calor de fuente terrestre. Las bombas de calor de fuente terrestre (GSHP, por sus siglas en inglés) son sistemas renovables y amigables con el medio ambiente que utilizan la energía subterránea superficial para lograr la calefacción y refrigeración de espacios con el fin de brindar comodidad térmica. El sistema funciona haciendo circular una solución a base de agua en circuitos de energía hechos de tuberías de polietileno de alta densidad (HDPE), para transferir energía térmica entre las superestructuras (edificios) y el suelo [Rao, 2019]. El diseño de un nuevo sistema de bomba de calor de fuente de tierra de circuito cerrado (GSHP) requiere que se tengan en cuenta tres aspectos relevantes, que incluyen: (1) clima y ubicación del edificio, (2) características del edificio, como el uso del edificio, tamaño y nivel de aislamiento, y (3) condiciones del suelo, incluido el perfil de temperatura del suelo.

El uso de sensores de circuitos integrados sensores de temperatura es de uso común actualmente, se han utilizado principalmente para aplicaciones de agricultura y medición ambiental [Cuihong, 2011].

En este proyecto se toman las bases de estudios anteriores de los investigadores para buscar el gradiente de temperatura adecuada a mayor profundidad del suelo que pudiera ser 18 a 20°C, tomando en cuenta sus recomendaciones.

En el presente trabajo se diseñó un sistema de sensores de temperatura del suelo para estudiar las condiciones del suelo. Los avances en telecomunicaciones están permitiendo una transmisión más rápida y fácil de datos detectados en todo el mundo. Los sensores de suelo se han vuelto más pequeños, más resistentes, más rápidos, más precisos, más eficientes en energía, inalámbricos y más inteligentes [Viscarra, 2010]. Pueden ser dispositivos de mano individuales o montados en vehículos para dispositivos móviles [Adamchuck, 2004], también pueden ser de operación autónoma usando energía solar [Manderson, 2013].

El sistema de medición presentado en el actual trabajo será de tipo autónomo y alimentado por energía solar, los datos serán transmitidos inalámbricamente a una estación conectada a un PC, los datos serán registrados en una hoja de cálculo, almacenando magnitudes y la fecha y hora de adquisición

En la sección titulada: Materiales y Métodos se describe la metodología usada para construir las partes del sistema de adquisición de temperatura y los programas de computadora usados para recibir la información y almacenarla.

En la sección titulada: Procesamiento de Datos: se describe la manera en la que los datos de los sensores fueron agrupados y procesados para representarse visualmente.

En la sección titulada: Resultados se presentan las graficas de temperaturas en los siete sensores a diferentes profundidades agrupadas por mes desde agosto de 2020 hasta julio de 2021.

En la sección titulada Conclusiones: se plasman las conclusiones obtenidas de los resultados del presente trabajo

En la sección titulada Referencias: se describe las fuentes consultadas para documentar el presente trabajo.

8.2 Materiales y Métodos

El sistema está formado por:

- Arreglo de sensores de temperatura.
- Tarjeta de lectura de sensores y envío de datos
- Tarjeta de recepción de datos y adquisición.
- Componente fotovoltaico para alimentar la Tarjeta de lectura de sensores y envío de datos
- Computadora personal para almacenar datos en una hoja de cálculo electrónica.

Arreglo de los sensores de temperatura.

Se construyó un arreglo de 7 sensores de temperatura Dallas DS18B20 conectados a 50 cm de distancia entre sí. El DS18B20 es un sensor de temperatura en el cual se lleva la conversión analógica a digital dentro del encapsulado, facilitando el resultado de dicha conversión a través de una interfaz digital llamada: un hilo (1-wire en inglés). El DS18B20 tiene en un rango de -55 °C a 125 °C. El error del sensor es diferente según la temperatura a la que está operando. Para temperaturas entre -10°C y 85°C existe un error de ± 0.5 °C. Para el resto de las temperaturas entre -55 °C y 125 °C el error es de ± 2 °C. El sensor de temperatura DS18B20 se puede encontrar en diversas formas, entre las cuales se destacan 2 que son bastante comunes:

- El encapsulado TO-92 (usado comúnmente en transistores).
- El sensor tipo sumergible, que es fabricado por terceros utilizando sensores en encapsulado TO-92 colocados dentro de una cubierta impermeable de acero inoxidable.

En el presente trabajo se utilizó el tipo sumergible que se muestra en la figura 8.1.

Figura 8.1 Sensor de temperatura Dallas DS18B20



Fuente: Elaboración propia

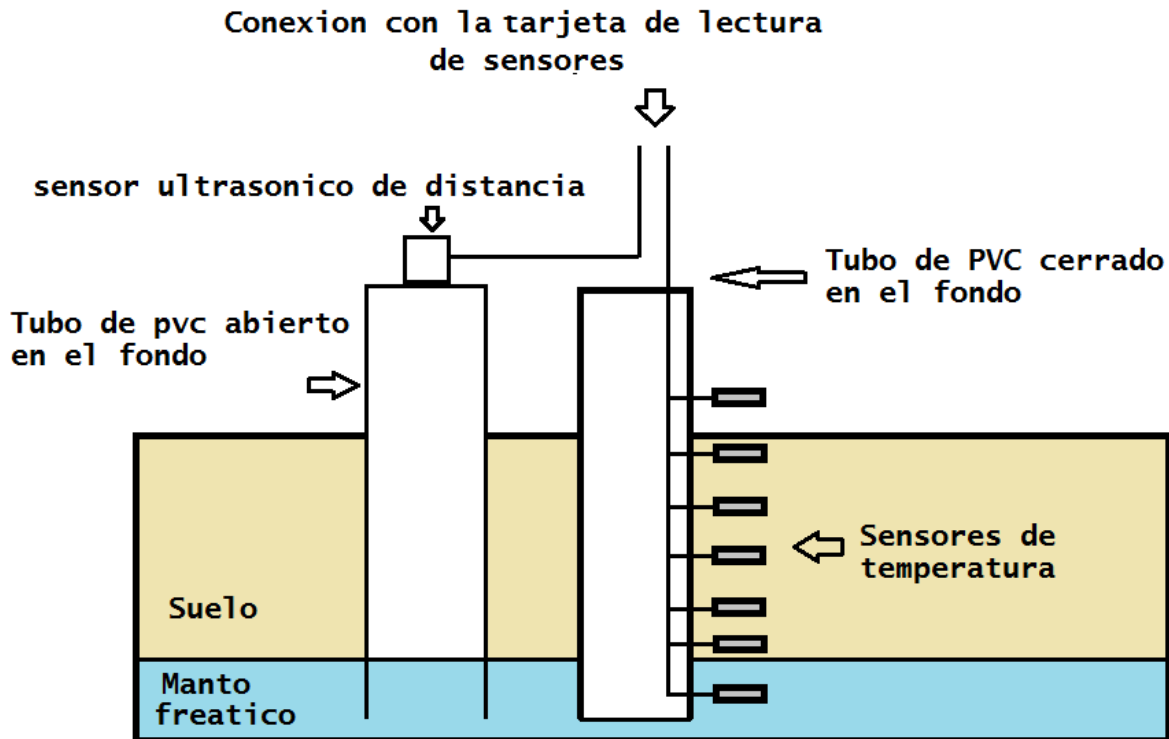
Se utilizaron 4 secciones de tubo de policloruro de vinilo (Polyvinyl chloride, pvc por sus siglas en ingles) de 2 pulgadas para interconectar los sensores de temperatura, el tubo se enterró a dos metros de profundidad en el suelo, dejando 1 metro sobresaliendo, como se puede ver en la figura 8.2 y 8.3.

Figura 8.2 Arreglo de sensores



Fuente: Elaboración propia

Figura 8.3 Diagrama a bloques del arreglo de sensores



Fuente: Elaboración propia

En la figura 8.2 se puede observar el arreglo físico de los sensores. Por otro lado, en la figura 3 se puede observar el diagrama de bloques del arreglo de sensores.

Tarjeta de lectura de sensores y envío de datos

Se construyó una tarjeta de circuito impreso para interconectar los sensores con la tarjeta de desarrollo de prototipos Arduino y con el tranceptor NRF24I01 (ver figura 4). Los datos de los sensores de temperatura son interrogados por la tarjeta Arduino a través del protocolo 1-wire, el cual le asigna a cada uno de los sensores una dirección hexadecimal única, la información viaja multiplexada a través de un bus de un solo hilo y se conecta al pin 7 de Arduino. La información del sensor de distancia ultrasónico es leída por el Arduino y convertida a centímetros, la cual es la distancia entre el nivel de agua freático y la superficie del suelo a estudiar. La información de todos los sensores se envía a través del tranceptor inalámbrico NRF24L01

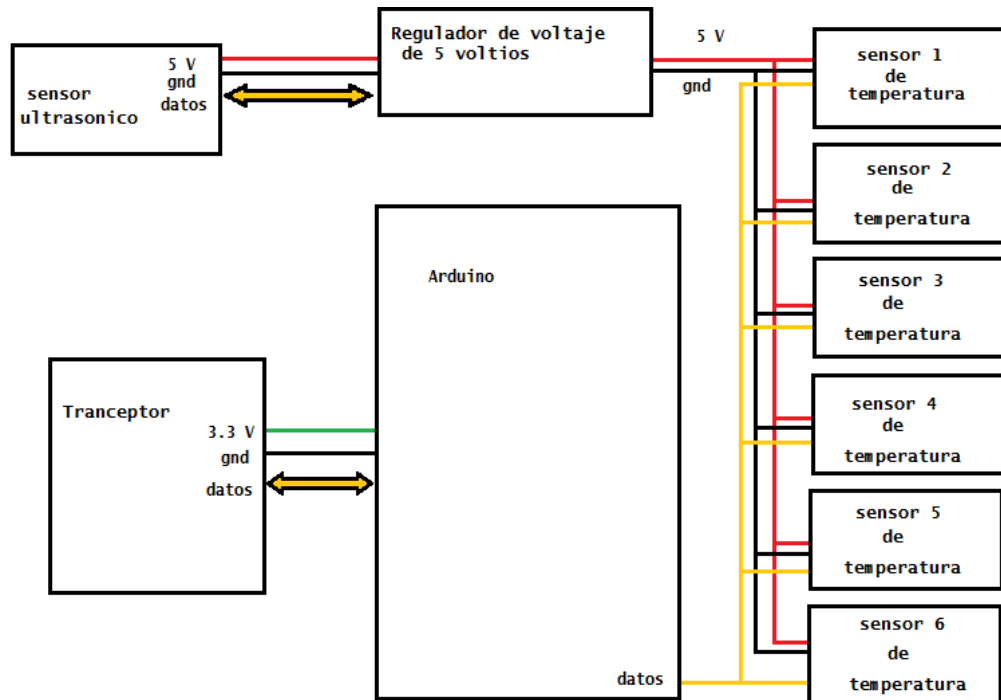
Figura 8.4 Tarjeta de lectura de sensores y envío de datos



Fuente: Elaboración propia

El transceptor NRF24L01 utiliza la banda de 2,4 GHz y puede operar con velocidades de transmisión de 250 kbps hasta 2 Mbps. Si se usa en espacios abiertos y, con menor velocidad de transmisión, su alcance puede llegar hasta los 100 metros. Para mayores distancias, hasta 1,000 metros, existen módulos provistos con una antena externa en lugar de una antena trazada sobre la misma placa, como se observa en la figura 4. El consumo de este módulo es de alrededor de 12 mA durante la transmisión, un valor menor al de un LED encendido. El voltaje de operación del módulo es de 1,9 a 3,6V, los demás pines toleran la lógica de 5V, por lo que podemos conectarlo sin problemas a un Arduino sin necesidad de un convertidor de niveles lógicos. El diagrama a bloques de la tarjeta de lectura de sensores y envío de datos se puede observar en la figura 8.5.

