

QUÍMICA E INGENIERÍA VERDE PARA LA SUSTENTABILIDAD

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN



UANL



La excelencia
por principio
la educación
como instrumento

FEBRERO 2024



FCQ

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

Dr. Med. Santos Guzmán López
RECTOR

Dr. Juan Paura García
SECRETARIO GENERAL

Dr. Jaime Arturo Castillo Elizondo
SECRETARIO ACADÉMICO

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS

Dra. Argelia Vargas Moreno
DIRECTORA

QUÍMICA E INGENIERÍA VERDE PARA LA SUSTENTABILIDAD

ISBN: En trámite

Reservados todos los derechos conforme la ley.
Prohibida la reproducción total y parcial de este texto
sin previa autorización por escrito del editor
responsable.

Impreso y hecho en San Nicolás de los Garza, Nuevo León, México.

Printed and made in San Nicolás de los Garza, Nuevo León, México.

COMITÉ EDITORIAL

MII. Arlethe Yarí Aguilar Villarreal

Dr. Juan Manuel Alfaro Barbosa

Dr. Héctor Javier Amézquita García

Dra. Lucía Guadalupe Cantú Cárdenas

Dra. Maria Elena Cantú Cárdenas

Dr. Leonardo Gabriel Hernández Landa

Dra. Yolanda Peña Méndez

M.A. Elva Patricia Puente Aguilar

Dr. Pasiano Rivas García

Dr. Jacob Josafat Salazar Rábago

Dr. Salvador Tututi Ávila



PRESENTACIÓN

La ingeniería como la química son áreas de desarrollo que le permite al ser humano gozar de grandes beneficios, con el objetivo principal de minimizar los daños a la salud y al medioambiente, surgen las áreas de química e ingeniería verde, este tema ha sido de especial atención por la Facultad de Ciencias Químicas en los últimos años, ya que han implementado una serie de estrategias y acciones en pro del cuidado del ambiente, entre ellas, la generación y difusión del conocimiento científico, a través de la creación de una plataforma en donde se discuta y se comparta las buenas prácticas de investigación referente a la Química e Ingeniería Verde, por lo cual a través del Congreso Internacional de Química e Ingeniería Verde, se ha dado difusión a las aportaciones científicas y de investigación en relación a las área de conocimiento que se describen a continuación;

- 1.- Biotecnología y Microbiología aplicada
- 2.- Ciencias Farmacéuticas y biomedicina
- 3- Evaluación de la Contaminación Ambiental
- 4-Síntesis, caracterización y propiedades de materiales para la Sustentabilidad
- 5-Educación para la Sustentabilidad y Responsabilidad social
- 6-Procesos Sustentables y Química Verde
- 7-Tecnologías para el Control de la Contaminación
- 8-Ambiente, Salud y Seguridad
- 9-Ingeniería, manufactura y cadena de suministro
- 10-Administración y negocios Sustentables
- 12-Industria 4.0
- 13-Energías Alternativas y eficiencia energética
- 14-Desarrollo Sostenible

A través de las siguientes páginas, encontrarán una serie de aportaciones y contribuciones a la frontera del conocimiento con el propósito de apoyar las metas del Desarrollo Sostenible presentadas en la Organización de las Naciones Unidas. Este libro presenta diversos trabajos y manuscritos cuidadosamente seleccionados, revisa dos y aceptados, para así brindar a los interesados en estos temas aportaciones de alto impacto.