Figura 8.5 Diagrama a bloques de la tarjeta de lectura de sensores y envío de datos

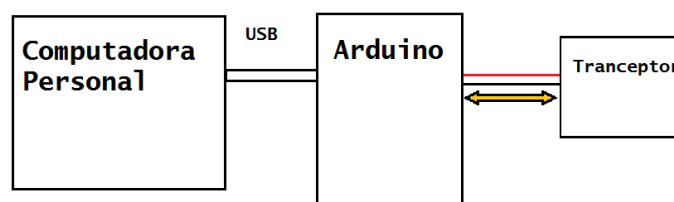


Fuente: Elaboración propia

Tarjeta de recepción de datos y adquisición

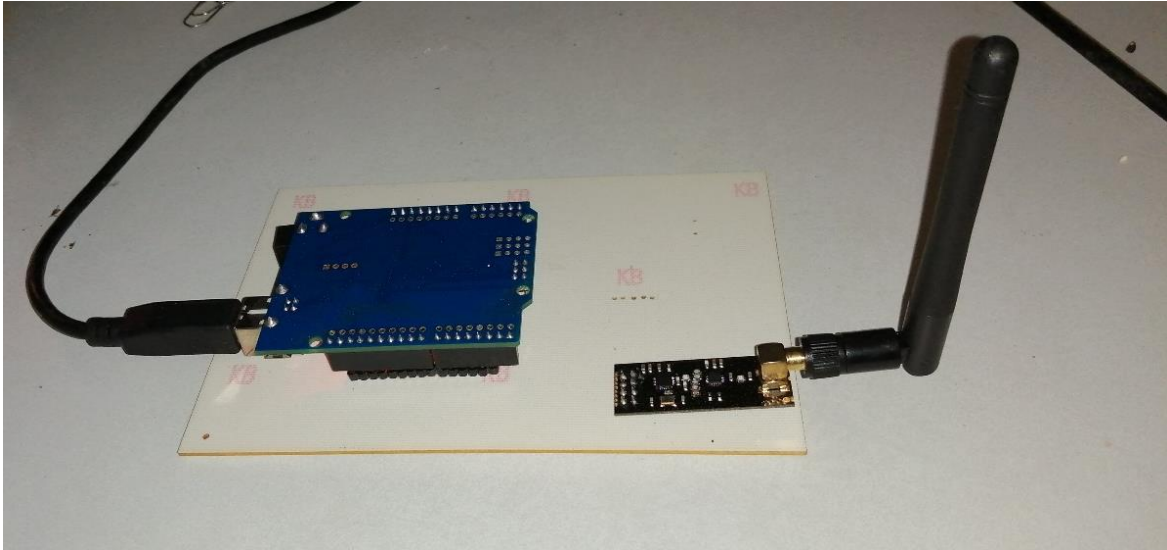
Se construyó una tarjeta de circuito impreso para interconectar la tarjeta Arduino con el transceptor inalámbrico y la computadora personal como se puede ver en las figuras 8.6 y 8.7. El transceptor inalámbrico NRF24L01 recibe los datos de la tarjeta de lectura de sensores, posteriormente los datos son enviados a la tarjeta Arduino y esta los envía por el protocolo serial USB hacia la computadora personal. La conexión USB además de servir de comunicación de datos, también se utiliza para alimentar la tarjeta de recepción de datos y adquisición con 5 voltios. El tamaño de la tarjeta es de 10 cm de largo por 15 cm de ancho.

Figura 8.6 Diagrama de la tarjeta de adquisición de datos



Fuente: Elaboración propia

Figura 8.7 Tarjeta de adquisición de datos



Fuente: Elaboración propia

Alimentación de la tarjeta de lectura de sensores y envío de datos.

La Tarjeta de lectura de sensores y envío de datos se alimenta con los siguientes componentes.

- Panel solar fotovoltaico.
- Controlador de carga solar.
- Batería de plomo ácido de 12 voltios.

Los paneles fotovoltaicos o placas fotovoltaicas están formados por numerosas celdas que convierten la luz en electricidad. Las celdas a veces son llamadas células fotovoltaicas. Estas celdas dependen del efecto fotovoltaico por el cual la energía lumínica produce cargas positiva y negativa en dos semiconductores próximos de diferente tipo, produciendo así un campo eléctrico capaz de generar una corriente.

Los materiales para celdas solares suelen ser silicio cristalino o arseniuro de galio. Los cristales de arseniuro de galio se fabrican especialmente para uso fotovoltaico, mientras que los cristales de silicio están disponibles en lingotes normalizados, más baratos, producidos principalmente para el consumo de la industria microelectrónica. El silicio policristalino tiene una menor eficacia de conversión, pero también menor coste. Las células de silicio monocristalino están constituidas por un único cristal de silicio. Este tipo de células presenta un color azul oscuro uniforme, como se puede ver en la figura 8.8.

Figura 8.8 Panel solar fotovoltaico



Fuente: Elaboración propia

Un regulador de carga solar se coloca entre el panel fotovoltaico y el banco de baterías y básicamente se encarga de controlar el flujo de energía que circula entre ambos equipos (ver la figura 8.9). El control del flujo de energía se realiza mediante el control de los parámetros de Intensidad (I) y Voltaje (V) al que se inyecta en la batería. Este flujo de energía depende del estado de carga de las baterías y de la energía generada por el campo fotovoltaico. El regulador de carga solar controla constantemente el estado de carga de las baterías para hacer el llenado óptimo y así alargar su vida útil.

El acumulador de plomo, también denominada de ácido-plomo es un tipo de batería muy común en vehículos convencionales, para arranque, aunque también se utilizan como fuente de energía de tracción de vehículos eléctricos. Suele proporcionar una tensión de 6 V, 12 V u otro múltiplo de 2, ya que la tensión que suministra cada celda es de 2 V. Pueden suministrar unas intensidades de corriente relativamente grandes, lo que las hacen ideales para los motores de arranque. Aunque su utilización y forma más conocida es la batería de automóvil, este acumulador tiene muchas aplicaciones. La batería usada en el presente trabajo es de 12 voltios y 4 ah.

El componente interconectado para la alimentación proporciona voltaje continuo de 12 voltios procedente de una batería de electrolito de plomo-acido de 12 voltios 4 ah, esta batería es cargada por un panel solar de 12 voltios 400 mah, la carga está controlada por un circuito de modulación por ancho de pulso (Pulse Width Modulation, PWM, por sus siglas en inglés) comercial de carga de baterías con paneles solares. Un bosquejo del sistema de alimentación es mostrado en la figura 8.9.

Figura 8.9 Sistema de carga solar



Fuente: Elaboración propia

Almacenamiento de los datos en una hoja de cálculo electrónica

Se utilizó una computadora personal con sistema operativo Windows 10 de 32 bit. El procesador es el Intel Core I3 de 3.3 GHz. Se utilizó el IDE Processing [Processing, 2020] (ver la figura 12) para ejecutar un programa que lee la información del puerto serial USB para posteriormente guardarlo en una hoja de cálculo de Excel de Microsoft office 2007 [Microsoft, 2020]. Se utilizó Processing para el algoritmo de recepción de datos.

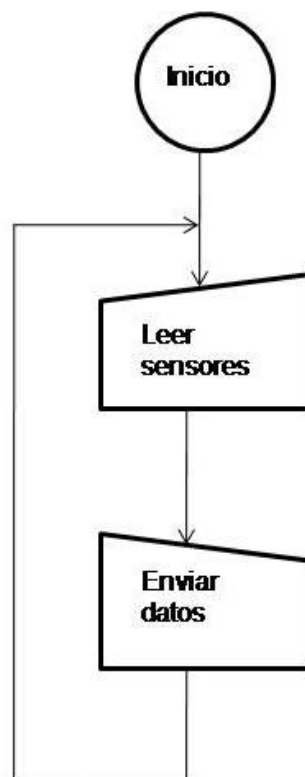
Se implementaron tres algoritmos para el sistema:

- Algoritmo de lectura de sensores y envío de datos.
- Algoritmo de recepción de datos y envío a la computadora personal.
- Algoritmo de recepción de datos y guardado de información en hoja de cálculo.

El algoritmo de lectura de sensores y envío de datos interroga a los sensores y la información es enviada inalámbricamente a la siguiente etapa, se repite indefinidamente, como se observa en el diagrama de flujo de la figura 8.11.

El Algoritmo de recepción de datos y envío a la computadora personal, recibe datos del transceptor inalámbrico, posteriormente los envía por el puerto USB hacia la computadora personal, se repite indefinidamente, como se puede observar en el diagrama de flujo de la figura 8.14.

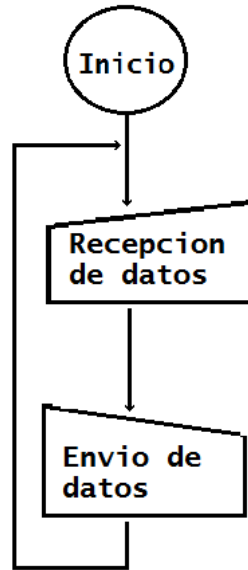
Figura 8.10 Algoritmo de recepción de datos y envío a la computadora personal



Fuente: Elaboración propia

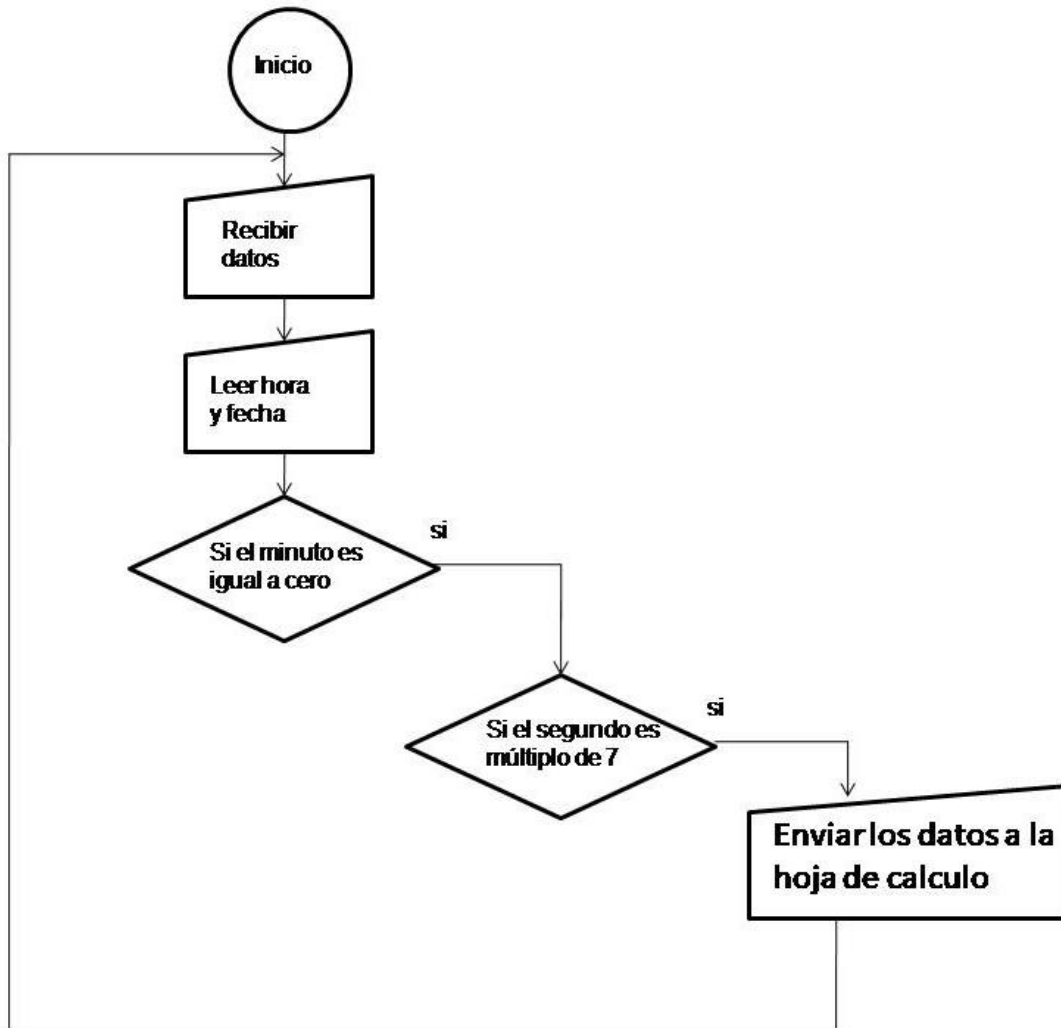
El diagrama de flujo de la figura 8.15, muestra el comportamiento del algoritmo de recepción de datos, en el cual se guarda la información en una hoja de cálculo y los datos son recibidos a través del puerto USB. Después, pregunta la hora y fecha de la computadora personal. Posteriormente, compara si es la hora en punto, de ser así pregunta si el segundo es múltiplo de 7, de esa manera toma cada hora 7 mediciones de los 7 sensores de temperatura. Los datos obtenidos por el sensor de distancia son enviados hacia la hoja de cálculo con el dato de fecha y hora. La razón por la cual se tomaron 7 datos cada hora fue para hacer un promedio para minimizar errores de medición.

Figura 8.11 El Algoritmo de recepción de datos



Fuente: Elaboración propia

Figura 8.12 El Algoritmo de recepción de datos



Fuente: Elaboración propia

Conclusiones de la sección 2

En esta sección se presento los materiales y métodos utilizados para construir los sistemas de adquisición de temperatura a diferentes profundidades, se utilizo hardware y software de código abierto, por lo cual la implementación fue rápida y sencilla. El costo fue menor a los equipos con hardware y software propietario. Aunque el sistema de sensores funciona adecuadamente todo el año debido a la energía solar y la batería de respaldo, el sistema que lo recibe y almacena si depende de la energía del sistema conectado de electricidad residencial, por lo cual lo vuelve vulnerable a fallas de energía.

8.3 Procesamiento de Datos

En la presente sección se presenta la metodología en la que la información de los siete sensores de temperatura fue agrupada y presentada de manera grafica. Cada sensor registraba la temperatura cada hora del día, las 24 horas del mes, se obtuvo la media aritmética de las temperaturas de cada sensor a una hora específica, por lo tanto, se obtuvo la temperatura promedio de cada hora desde las 00:00 horas hasta las 23:00. Por la cantidad de datos obtenidos fue necesario automatizar el procesamiento de la información utilizando un script de Matlab que extrajera los datos de una hoja de cálculo y los convierte en una matriz, posteriormente se ejecuta una subrutina que extrae los datos de temperaturas de una sola hora en específico y se procede a sacar su media, el script realiza la tarea para las 24 horas de un sensor y para cada uno de los señores, por tanto se obtiene una gráfica con las temperaturas media por hora de cada uno de los meses que duro el estudio.

Conclusiones de la sección 3

En esta sección se presentó una descripción de cómo lo resultados obtenidos fueron procesados para presentarse de manera grafica. La información faltante debido a fallas de energía se obtuvo usando un algoritmo de interpolación polinomial de grado 5. El algoritmo fue desarrollado en un script de matlab para obtener una estimación de los datos faltantes.

8.4 Resultados

En la presente sección se presentan los resultados del desempeño del sistema, así como las mediciones del mismo y el procesamiento de datos descrito en la sección anterior. En cuanto al desempeño del sistema de alimentación fotovoltaico se midió un voltaje de 13.5 voltios durante el día que fue suministrado por el controlador de carga y de 12.5 voltios durante la noche suministrado por la batería.

El alcance de transmisión recepción fue de 30 metros con obstáculos como paredes. Posteriormente el equipo se instaló en su posición definitiva y se realizaron las mediciones de temperatura que se muestran en la figura 8.13. La interface muestra en tiempo real la temperatura de cada sensor, la hora y la fecha en que se realizo cada medición. Con estos datos se pudo comprobar que el sistema funcionaba adecuadamente y podía monitorear la temperatura autónomamente durante los 12 meses del estudio.

Figura 8.13 Interface de Processing con los datos recibidos

```

adquisicion | Processing 3.5.4
Archivo Editar Sketch Depuración Elementos Ayuda

adquisicion
1
2 import processing.serial.*;
3 int c = 0;
4 // serial port
5 Serial mySerial;
6 // single line containing acc. values as a CSV row string
7 String values;
8 // the output
9 PrintWriter output;
10
11 void setup() {
12   size(640,160); // creamos la ventana de 650x200
13   textSize(30); // definimos el tamaño de la letra
14   output = createWriter("Datos/as.csv");
15   try {
16     mySerial = new Serial(this, Serial.list()[1], 9600);
17     mySerial.bufferOut(1024);
18   } catch (Exception e) {
19     println("Error abriendo el puerto: revise el cable USB, o...");
20     e.printStackTrace();
21   }
22 }
23
24 void draw() {
25   background(0);
26   int y = year(); // Valores de 2015, 2014, etc
27   int mes = month(); // Valores de 1 a 12
28   int d = day(); // Valores de 1 a 31
29   int h = hour(); // Valores de 0 a 23

```

```

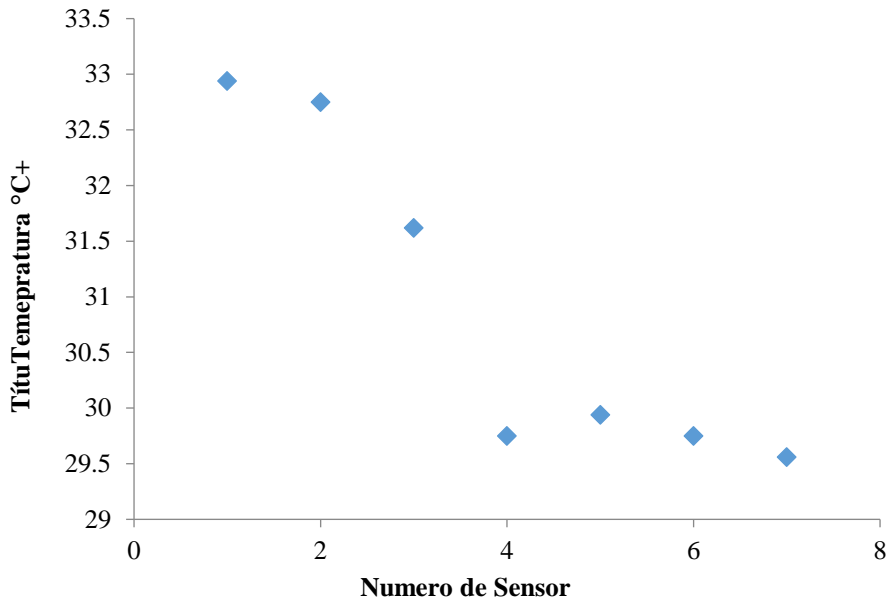
test
Temperatura 1: = 32.94 C°
Temperatura 2: = 32.75 C°
Temperatura 3: = 31.62 C°
Temperatura 4: = 29.75 C°
Temperatura 5: = 29.94 C°
Temperatura 6: = 29.75 C°
Temperatura 7: = 29.56 C°
El nivel es: 40 cm
La hora es: 17:25
La fecha es: 20/06/20

```

Fuente: Elaboración propia

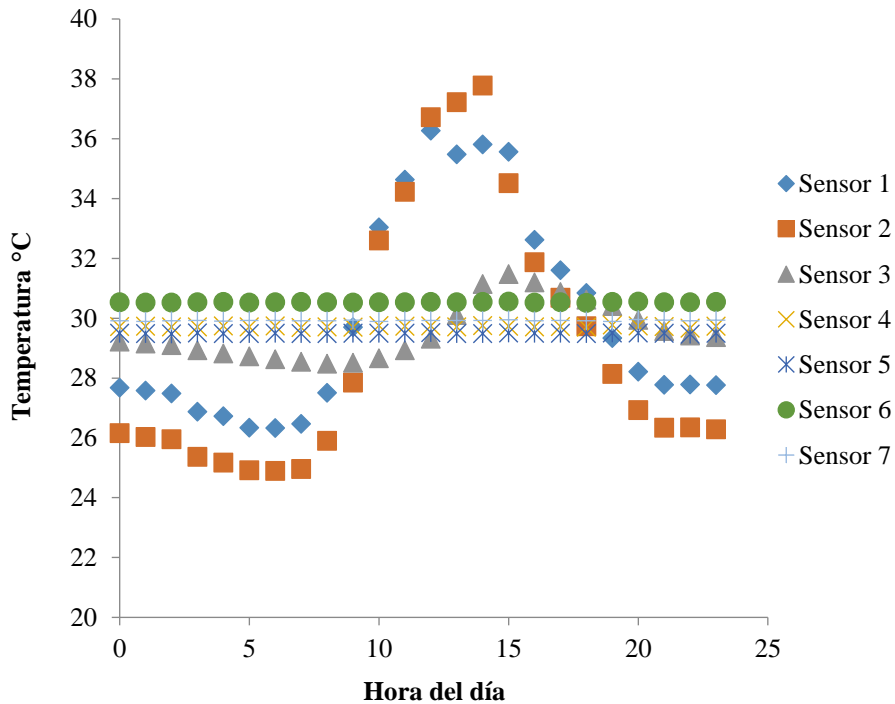
En el Gráfico 8.1 se puede observar las temperaturas medidas por los 7 sensores, los cuales están espaciados 50 cm de distancia entre sí. Se observa que la temperatura del sensor que se encuentra a 2 metros de profundidad (sensor 7) fue de 29.56 °C y la profundidad del sensor que se encuentra a 1 metro sobre el nivel del terreno (sensor 1) fue de 32.94 °C, la cual corresponde a la temperatura del ambiente.