MII. Arlethe Yarí Aguilar Villarreal
Editor Responsable

ÍNDICE TEMÁTICO

EJE TEMÁTICO 1. BIOTECNOLOGÍA Y MICROBIOLOGÍA APLICADA.....	8
DISEÑO DE UN SISTEMA BIOLÓGICO IN SILICO DE PRODUCCIÓN DE UNA PROTEÍNA RECOMBINANTE EN ESCHERICHIA COLI PARA DEGRADACIÓN DE PET. Hernández-Elizondo J. D., Ortiz-Esparza D. L., Torres-Cordero H. M.	9
DESARROLLO DE COMUNIDADES NITRIFICANTES Y DESNITRIFICANTES A PARTIR DE UN SIMBIONTE DE LARVAS DE TENEBRIO MOLITOR. Amézquita-García H. J., Cano-Gómez J. J., García-Tijerina D., Rivas-García P.	15
EJE TEMÁTICO 2. CIENCIAS FARMACÉUTICAS Y BIOMEDICINA.....	21
INCORPORACIÓN DE LA LACASA CU1 EN NANOPARTÍCULAS A BASE DE POLIMETACRILATO. Castro-Ríos R., Chávez-Montes A., Elizondo-Luévano J. H., Garza-Tapia M., Gutiérrez-Soto J. G., Soto-Vázquez S. A.	22
ACTIVIDAD CITOTÓXICA DE RUTA CHALEPENSIS Y DE SUS COMPONENTES PRINCIPALES LAS FURANOCOUMARINAS CHALEPENSINA Y RUTAMARINA. Bazaldúa-Rodríguez A. F., Elizondo-Luévano J. H., Gómez-Flores R. A., Quintanilla-Licea R., Rodríguez Garza-N. E., Romo-Sáenz C. I.	28
EVALUACIÓN DE LAS ACTIVIDADES BIOLÓGICAS DE ARGEMONE MEXICANA EN ENSAYOS IN-VITRO. Elizondo-Luévano J. H., Gómez-Flores R. A., Quintanilla-Licea R., Rodríguez-Garza N. E., Romo-Sáenz C. I., Tamez-Guerra P.	34
ANÁLISIS DEL PERFIL METABOLÓMICO Y ACTIVIDAD CITOTÓXICA DE EXTRACTOS DE CISSUS INCISA UTILIZANDO UN ENFOQUE DE FARMACOLOGÍA DE RED. Boffill-Beltrán O., Camacho-Corona M. R., González- Maya L., Nocado-Mena D., Ríos-González M.Y.	40
EJE TEMÁTICO 3. EVALUACIÓN DE LA CONTAMINACIÓN AMBIENTAL.....	46
MODELADO DE LA DISPERSIÓN DE CONTAMINANTES MEDIANTE EL SOFTWARE AERMOD APLICADO DE LA ERUPCIÓN DEL VOLCÁN ARENAL DE COSTA RICA, 1968. Alfaro-Solís R., Alvarado-Induni G., Godfrey I., Martínez-Cruz M., Sibaja-Brenes J. P.	47
ESTUDIO CINÉTICO DE LA ADSORCIÓN DE NAPROXENO EN BENTONITA MODIFICADA POR EL SURFACTANTE HDTMA. Alviso-Coronado M. A, De Haro-Del Rio D. A., Dimas-Rivera G. L., Liñán-Montes A., Montalvo-Herrera T. J., Sandoval-Rangel L.	55
EJE TEMÁTICO 4. SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN Y PROPIEDADES DE MATERIALES PARA LA SUSTENTABILIDAD.....	61
SÍNTESIS DE LI ₂ CUP1-XVXO ₄ (X=0.0, 0.1, 0.2) Y SU EVALUACIÓN COMO CÁTODO EN BATERÍAS DE ION-LITIO. De la Parra-Arciniega S. M., García-Mata S. A., Guzmán-Torres J., Sánchez-Cervantes E. M.	62
SÍNTESIS VERDE DEL SULFURO DE BISMUTO PARA SU POTENCIAL APLICACIÓN EN DISPOSITIVOS DE ALMACENAMIENTO DE ENERGÍA. Gamboa-Sánchez S. A., Gómez-De la Fuente M. I., Ildusovich-Kharissov B., Morales-Rodríguez J., Peña-Méndez Y.	68