Gráfico 8.1 Grafica de la temperatura de los sensores



Fuente: Elaboración propia

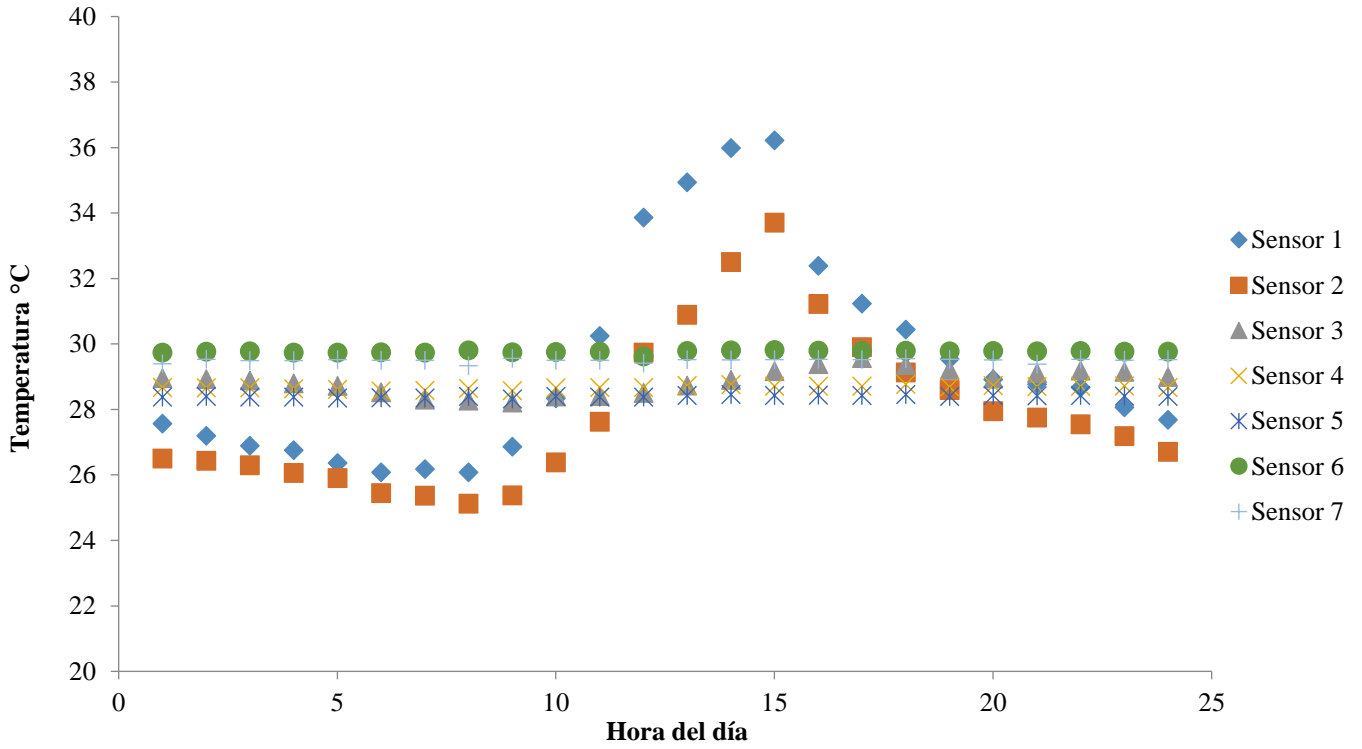
Gráfico 8.2 Grafica de la temperatura de los 7 sensores en el mes de agosto



Fuente: Elaboración propia

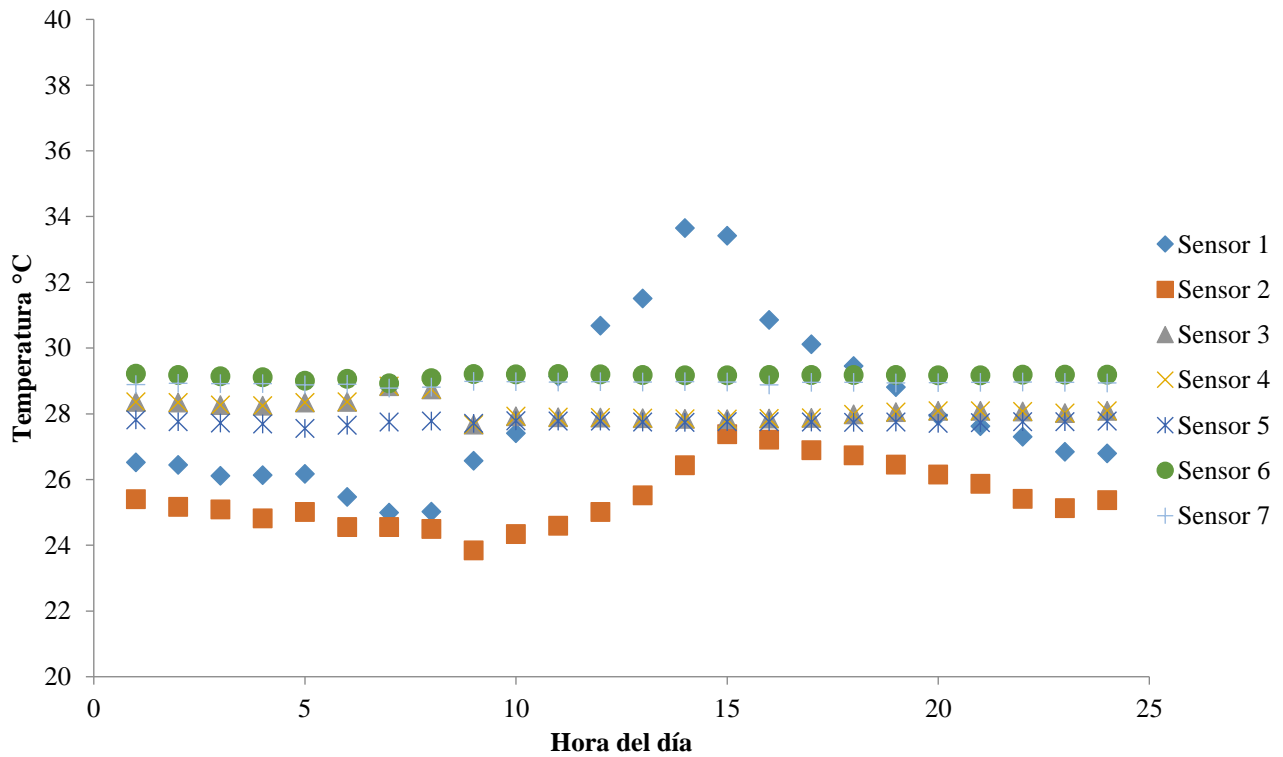
En los Gráficos 8.2 y hasta el Gráfico 8.3 se aprecian los gráficos de las temperaturas media de cada hora del día desde el mes de en el mes de agosto de 2020 hasta julio de 2021.

Gráfico 8.3 Grafica de la temperatura de los 7 sensores en el mes de septiembre



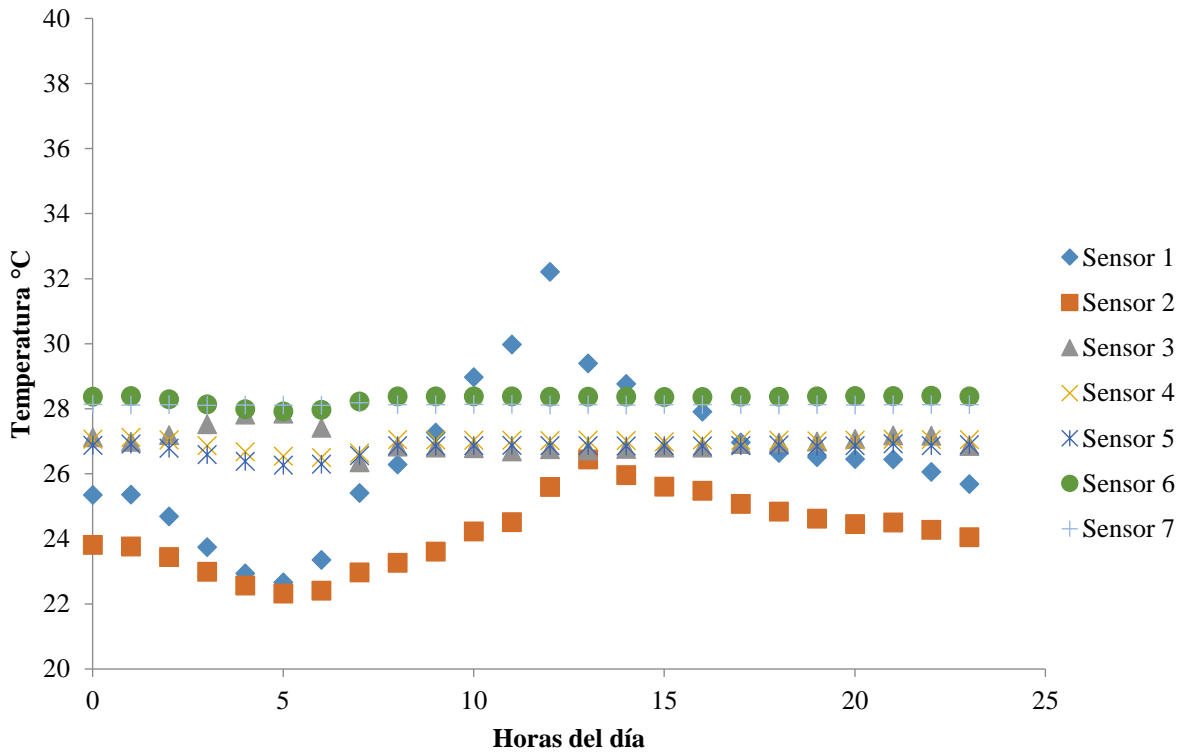
Fuente: Elaboración propia

Gráfico 8.4 Grafica de la temperatura de los 7 sensores en el mes de octubre



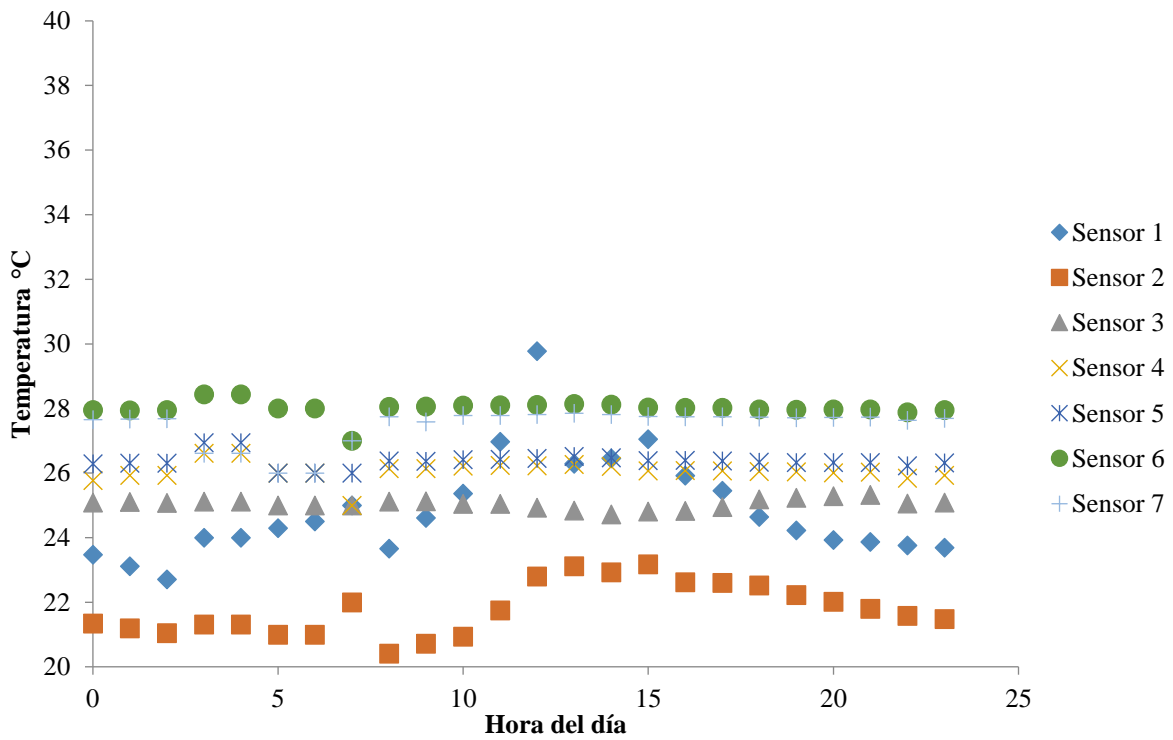
Fuente: Elaboración propia

Gráfico 8.5 Grafica de la temperatura de los 7 sensores en el mes de noviembre



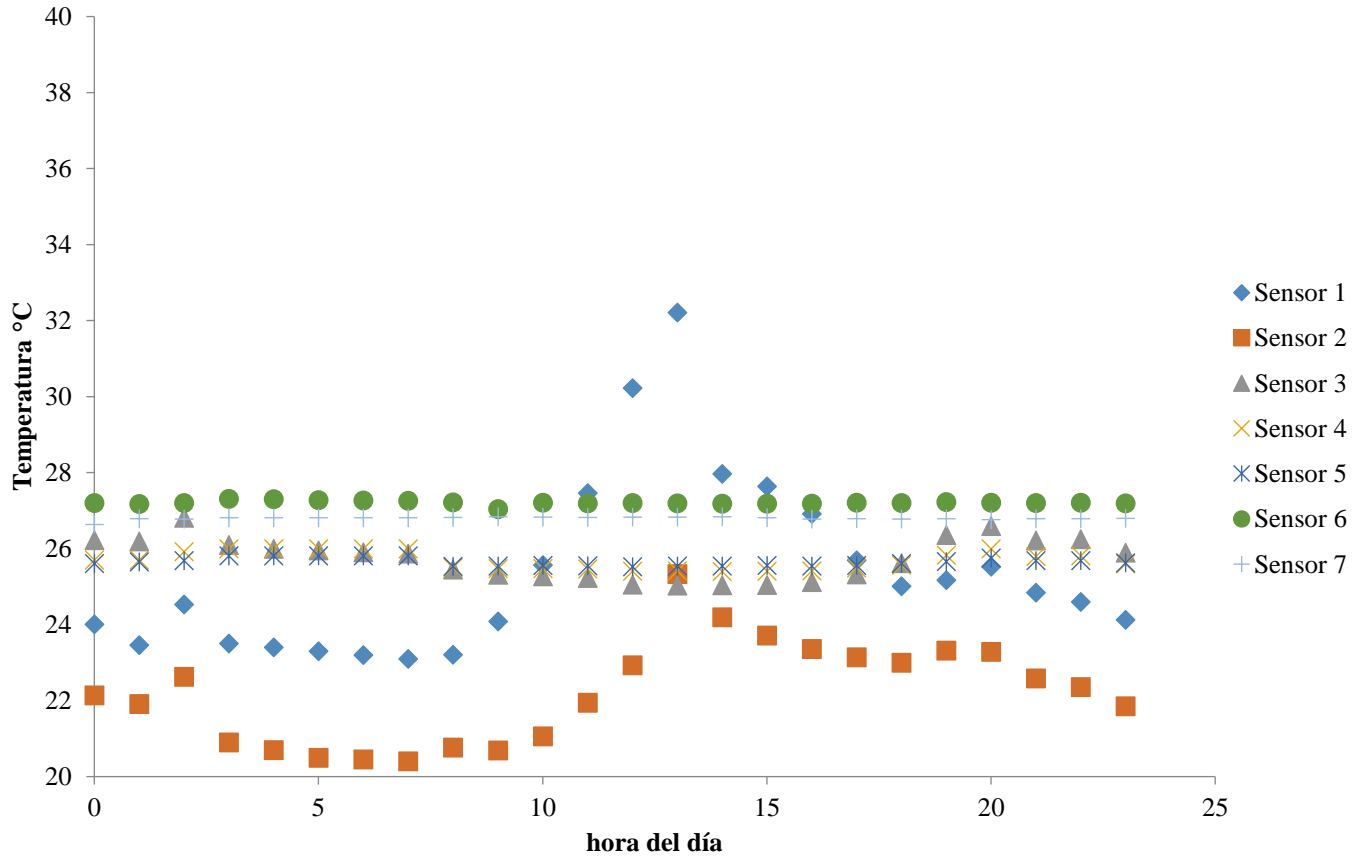
Fuente: Elaboración propia

Gráfico 8.6 Grafica de la temperatura de los 7 sensores en el mes de diciembre



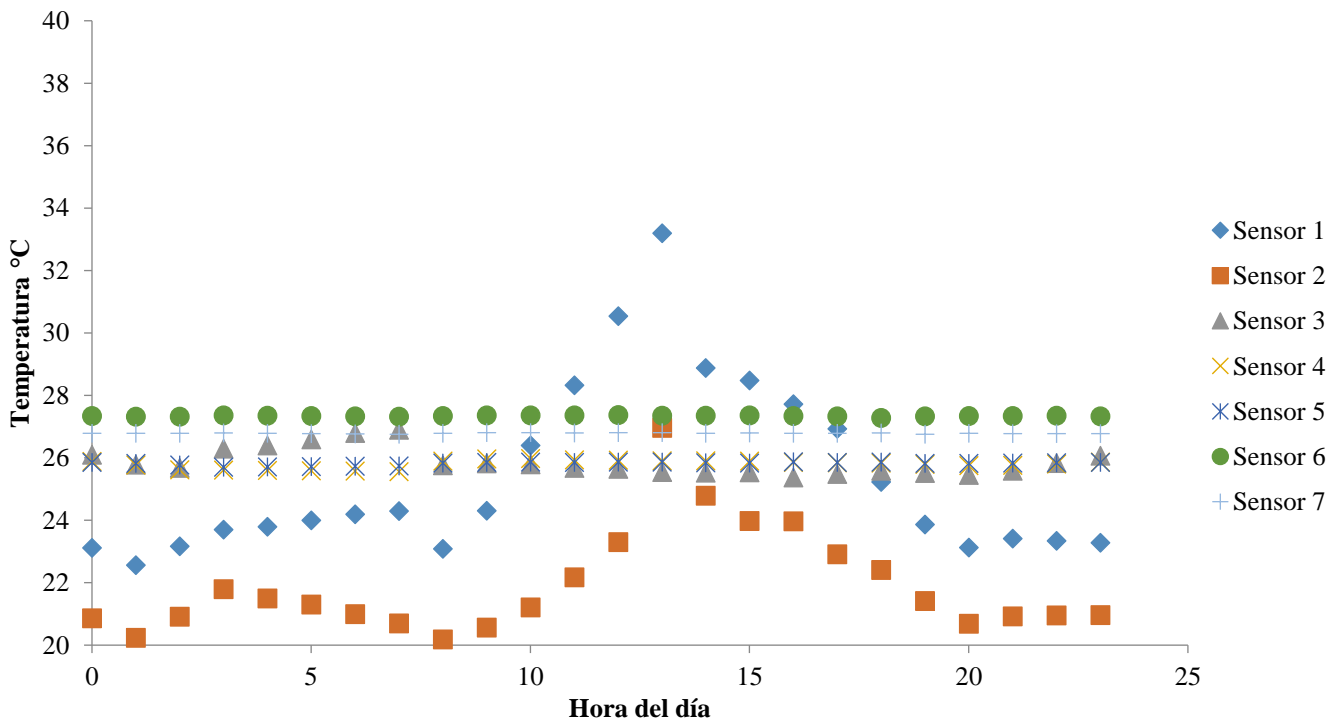