BAMBÚ, MATERIAL DEL FUTURO: MADERA ECOLÓGICA PARA REALIZACIÓN DE CONSTRUCCIONES “VERDES”, DISEÑOS ELEGANTES, CONFORTABLES Y SOSTENIBLES. <i>Chacón-Baca E., García-González E. G.</i>	75
CONVERSIÓN CATALÍTICA DE CO ₂ A CO UTILIZANDO CATALIZADORES DE COBRE SOPORTADO EN NANOTUBOS DE TITANATOS. <i>Flores-Escamilla G. A., Ibarra-Chávez V., Pérez-López R. E., Reyes-Díaz A. T., Robles- Leal J. G., Rojas-Oyervides N. E.</i>	82
ESTUDIO DE PROPIEDADES FÍSICOQUÍMICAS Y ANTIOXIDANTES DE NANOPARTÍCULAS DE SiO ₂ COMO ACARREADORES DE FLAVONOIDES DE CITRUS SINENSIS. <i>García-Fajardo J. A., Hernández-López M. A., Ponce- Hernández J. S., Sánchez-Calixto D. G.</i>	88
EJE TEMÁTICO 6. PROCESOS SUSTENTABLES Y QUÍMICA VERDE.....	93
ESTUDIO PARAMÉTRICO DE UN NOVEDOSO SISTEMA AVANZADO DE ABSORCIÓN EMPLEANDO FUENTES DE ENERGÍAS ALTERNATIVAS. <i>Gómez-Zamora R., Hernández-Magallanes J. A., Kozhiparambil-Chandran S., Lugo- Loredó S.</i>	94
USO DE RESIDUOS ORGÁNICOS CÍTRICOS PARA LA SÍNTESIS DE NANOPARTÍCULA DE PLATA DISPERSADAS EN CAOLÍN. <i>Amézquita-García H. J., Castañeda-Aude J. E., De Haro Del Río D. A., Díaz Barriga-Castro E., Escárcega- González C. E., Morones-Ramírez J. R.</i>	100
EVALUACIÓN DE TÉCNICAS DE EXTRACCIÓN DE HIDROCARBUROS POLICÍCLICOS AROMÁTICOS PARA EL ANÁLISIS DE COMBUSTIBLE COQUE MEDIANTE CG-MS. <i>Gaspar-Ramírez O., Ponce-Hernández J. S., Salas- Espinosa E. A., Solís-Cruz D. I.</i>	106
EJE TEMÁTICO 8. AMBIENTE, SALUD Y SEGURIDAD.....	111
MEDICIÓN DE LA ACTIVIDAD ELÉCTRICA CEREBRAL PARA LA CARACTERIZACIÓN DEL ESTRÉS LABORAL. <i>Coronel-García F. A., Higareda-Pliego T. E., Nava-Sedano A. L., Quevedo-Nava L.</i>	112
IMPLEMENTACIÓN DEL SISTEMA GLOBALMENTE ARMONIZADO PARA LA CLASIFICACIÓN Y ETIQUETADO DE PRODUCTOS QUÍMICOS EN UNA UNIVERSIDAD DEL NORESTE DE MÉXICO. <i>Carrillo-Ibarra C. C., Hernández-Ramos J. M., Lara-Guerrero R. J., López-Chuken U. J., Pensado-Montejo G. G., Ramírez-Castillo A. I.</i>	118
EJE TEMÁTICO 9. INGENIERÍA, MANUFACTURA Y CADENA DE SUMINISTRO.....	124
IMPACTO DEL LIDERAZGO DE LA ALTA DIRECCIÓN EN LA IMPLEMENTACIÓN DE UN SISTEMA DE GESTIÓN EN EMPRESAS DE AUTOPARTES DE NUEVO LEÓN. <i>Cuellar-Celestino J., González-Palomo I. G., Hernández- Ramos J. M., Pérez-Barrientos J. G., Solís-Peña C.</i>	125
MODELO PARA MEDIR EL NIVEL DE SERVICIO PERCIBIDO POR ALUMNOS DE EDUCACION SUPERIOR. <i>García-León A. M., González-Palomo I. G., Solís-Peña C.</i>	133
REDISEÑO DE LA CADENA DE VALOR PARA LA MEJORA DEL SERVICIO EN UNA EMPRESA DE AUTOPARTES. <i>Dragustinovis-López F. A., Hernández-Landa L. G., Solís-Peña C.</i>	139
CAPACIDAD ECONÓMICA FAMILIAR Y SU INFLUENCIA EN EL RENDIMIENTO ACADÉMICO DE ESTUDIANTES DE INGENIERÍA: ESTUDIO TRANSVERSAL PRELIMINAR. <i>De la Rosa Villarreal R. M., Elizondo-Jiménez S. C., Téllez- González L., Torres-Torres M., Velázquez-Martínez J. D.</i>	144

EVALUACIÓN DE HERRAMIENTAS TECNOLÓGICAS COMO RECURSO EDUCATIVO EN LA FORMACIÓN DE BACHILLERATO, INGENIERÍA Y POSGRADO. <i>Bacre-Guzmán D. C., García-León A. M., González-Palomo I. G., Martínez-Mercado M. A., Puente-Aguilar E. P.</i>	150
IMPLEMENTACIÓN DE SENSOR PERSONALIZADO PARA ALARMA DE HORNO EN INDUSTRIA CERÁMICA. <i>Bacre-Guzmán D. C., Leal-Rendón N. M., Martínez-Mercado M. A.</i>	156
IMPACTO DEL AMBIENTE DE TRABAJO SIMULADO (SWE) EN EL APRENDIZAJE DE ESTUDIANTES DE INGENIERÍA INDUSTRIAL. <i>García-León A. M., Gómez-Fuentes P., Hernández-Landa L. G., Puente-Aguilar E. P., Vargas-Moreno A.</i>	162
EJE TEMÁTICO 10. ADMINISTRACIÓN Y NEGOCIOS SUSTENTABLES.....	168
PERCEPCIÓN DE LOS ESTUDIANTES EN LA IMPLEMENTACIÓN DE POLÍTICAS DE RESPONSABILIDAD SOCIAL UNIVERSITARIA EN INSTITUCIONES DE EDUCACIÓN SUPERIOR. <i>Cuevas-Gutiérrez A. I., Martínez-Valdez D. I., Martínez-Valdez J. I., Martínez-Valdez R. I., Pérez-Martínez K. S.</i>	169
EL IMPACTO DE LAS CAMPAÑAS DE GREENWASHING EN LA ACTITUD E INTENCIÓN DE COMPRA ENTRE HOMBRES Y MUJERES. <i>Catache-Mendoza M. C., González-Trejo E. S., Martínez Valdez-R. I., Pedroza Cantú G.</i>	175
EJE TEMÁTICO 12. INDUSTRIA 4.0.....	181
DIGITALIZACIÓN Y AUTOMATIZACIÓN DE PROCESOS. ESTUDIO DE CASO EN PROCESO DE COMPRA EN UNA INSTITUCIÓN DE EDUCACIÓN SUPERIOR. <i>Cavazos-Salazar R. L., López-Villarreal R. L., Mohamed-Noriega N., Solís-Peña C.</i>	182
EJE TEMÁTICO 13. ENERGÍAS ALTERNATIVAS Y EFICIENCIA ENERGÉTICA.....	188
VALORIZACIÓN DE LODOS DE AGUA RESIDUAL PARA LA PRODUCCIÓN DE BIODIÉSEL USANDO SOLVENTES EUTÉCTICOS PROFUNDOS. <i>Alcalá-Rodríguez M. M., Cano-Gómez J. J., Escamilla-Alvarado C., Escárcega-González C. E., Moreno-Caballero B. S.</i>	189
MODELACIÓN TERMODINÁMICA DE UN NOVEDOSO SISTEMA DE POLIGENERACIÓN CON UN ORC PARA LA PRODUCCIÓN ENERGÍA ELÉCTRICA, CALOR REVALORIZADO Y ENFRIAMIENTO. <i>Cerdán-Pasarán A. Q., Hernández-Magallanes J. A., Kozhiparambil-Chandran S., Segovia-Ojeda F. E.</i>	195
PELÍCULAS DELGADAS DE ZNO/AL/AG EN APLICACIONES FOTOCATALÍTICOS Y FOTOELECTROQUÍMICOS PARA OBTENCIÓN DE HIDRÓGENO. <i>Alfaro-Cruz M. R., Juárez-Ramírez I., Ortiz-Rabell G.</i>	202
EJE TEMÁTICO 14. DESARROLLO SOSTENIBLE.....	213
RECUBRIMIENTO A BASE DE DESECHO DE POLIURETANO DE LA INDUSTRIA DEL CALZADO. <i>Alvarez-Zeferino J. C., Sotelo-Navarro P. X., Urias-Sandoval A. Y.</i>	214
GESTIÓN DE LOS RESIDUOS PELIGROSOS BIOLÓGICOS EN UNA INSTITUCIÓN DE EDUCACIÓN SUPERIOR DEL NORESTE DE MEXICO. <i>Carrillo Ibarra C. C., Hernández Ramos J. M, López Chuken U. J., Pensado Montejo G. G., Ramírez Castillo A. I., Ramírez Lara E.</i>	220
ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD DE UN ANÁLISIS DE CICLO DE VIDA DE CUBREBOCAS REUTILIZABLE. <i>González-Cardoso G., Sotelo-Navarro P. X., Tecorralco-Bobadilla A. L., Vázquez-Morillas A.</i>	226

ÍNDICE POR AUTORES

Alcalá Rodríguez, Mónica María,	189
Alfaro Cruz, María Rocío,	202
Alfaro Solís, Rosa,	47
Alvarado Induni, Guillermo,	47
Alvarez Zeferino, Juan Carlos,	214
Alviso Coronado, Mónica Alejandra,	55
Amézquita García, Héctor Javier,	15, 100
Bacre Guzmán, Daniela del Carmen,	150, 156
Bazaldúa Rodríguez, Aldo Fabio,	28
Bofill Beltrán, Orestes,	40
Camacho Corona, María del Rayo,	40
Cano Gómez, José Julián,	15, 189
Carrillo Ibarra, Carmen Carolina,	118, 220
Castañeda Aude, Javier Emanuel,	100
Castro Ríos, Rocío,	22
Catache Mendoza, María del Carmen,	175
Cavazos Salazar, Rosario Lucero,	182
Cerdán Pasarán, Andrea Quetzalli,	195
Chacón Baca, Elizabeth,	75
Chávez Montes, Abelardo,	22
Coronel García, Francisco Alfonso,	112
Cuellar Celestino, Jhonathan,	125
Cuevas Gutiérrez, Ana Irene,	169
De Haro Del Rio, David Alejandro,	55, 100
De la Parra Arciniega, Salomé Maribel,	62
De la Rosa Villarreal, Rogelio Martín,	144
Díaz Barriga Castro, Enrique,	100
Dimas Rivera, Gloria Lourdes,	55
Dragustinovis López, Fátima Abygail,	139
Elizondo Jiménez, Soraya Concepción,	144
Elizondo Luévano, Joel Horacio,	22, 28, 34
Escamilla Alvarado, Carlos,	189
Escárcega González, Carlos Enrique,	100, 189
Flores Escamilla, Gerardo Antonio,	82
Gamboa Sánchez, Sergio Alberto,	68
García Fajardo, Jorge Alberto,	88
García González, Emma Gema,	75
García León, Azucena Minerva,	133, 150, 162
García Mata, Sergio Alfonso,	62
García Tijerina, Daniela,	15
Garza Tapia, Marsela,	22
Gaspar Ramírez, Octavio,	106
Godfrey, Ian,	47
Gómez De la Fuente, María Idalia del Consuelo,	68
Gómez Flores, Ricardo Alberto,	28, 34
Gómez Fuentes, Patricia,	162
Gómez Zamora, Ramsés,	94
González Cardoso, Griselda,	226
González Maya, Leticia,	40
González Palomo, Iván Guillermo,	125, 133, 150