Fuente: Elaboración propia

Gráfico 8.7 Grafica de la temperatura de los 7 sensores en el mes de enero



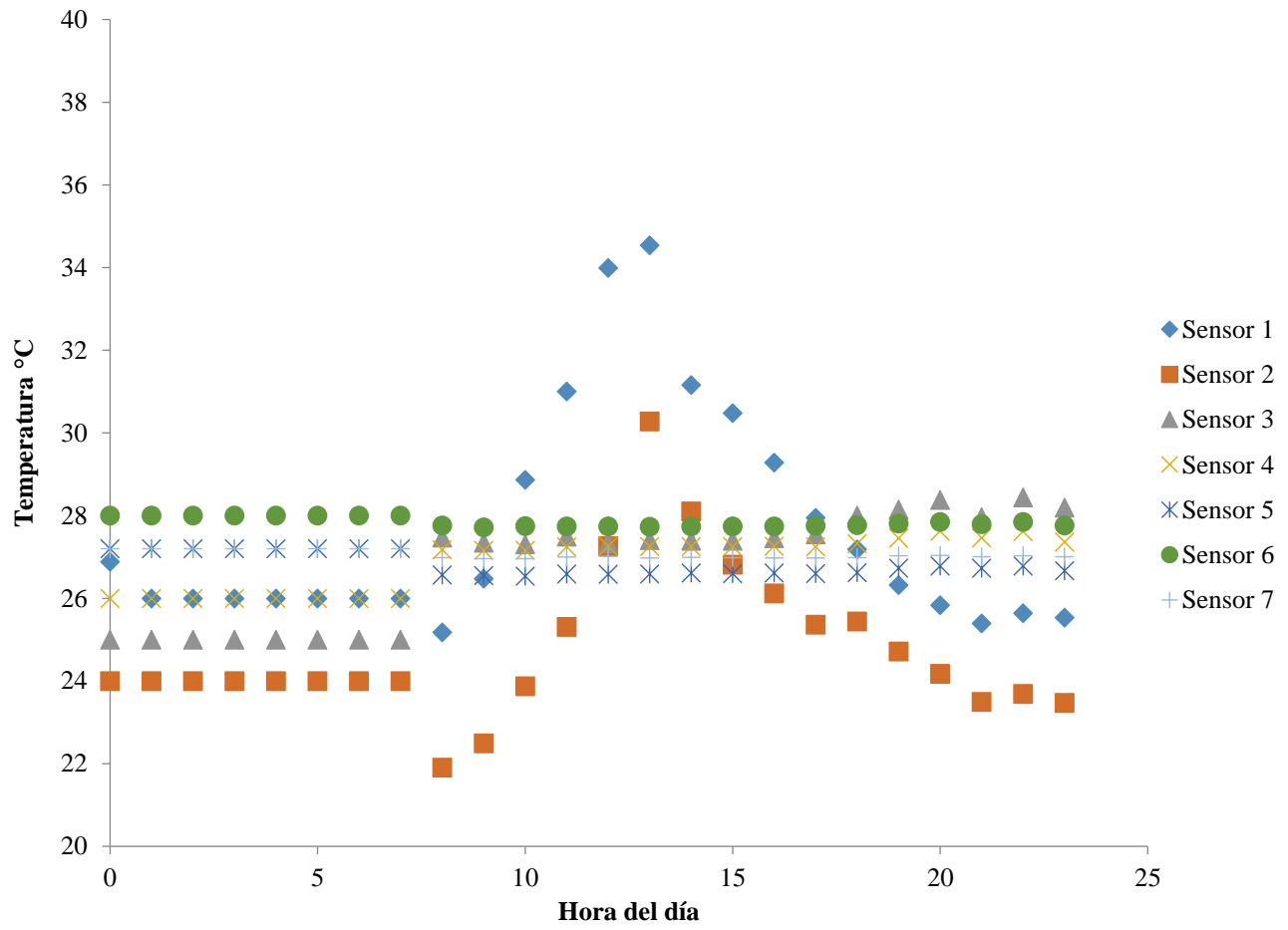
Fuente: Elaboración propia

Gráfico 8.8 Grafica de la temperatura de los 7 sensores en el mes de Febrero



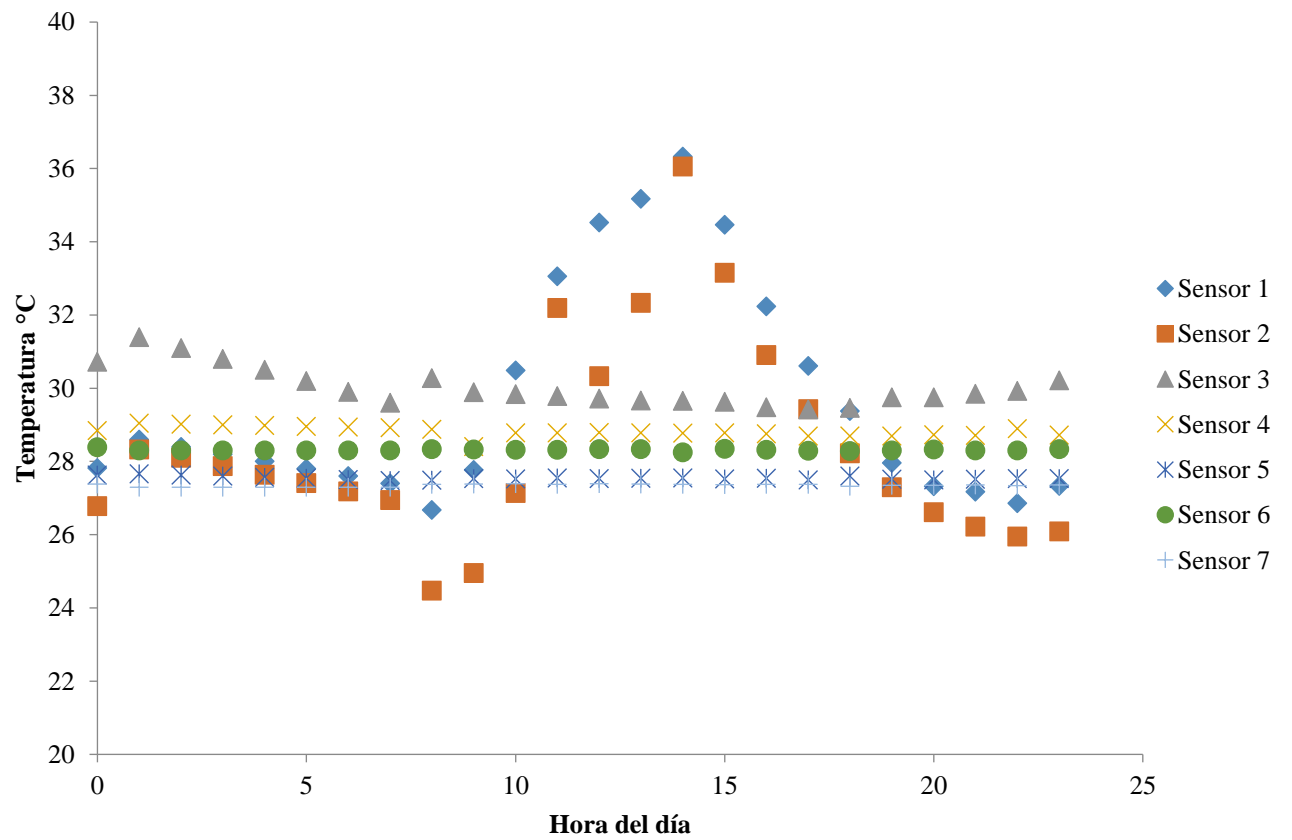
Fuente: Elaboración propia

Gráfico 8.9 Grafica de la temperatura de los 7 sensores en el mes de marzo



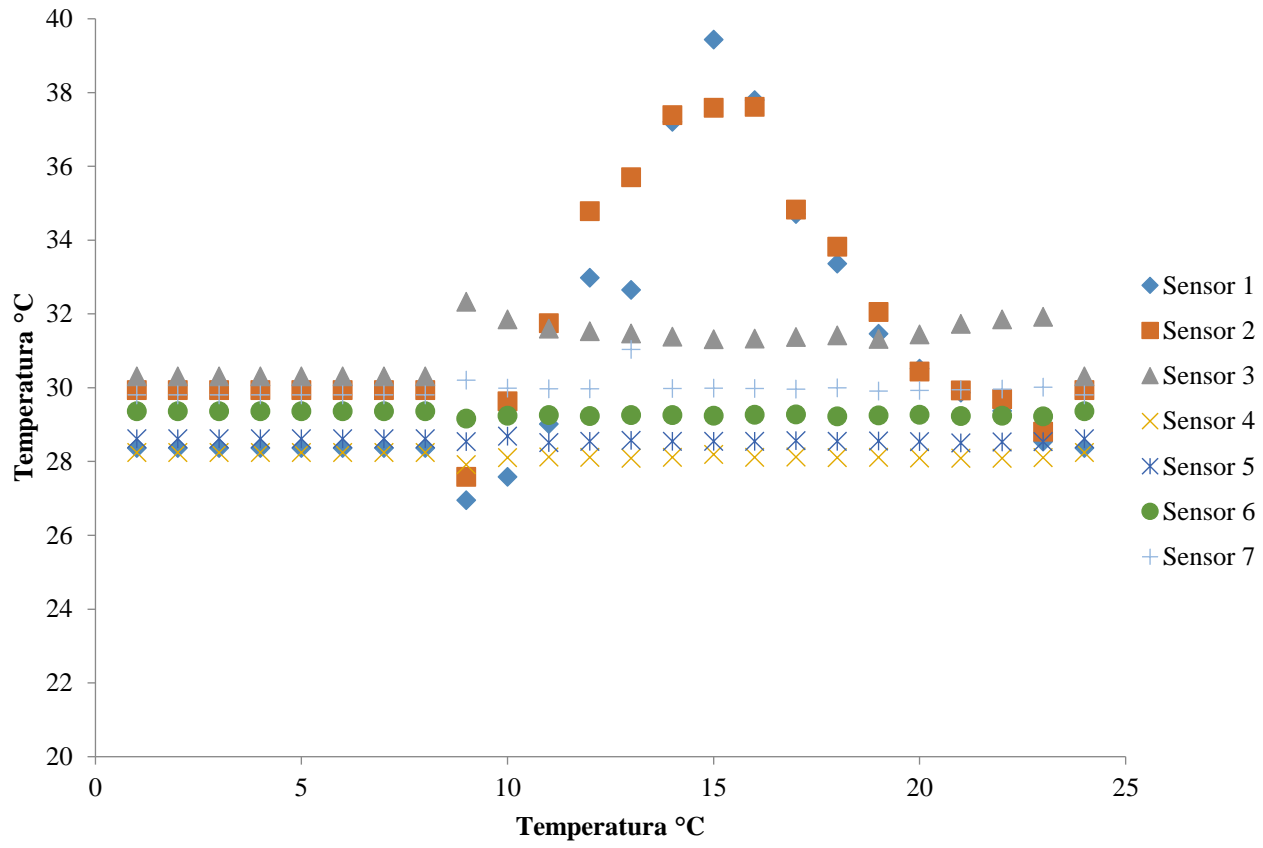
Fuente: Elaboración propia

Gráfico 8.10 Grafica de la temperatura de los 7 sensores en el mes de abril.