González Trejo, Eli Samuel,	175
Gutiérrez Soto, Juanita Guadalupe,	22
Guzmán Torres, Jesús,	62
Hernández Elizondo, Jesús Daniel,	9
Hernández Landa, Leonardo Gabriel,	139, 162
Hernández López, Mario Alberto,	88
Hernández Magallanes, Javier Alejandro,	94, 195
Hernández Ramos, Juan Manuel,	118, 125, 220
Higareda Pliego, Tomas Emmanuel,	112
Ibarra Chávez, Valeria,	82
Ildusovich Kharissov, Boris,	68
Juárez Ramírez, Isaías,	202
Kozhiparambil Chandran, Sanal,	94, 195
Lara Guerrero, Ricardo Josué,	118
Leal Rendón, Nury Margarita,	156
Liñán Montes, Adriana,	55
López Chuken, Ulrico Javier,	118, 220
López Villarreal, Rocio Lizbeth,	182
Lugo Loreda, Shadai,	94
Martínez Cruz, María,	47
Martínez Mercado, María de los Ángeles,	150, 156
Martínez Valdez, Dora Ivonne,	169
Martínez Valdez, Judith Irasema,	169
Martínez Valdez, Ruth Isela,	169, 175
Mohamed Noriega, Nasser,	182
Montalvo Herrera, Teresa de Jesús,	55
Morales Rodríguez, Javier,	68
Moreno Caballero, Brayán Steven,	189
Morones Ramírez, José Rubén,	100
Nava Sedano, Alma Lilly,	112
Nocedo Mena, Deyani,	40
Ortiz Esparza, Dulio Leonardo,	9
Ortiz Rabell, Gilbert,	202
Pedroza Cantú, Gloria,	175
Pensado Montejó, Guillermo Gibrán,	118, 220
Peña Méndez, Yolanda,	68
Pérez Barrientos, Jorge Gilberto,	125
Pérez López, Rodolfo Emanuel,	82
Pérez Martínez, Katia Site,	169
Ponce Hernández, Juana Suhey,	88, 106
Puente Aguilar, Elva Patricia,	150, 162
Quevedo Nava, Lizzeth,	112
Quintanilla Licea, Ramiro,	28
Ramírez Castillo, Aldo Isaac,	118, 220
Ramírez Lara, Evangelina,	220
Reyes Díaz, Arturo Tadeo,	82
Rivas García, Pasiano,	15
Ríos González, María Yolanda,	40
Robles Leal, Jesús Guadalupe,	82
Rodríguez Garza, Nancy Edith,	28, 34
Rojas Oyervides, Nahomi Elizabeth,	82
Romo Sáenz, César Iván,	28, 34

Salas Espinosa, Edgar Arturo,	106
Sánchez Calixto, Dulce Guadalupe,	88
Sánchez Cervantes, Eduardo Maximiano,	62
Sandoval Rangel, Ladislao,	55
Segovia Ojeda, Felipe Eduardo,	195
Sibaja Brenes, José Pablo,	47
Solis Cruz, Diana Itzel,	106
Solís Peña, Carolina,	125, 133, 139, 182
Sotelo Navarro, Perla Xochitl,	214, 226
Soto Vázquez, Samuel Alfredo,	22
Tamez Guerra, Patricia,	34
Tecorralco Bobadilla, Ana Laura,	226
Téllez González, Leticia,	144
Torres Cordero, Heber Miguel,	9
Torres Torres, Mauricio,	144
Urias Sandoval, Alba Yosselyn,	214
Vargas Moreno, Argelia,	162
Vázquez Morillas, Alethia,	226
Velázquez Martínez, José Daniel,	144