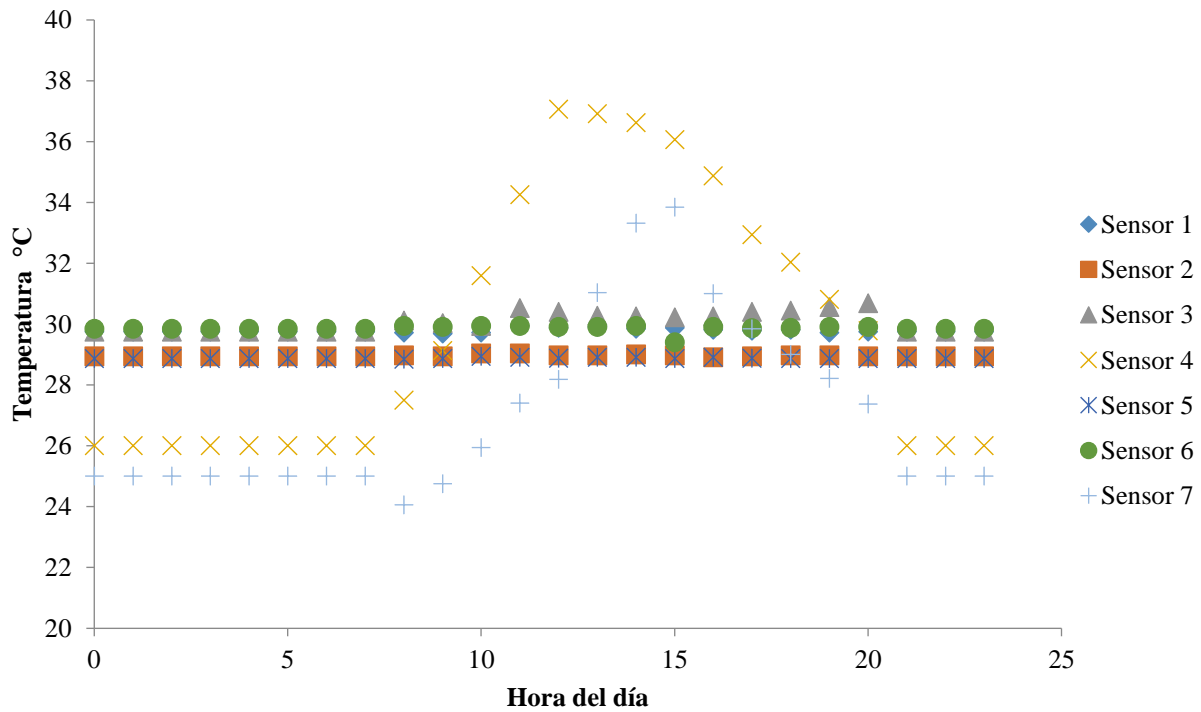
Fuente: Elaboración propia

Gráfico 8.11 Grafica de la temperatura de los 7 sensores en el mes de mayo

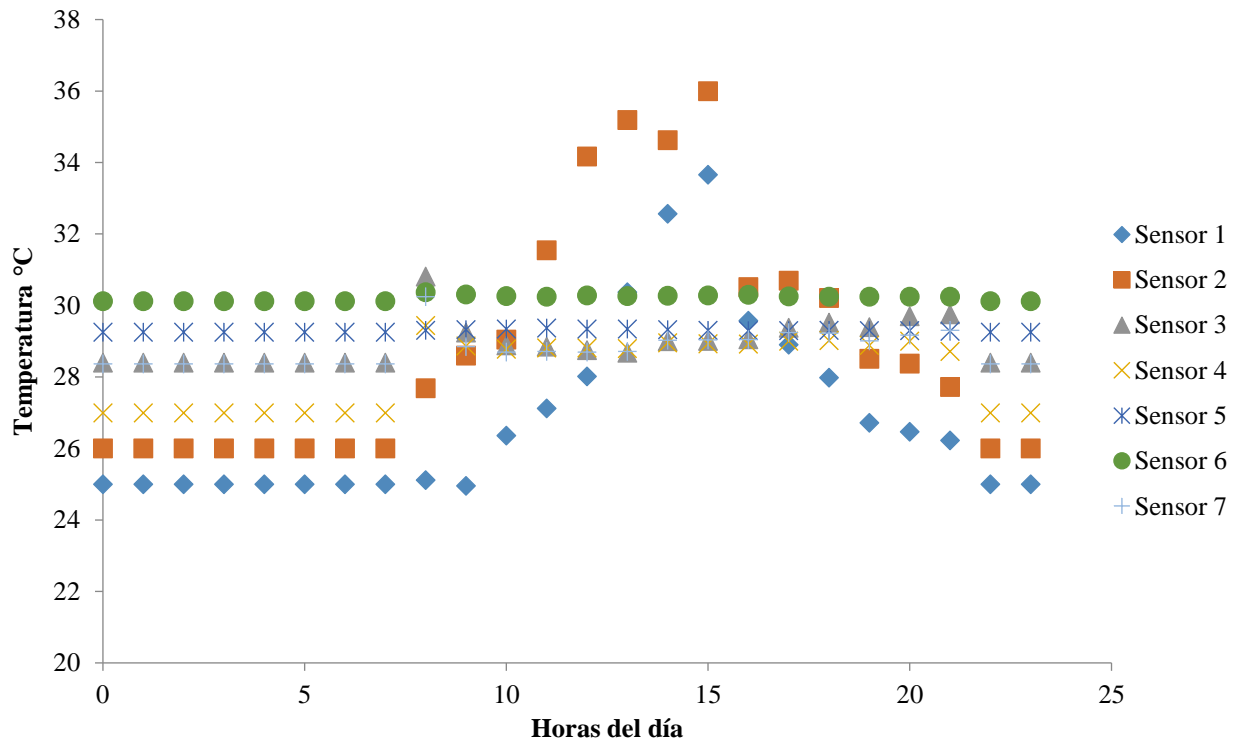


Fuente: Elaboración propia

Gráfico 8.12 Grafica de la temperatura de los 7 sensores en el mes de junio



Fuente: Elaboración propia

Gráfico 8.13 Grafica de la temperatura de los 7 sensores en el mes de julio

Fuente: Elaboración propia

Conclusiones de la sección 4

Los datos muestran una temperatura constante en la máxima profundidad de 2 metros de 30 ° C, la temperatura en la superficie y a 50 cm de profundidad varía dependiendo de la hora del día, sin embargo mantiene la misma tendencia a lo largo del año, alcanzando temperaturas máximas en el mes de Mayo, las temperaturas mínimas se obtuvieron en diciembre con 30°C para la superficie. La máxima diferencia de temperaturas encontrada fue de 10 grados.

8.5 Conclusiones

El sistema de lectura de sensores de temperatura y de nivel freático funcionó como estaba planeado. El consumo del sistema es más elevado de lo necesario, debido a que se usó una placa de desarrollo Arduino UNO, en el mercado existen alternativas con la misma facilidad de implementación, pero con consumos eléctricos más bajos, lo cual será tomado en cuenta para posteriores trabajos. El sistema de recepción y adquisición funcionó bien, la interfaz en Processing fue fácil y rápida de implementar.

Para la aplicación en bombas de calor de fuente terrestre se determinó que en algunos meses del año la diferencia de temperatura entre la superficie y la profundidad donde se colocaría un intercambiador de calor es de 10 grados y la mínima es de 2 grados, también pero solo durante el período de máxima radiación solar entre las 10 de la mañana y las 5 de la tarde, por lo tanto un trabajo a futuro será determinar si es viable implementar el sistema en la localidad estudiada. Otro trabajo a futuro será determinar la altura del terreno donde se implementaron las mediciones para poder caracterizar mejor los resultados obtenidos. Estos trabajos futuros serán posibles gracias a que se construyó un sistema funcional, de bajo mantenimiento con software y hardware de código abierto y reutilizable para otra locación.

8.6 Referencias

Adamchuk. V., Upadhyaya. S. (2004). Comput. Electron. Agric., 44 (1) (pp. 71-91)

Cui, L, Benhua Z. Changyi L. (2011). The application of soil temperature measurement by LM35 temperature sensors, Proceedings of 2011 International Conference on Electronic & Mechanical Engineering and Information Technology.

Díaz, H., Heidi P., Aguilar. K., Macías M., Edgar V., Serrano A. (2017).Diseño de un intercambiador de calor tierra-aire en clima cálido-húmedo. Revista del Desarrollo Tecnológico. 1(2) pp. 44-51.

Manderson. A., Hunt L., (2013). Accurate and Efficient Use of Nutrients on Farms. Occasional Report No. 26, Fertilizer and Lime Research Centre, Massey University, Palmerston North, New Zealand p. 14.

Rao M., Abubakar K., Tony A., (2019) An overview of ground-source heat pump technology, Managing Global Warming An Interface of Technology and Human Issues; Academic Press, pp. 455-485.

Viscarra R., McBratney. A., B. (2010). Proximal Soil Sensing. Progress in Soil Science, Springer, Netherlands

Instructions for Scientific, Technological and Innovation Publication

[Título en Times New Roman y Negritas No. 14 en Español e Inglés]

Apellidos (EN MAYUSCULAS), Nombre del 1^{er} Autor†*, Apellidos (EN MAYUSCULAS), Nombre del 1^{er} Coautor, Apellidos (EN MAYUSCULAS), Nombre del 2^{do} Coautor y Apellidos (EN MAYUSCULAS), Nombre del 3^{er} Coautor

Institución de Afiliación del Autor incluyendo dependencia (en Times New Roman No.10 y Cursiva)

International Identification of Science - Technology and Innovation

ID 1^{er} Autor: (ORC ID - Researcher ID Thomson, arXiv Author ID - PubMed Autor ID - Open ID) y CVU 1^{er} Autor: (Becario-PNPC o SNI-CONACYT) (No.10 Times New Roman)

ID 1^{er} Coautor: (ORC ID - Researcher ID Thomson, arXiv Author ID - PubMed Autor ID - Open ID) y CVU 1^{er} Coautor: (Becario-PNPC o SNI-CONACYT) (No.10 Times New Roman)

ID 2^{do} Coautor: (ORC ID - Researcher ID Thomson, arXiv Author ID - PubMed Autor ID - Open ID) y CVU 2^{do} Coautor: (Becario-PNPC o SNI-CONACYT) (No.10 Times New Roman)

ID 3^{er} Coautor: (ORC ID - Researcher ID Thomson, arXiv Author ID - PubMed Autor ID - Open ID) y CVU 3^{er} Coautor: (Becario-PNPC o SNI-CONACYT) (No.10 Times New Roman)

(Indicar Fecha de Envío: Mes, Día, Año); Aceptado (Indicar Fecha de Aceptación: Uso Exclusivo de ECORFAN)

Citación: Primer letra (EN MAYUSCULAS) del Nombre del 1^{er} Autor. Apellido, Primer letra (EN MAYUSCULAS) del Nombre del 1^{er} Coautor. Apellido, Primer letra (EN MAYUSCULAS) del Nombre del 2^{do} Coautor. Apellido, Primer letra (EN MAYUSCULAS) del Nombre del 3^{er} Coautor. Apellido

Correo institucional [Times New Roman No.10]

Primera letra (EN MAYUSCULAS) del Nombre Editores. Apellidos (eds.) *Título del Handbook [Times New Roman No.10]*, Temas Selectos del área que corresponde ©ECORFAN- Filial, Año.

Instructions for Scientific, Technological and Innovation Publication

Abstract

Texto redactado en Times New Roman No.12, espacio sencillo, en inglés.

Indicar (3-5) palabras clave en Times New Roman y Negritas No.12

1 Introducción

Texto redactado en Times New Roman No.12, espacio sencillo.

Explicación del tema en general y explicar porque es importante.

¿Cuál es su valor agregado respecto de las demás técnicas?.

Enfocar claramente cada una de sus características.

Explicar con claridad el problema a solucionar y la hipótesis central.

Explicación de las secciones del Capítulo.

Desarrollo de Secciones y Apartados del Capítulo con numeración subsecuente

[Título en Times New Roman No.12, espacio sencillo y Negrita]

Desarrollo de Capítulos en Times New Roman No.12, espacio sencillo.

Inclusión de Gráficos, Figuras y Tablas-Editables

En el *contenido del Capítulo* todo gráfico, tabla y figura debe ser editable en formatos que permitan modificar tamaño, tipo y número de letra, a efectos de edición, estas deberán estar en alta calidad, no pixeladas y deben ser notables aun reduciendo la imagen a escala.

[Indicando el título en la parte Superior con Times New Roman No.12 y Negrita, señalando la fuente en la parte Inferior centrada con Times New Roman No. 10]

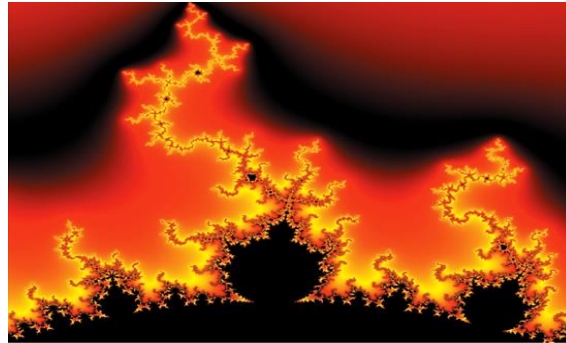
Tabla 3.1 Título

Variable	Descripción	Valor
P ₁	Partición 1	481.00
P ₂	Partición 2	487.00
P ₃	Partición 3	484.00
P ₄	Partición 4	483.50
P ₅	Partición 5	484.00
P ₆	Partición 6	490.79
P ₇	Partición 7	491.61

Fuente:

(No deberán ser imágenes, todo debe ser editable)

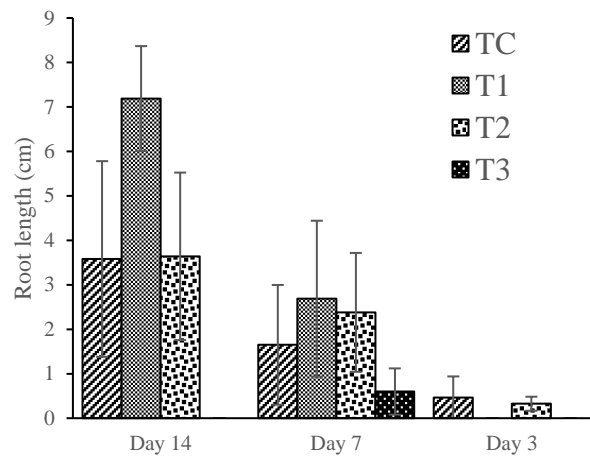
Figura 1.1 Título



Fuente:

(No deberán ser imágenes, todo debe ser editable)

Gráfico 1.1 Título



Fuente:

(No deberán ser imágenes, todo debe ser editable)

Cada Capítulo deberá presentar de manera separada en **3 Carpetas**: a) Figuras, b) Gráficos y c) Tablas en formato .JPG, indicando el número en Negrita y el Título secuencial.

Para el uso de Ecuaciones, señalar de la siguiente forma:

$$\int_{lim^{-1}}^{lim^1} = \int \frac{lim^1}{lim^{-1}} = \left[\frac{1(-1)}{lim} \right]^2 = \frac{(0)^2}{lim} = \sqrt{lim} = 0 = 0 \rightarrow \infty$$

(1)

Deberán ser editables y con numeración alineada en el extremo derecho.

Metodología a desarrollar

Dar el significado de las variables en redacción lineal y es importante la comparación de los criterios usados.

Resultados

Los resultados deberán ser por sección del Capítulo.

Anexos

Tablas y fuentes adecuadas.

Instructions for Scientific, Technological and Innovation Publication

Agradecimiento

Indicar si fueron financiados por alguna Institución, Universidad o Empresa.

Conclusiones

Explicar con claridad los resultados obtenidos y las posibilidades de mejora.