VII CONGRESO INTERNACIONAL DE
QUÍMICA E INGENIERÍA VERDE

EJE TEMÁTICO 1

BIOTECNOLOGÍA Y MICROBIOLOGÍA APLICADA



DISEÑO DE UN SISTEMA BIOLÓGICO *IN SILICO* DE PRODUCCIÓN DE UNA PROTEÍNA RECOMBINANTE EN *ESCHERICHIA COLI* PARA DEGRADACIÓN DE PET

DESIGN OF AN *IN SILICO* BIOLOGICAL SYSTEM TO PRODUCE A RECOMBINANT PROTEIN IN *ESCHERICHIA COLI* FOR PET DEGRADATION

Dulio Leonardo Ortiz Esparza¹, Jesús Daniel Hernández Elizondo¹, Heber Miguel Torres Cordero¹

¹Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Biológicas, Departamento de Biología del desarrollo, Ave. Universidad S/N, Cd. Universitaria, San Nicolás de los Garza N.L. México, C.P. 66455.

*dulio.ortize@uanl.edu.mx/ dulio.ortize@uanl.edu.mx

RESUMEN.

El polietileno tereftalato (PET) es un polímero cuyo uso abusivo y su baja tasa de degradación ha repercutido en la búsqueda de alternativas que permitan su eliminación efectiva, ya que su complejo reciclaje y uso prolongado genera una gran acumulación de microplásticos en los ecosistemas. Actualmente se ha impulsado la identificación de microorganismos, como *Ideonella sakaiensis*, con la capacidad enzimática de degradar PET naturalmente de una manera más eficiente y económica. En este trabajo se diseñó un sistema biológico sintético de producción de una PETasa mutante termoresistente de manera recombinante en *Escherichia coli* para la degradación de PET termoformado, y se caracterizó *in silico* su expresión genética, producción y afinidad con dicho plástico en un ambiente industrial a altas temperaturas mediante herramientas informáticas. El diseño incluyó la producción de la proteína regulada en presencia de ácido vanílico a una concentración de 1M, y mediante una simulación realizada por R Studios se obtuvo un valor de RNA traducido de 2,826 copias por célula, sugiriendo una producción proteica de hasta 0.75 g/L. Por otro lado, la herramienta UCSF Chimera indicó una serie de interacciones de la proteína y el ligando evaluado, mostrando una energía de afinidad libre de Gibbs con un valor negativo promedio de -5.4 kCal/mol, aludiendo a una interacción estable entre la PETasa producida y el PET termoformado. Estos datos demuestran que el sistema de producción de la PETasa diseñado en este trabajo mostró una óptima eficiencia *in silico* debido a la cantidad de proteína producida. Además, se puede deducir que la enzima también contaría con la capacidad de interactuar con el PET a altas temperaturas, sugiriendo su degradación mediante su actividad catalítica. De esta manera, este proyecto representa una alternativa sustentable para disminuir los efectos de la presencia del PET en los ecosistemas e incentivar una economía circular.

Palabras clave: *In silico*, PETasa, *Escherichia coli*.

ABSTRACT.

Polyethylene terephthalate (PET) is a polymer whose abusive use and low degradation rate has led to the search for alternatives that allow its effective elimination, since its complex recycling and prolonged use generates a large accumulation of microplastics in ecosystems. Currently, the identification of microorganisms, such as *Ideonella sakaiensis*, with the enzymatic capacity to degrade PET naturally in a more efficient and economical way has been promoted. In this work, a synthetic biological system for the recombinant production of a thermoresistant mutant PETase in *Escherichia coli* was designed for the degradation of thermoformed PET, and its gene expression, production, and affinity with this plastic in an industrial environment at high temperatures was characterized *in silico* by means of computer tools. The design included the production of the regulated protein in the presence of vanillinic acid at a concentration of 1M, and a simulation

performed by R Studios yielded a value of translated RNA of 2,826 copies per cell, suggesting a protein production of up to 0.75 g/L. On the other hand, the UCSF Chimera tool indicated a series of interactions of the protein and the evaluated ligand, showing a Gibbs free affinity energy with an average negative value of -5.4 kCal/mol, alluding to a stable interaction between the produced PETase and the thermoformed PET. These data demonstrated that the PETase production system designed in this work showed an optimal *in silico* efficiency due to the amount of protein produced. In addition, it can be deduced that the enzyme would also have the capacity to interact with PET at high temperatures, suggesting its degradation through its catalytic activity. Thus, this project represents a sustainable alternative to reduce the effects of the presence of PET in ecosystems and encourage a circular economy.

Keywords: *In silico*, PETase, *Escherichia coli*.

INTRODUCCIÓN

El polietileno tereftalato (PET) es un material utilizado en la industria generalmente para el embotellamiento de bebidas y el almacenamiento de algunos alimentos, aunado a su bajo costo de producción y alta duración. Lamentablemente, el PET no es un material biodegradable, por lo que no hay manera de que este se destruya de manera natural y se evite así su acumulación en el ambiente. Esto se debe a que este tipo de plásticos tienen un alto grado de cristalinidad, y contienen polímeros de eteno de cadenas largas, provocando que este compuesto tenga un alto peso molecular y haciendo que su composición química sea difícil de degradar por los microorganismos [1]. Además, el PET también es perjudicial para la salud humana, ambiental y animal, ya que los aditivos que se le agregan a dicho plástico al momento de producirlo, como lo es el bisfenol A (BPA) [2] se liberan al medio causando intoxicación en los seres vivos [3]. Ante el crecimiento acelerado de los desechos de plástico a base de PET, existen algunos métodos para degradar y/o reciclar dicho compuesto, dando como resultado una resina que puede ser nuevamente utilizada en la elaboración de cualquier otro producto sin tener que desecharlo. Algunos procesos físicos de eliminación de PET utilizados se enfocan en su fragmentación o reducción de tamaño sin cambiar su estructura molecular. Sin embargo, los métodos químicos de eliminación incluyen el cambio en su composición química, separando el polímero mediante algunos procesos como la hidrólisis, la glicólisis, entre otros [4]. No obstante, el descubrimiento de métodos biológicos para la eliminación del PET es relativamente reciente, y representan una alternativa más económica en comparación con otros procesos, sin comprometer la integridad de la estructura del PET y siendo autosuficientes al optimizar a los microorganismos degradadores de plástico [4]. En el año del 2016, un equipo de investigadores logró identificar a la bacteria *Ideonella sakaiensis*, organismo con la capacidad de producir una enzima llamada PETasa con la facultad de degradar el plástico PET en sus componentes básicos, el *tereftalato* y el *etilenglicol*, abriendo nuevas posibilidades para el desarrollo de métodos más sostenibles y respetuosos con el medio ambiente para la eliminación de residuos de PET.

METODOLOGÍA

En el presente proyecto se elaboró del diseño de un sistema biológico que permitiera la degradación del polietileno tereftalato (PET). Para ello se identificó una enzima que permitiera la catalización del polietileno tereftalato (PET) a altas temperaturas utilizando la Braunschweig Enzyme Database (BRENDA), y posteriormente se identificaron condiciones relevantes que permitieran el funcionamiento óptimo de las enzimas disponibles (cofactores, PH óptimo y temperatura óptima). Una vez identificada la enzima a utilizar, se utilizó la base de datos del Centro Nacional para la Información Biotecnológica (NCBI) para buscar la región codificante de la enzima en el organismo de origen para su posterior optimización mediante la herramienta bioinformática de la empresa Integrated DNA Technologies (IDT) Codon Optimization Tool. Posteriormente se realizó una búsqueda de

la secuencia nucleotídica en el Protein Data Bank (PDBsum) y se utilizó la herramienta de predicción Swiss Model con el fin de corroborar el organismo de origen y obtener la estructura tridimensional (3D) de la enzima en el formato “.pdb”, además de obtener su secuencia aminoacídica. Mediante el uso de SignalP 6.0 se colocó un péptido señal de secreción junto con la secuencia de la proteína con la finalidad de verificar su secreción al medio a gran escala y una etiqueta de purificación 6XHIS. Para identificar un sistema biológico de producción de la PETasa en *Escherichia coli* se utilizó el Registro de Partes de la Fundación iGEM, y para determinar su sitio de unión a ribosoma (RBS) se utilizó la herramienta bioinformática RBS De NOVO DNA. A partir de la base de datos Pubchem se obtuvo la especificación de introducción lineal molecular simplificada (SMILE) de la molécula ligando. Se utilizó el software molecular Avogadro para optimizar la energía de los enlaces del ligando necesaria para el estudio del docking y se realizó el ensayo de docking molecular entre la enzima PETasa y el ligando optimizado mediante el software UCSF Chimera. Para predecir el comportamiento del sistema en *Escherichia coli* y satisfacer su comportamiento, se realizó la búsqueda de ecuaciones diferenciales y códigos de programación en las bases de datos de la Fundación iGEM y se consultó la base de datos Bionumbers para obtener constantes con datos experimentales.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Se identificaron 4 enzimas PETasas de distintos organismos capaces de degradar PET a altas temperatura y se seleccionó una de ellas producida naturalmente por *Ideonella sakaiensis*, pero mutada para volverla termoestable, de manera que tuviera una actividad catalítica a un pH 7, a una temperatura de 69°C y sin la necesidad de cofactores [5]. La PETasa naturalmente muestra una serie de características importantes para la degradación de PET, ya que su actividad ocurre a un pH de 9 sin necesidad de algún cofactor, provocando que la bacteria pueda conseguir su fuente de carbono a partir de dicho plástico [6]. Por ello se seleccionó a una PETasa mutante termo resistente a partir de *Ideonella sakaiensis* (**Figura 1.**)



Figura 1. PETasa seleccionada y modelada a través del software UCSF Chimera.