Referencias

Utilizar sistema APA. **No** deben estar numerados, tampoco con viñetas, sin embargo en caso necesario de numerar será porque se hace referencia o mención en alguna parte del Capítulo.

Ficha Técnica

Cada Capítulo deberá presentar en un documento Word (.docx):

Nombre del Handbook

Título del Capítulo

Abstract

Keywords

Secciones del Capítulo, por ejemplo:

1. *Introducción*
2. *Descripción del método*
3. *Análisis a partir de la regresión por curva de demanda*
4. *Resultados*
5. *Agradecimiento*
6. *Conclusiones*
7. *Referencias*

Nombre de Autor (es)

Correo Electrónico de Correspondencia al Autor

Referencias

Requerimientos de Propiedad Intelectual para su edición:

-Firma Autógrafa en Color Azul del Formato de Originalidad del Autor y Coautores

-Firma Autógrafa en Color Azul del Formato de Aceptación del Autor y Coautores

Reserva a la Política Editorial

ECORFAN Handbooks se reserva el derecho de hacer los cambios editoriales requeridos para adecuar la Obra Científica a la Política Editorial del Ecorfan Handbooks. Una vez aceptada la Obra Científica en su versión final, el Ecorfan Handbooks enviará al autor las pruebas para su revisión. Ecorfan® únicamente aceptará la corrección de erratas y errores u omisiones provenientes del proceso de edición de la revista reservándose en su totalidad los derechos de autor y difusión de contenido. No se aceptarán supresiones, sustituciones o añadidos que alteren la formación de la Obra Científica.

Código de Ética – Buenas Prácticas y Declaratoria de Solución a Conflictos Editoriales

Declaración de Originalidad y carácter inédito de la Obra Científica, de Autoría, sobre la obtención de datos e interpretación de resultados, Agradecimientos, Conflicto de intereses, Cesión de derechos y distribución

La Dirección de Ecorfan-México, S.C reivindica a los Autores de la Obra Científica que su contenido debe ser original, inédito y de contenido Científico, Tecnológico y de Innovación para someterlo a evaluación.

Los Autores firmantes de la Obra Científica deben ser los mismos que han contribuido a su concepción, realización y desarrollo, así como a la obtención de los datos, la interpretación de los resultados, su redacción y revisión. El Autor de correspondencia de la Obra Científica propuesto requisitara el formulario que sigue a continuación.

Título de la Obra Científica:

- El envío de una Obra Científica a Ecorfan Handbooks emana el compromiso del autor de no someterlo de manera simultánea a la consideración de otras publicaciones seriadas para ello deberá complementar el Formato de Originalidad para su Obra Científica, salvo que sea rechazado por el Comité de Arbitraje, podrá ser retirado.
- Ninguno de los datos presentados en esta Obra Científica ha sido plagiado ó inventado. Los datos originales se distinguen claramente de los ya publicados. Y se tiene conocimiento del testeo en PLAGSCAN si se detecta un nivel de plagio Positivo no se procederá a arbitrar.
- Se citan las referencias en las que se basa la información contenida en la Obra Científica, así como las teorías y los datos procedentes de otras Obras Científicas previamente publicados.
- Los autores firman el Formato de Autorización para que su Obra Científica se difunda por los medios que Ecorfan-México, S.C. en su Holding México considere pertinentes para divulgación y difusión de su Obra Científica cediendo sus Derechos de Obra Científica.
- Se ha obtenido el consentimiento de quienes han aportado datos no publicados obtenidos mediante comunicación verbal o escrita, y se identifican adecuadamente dicha comunicación y autoría.
- El Autor y Co-Autores que firman este trabajo han participado en su planificación, diseño y ejecución, así como en la interpretación de los resultados. Asimismo, revisaron críticamente el trabajo, aprobaron su versión final y están de acuerdo con su publicación.
- No se ha omitido ninguna firma responsable del trabajo y se satisfacen los criterios de Autoría Científica.
- Los resultados de esta Obra Científica se han interpretado objetivamente. Cualquier resultado contrario al punto de vista de quienes firman se expone y discute en la Obra Científica.

Copyright y Acceso

La publicación de esta Obra Científica supone la cesión del copyright a ECORFAN-México, S.C. en su Holding México para su ECORFAN Handbooks, que se reserva el derecho a distribuir en la Web la versión publicada de la Obra Científica y la puesta a disposición de la Obra Científica en este formato supone para sus Autores el cumplimiento de lo establecido en la Ley de Ciencia y Tecnología de los Estados Unidos Mexicanos, en lo relativo a la obligatoriedad de permitir el acceso a los resultados de Investigaciones Científicas.

Título de la Obra Científica:

Nombre y apellidos del Autor de contacto y de los Coautores	Firma
1.	
2.	
3.	
4.	

Principios de Ética y Declaratoria de Solución a Conflictos Editoriales

Responsabilidades del Editor

El Editor se compromete a garantizar la confidencialidad del proceso de evaluación, no podrá revelar a los Árbitros la identidad de los Autores, tampoco podrá revelar la identidad de los Árbitros en ningún momento.

El Editor asume la responsabilidad de informar debidamente al Autor la fase del proceso editorial en que se encuentra el texto enviado, así como de las resoluciones del arbitraje a Doble Ciego.

El Editor debe evaluar los manuscritos y su contenido intelectual sin distinción de raza, género, orientación sexual, creencias religiosas, origen étnico, nacionalidad, o la filosofía política de los Autores.

El Editor y su equipo de edición de los Holdings de ECORFAN® no divulgarán ninguna información sobre la Obra Científica enviado a cualquier persona que no sea el Autor correspondiente.

El Editor debe tomar decisiones justas e imparciales y garantizar un proceso de arbitraje por pares justa.

Responsabilidades del Consejo Editorial

La descripción de los procesos de revisión por pares es dada a conocer por el Consejo Editorial con el fin de que los Autores conozcan cuáles son los criterios de evaluación y estará siempre dispuesto a justificar cualquier controversia en el proceso de evaluación. En caso de Detección de Plagio a la Obra Científica el Comité notifica a los Autores por Violación al Derecho de Autoría Científica, Tecnológica y de Innovación.

Responsabilidades del Comité Arbitral

Los Árbitros se comprometen a notificar sobre cualquier conducta no ética por parte de los Autores y señalar toda la información que pueda ser motivo para rechazar la publicación de la Obra Científica. Además, deben comprometerse a mantener de manera confidencial la información relacionada con la Obra Científica que evalúan.

Cualquier manuscrito recibido para su arbitraje debe ser tratado como documento confidencial, no se debe mostrar o discutir con otros expertos, excepto con autorización del Editor.

Los Árbitros se deben conducir de manera objetiva, toda crítica personal al Autor es inapropiada.

Los Árbitros deben expresar sus puntos de vista con claridad y con argumentos válidos que contribuyan al que hacer Científico, Tecnológica y de Innovación del Autor.

Los Árbitros no deben evaluar los manuscritos en los que tienen conflictos de intereses y que se hayan notificado al Editor antes de someter la Obra Científica a evaluación.

Responsabilidades de los Autores

Los Autores deben garantizar que sus Obras Científicas son producto de su trabajo original y que los datos han sido obtenidos de manera ética.

Los Autores deben garantizar no han sido previamente publicados o que no estén siendo considerados en otra publicación seriada.

Los Autores deben seguir estrictamente las normas para la publicación de Obra Científica definidas por el Consejo Editorial.

Los Autores deben considerar que el plagio en todas sus formas constituye una conducta no ética editorial y es inaceptable, en consecuencia, cualquier manuscrito que incurra en plagio será eliminado y no considerado para su publicación.

Los Autores deben citar las publicaciones que han sido influyentes en la naturaleza de la Obra Científica presentado a arbitraje.

Servicios de Información

Indización - Bases y Repositorios

RESEARCH GATE (Alemania)

MENDELEY (Gestor de Referencias bibliográficas)

GOOGLE SCHOLAR (Índices de citas-Google)

REDIB (Red Iberoamericana de Innovación y Conocimiento Científico- CSIC)

Servicios Editoriales

Identificación de Citación e Índice H

Administración del Formato de Originalidad y Autorización

Testeo de Handbooks con PLAGSCAN

Evaluación de Obra Científica

Emisión de Certificado de Arbitraje

Edición de Obra Científica

Maquetación Web

Indización y Repositorio

Publicación de Obra Científica

Certificado de Obra Científica

Facturación por Servicio de Edición

Política Editorial y Administración

143 - 50 Itzopan, Ecatepec de Morelos – México. Tel: +52 1 55 6159 2296, +52 1 55 1260 0355, +52 1 55 6034 9181; Correo electrónico: contact@ecorfan.org www.ecorfan.org

ECORFAN®

Editor en Jefe

VARGAS-DELGADO, Oscar. PhD

Directora Ejecutiva

RAMOS-ESCAMILLA, María. PhD

Director Editorial

PERALTA-CASTRO, Enrique. MsC

Diseñador Web

ESCAMILLA-BOUCHAN, Imelda. PhD

Diagramador Web

LUNA-SOTO, Vladimir. PhD

Asistente Editorial

TREJO-RAMOS, Iván. BsC

Traductor

DÍAZ-OCAMPO, Javier. BsC

Filóloga

RAMOS-ARANCIBIA, Alejandra. BsC

Publicidad y Patrocinio

(ECORFAN®- Mexico- Bolivia- Spain- Ecuador- Cameroon- Colombia- El Salvador- Guatemala- Nicaragua- Peru- Paraguay- Democratic Republic of The Congo- Taiwan),sponsorships@ecorfan.org

Licencias del Sitio

03-2010-032610094200-01-Para material impreso, 03-2010-031613323600-01-Para material electrónico, 03-2010-032610105200-01-Para material fotográfico, 03-2010-032610115700-14-Para Compilación de Datos, 04 -2010-031613323600-01-Para su página Web, 19502-Para la Indización Iberoamericana y del Caribe, 20-281 HB9-Para la Indización en América Latina en Ciencias Sociales y Humanidades, 671-Para la Indización en Revistas Científicas Electrónicas España y América Latina, 7045008-Para su divulgación y edición en el Ministerio de Educación y Cultura-España, 25409-Para su repositorio en la Biblioteca Universitaria-Madrid, 16258-Para su indexación en Dialnet, 20589-Para Indización en el Directorio en los países de Iberoamérica y el Caribe, 15048-Para el registro internacional de Congresos y Coloquios. financingprograms@ecorfan.org

Oficinas de Gestión

143 - 50 Itzopan, Ecatepec de Morelos – México.

21 Santa Lucía, CP-5220. Libertadores -Sucre – Bolivia.

38 Matacerquillas, CP-28411. Morazarzal –Madrid-España.

18 Marcial Romero, CP-241550. Avenida, Salinas I - Santa Elena-Ecuador.

1047 Avenida La Raza -Santa Ana, Cusco-Perú.

Boulevard de la Liberté, Immeuble Kassap, CP-5963.Akwa- Douala-Camerún.

Avenida Suroeste, San Sebastian - León-Nicaragua.

31 Kinshasa 6593- Republique Démocratique du Congo.

Avenida San Quentin, R 1-17 Miralvalle - San Salvador-El Salvador.

16 kilómetros, carretera estadounidense, casa Terra Alta, D7 Mixco Zona 1-Guatemala.

105 Alberdi Rivarola Capitán, CP-2060. Luque City- Paraguay.

69 Calle Distrito YongHe, Zhongxin. Taipei-Taiwán.

43 Calle # 30 -90 B. El Triunfo CP.50001. Bogotá-Colombia.