Una vez obtenida su secuencia codificante mediante el NCBI y BRENDA y añadido el péptido señal SPLamB en el extremo N-terminal de la proteína, se realizó una predicción con SignalP 6.0 en donde se observó que los aminoácidos que corresponden al péptido señal y muestran una alta probabilidad de realizar una escisión en los aminoácidos 25 y 26 de la proteína al ser secretada y exportada al medio.

Optimizada la secuencia para *Escherichia coli*, se añadieron sitios de restricción para las enzimas *EcoRI*, *XbaI*, *SpeI* y *PstI* para garantizar su futura clonación y expresión en la bacteria en los vectores pSB1C3 y pSB3K3. En el diseño *in silico* del sistema biológico sintético para la producción de la PETasa termo resistente propuesto, se determinó su activación en presencia de *ácido vanílico*, presentando ventajas importantes en el control de su expresión genética. mediante el promotor inducible VanCC regulado por el factor de transcripción VanR producido constitutivamente bajo la regulación del promotor pLacIQ. Este sistema es activado únicamente en presencia de *ácido vanílico* (**Figura 2**) mediante el uso de un promotor inducible, que permite un control preciso de la expresión génica [7].

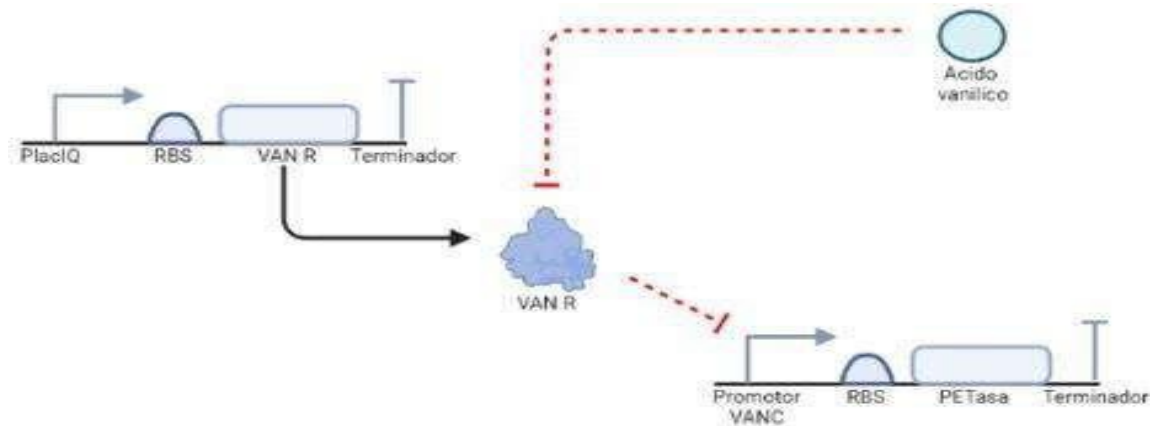


Figura 2. Funcionamiento del gen sintético, línea punteada y resaltada en rojo indica represión del elemento génico. En presencia de la proteína VAN R indica una represión hacia el promotor VANC, pero añadiendo *ácido vanílico* esta proteína se reprime activando el funcionamiento del promotor VANC y la expresión de la proteína PETasa.

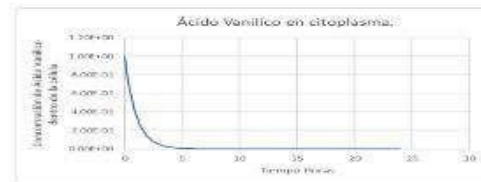
Se calculó un sitio de unión a ribosoma (RBS) mediante la herramienta RBS De NOVO DNA, tomando en cuenta el tamaño total de la proteína incluyendo el péptido señal y se añadió un sitio de corte por trombina y una etiqueta 6XHIS, todo esto para hacer a la proteína seleccionada más versátil y viable de producir para posteriormente experimentar en un futuro. Se realizó una consulta en las bases de datos iGEM y Bionumbers, y una vez teniendo las constantes y variables necesarias para satisfacer el comportamiento del sistema biológico creado se sugirió mediante simulaciones *in silico* la producción de la proteína, en donde se observó mediante la ecuación 1 (A) que a partir de del *ácido vanílico* que entra a la célula, la expresión génica dará inicio permitiendo que el ARNm aumente inicialmente para luego disminuir gradualmente a medida que el ácido es metabolizado por la bacteria, utilizándolo a una concentración de 1M en el medio extracelular por 24 horas. Debido a que no todo el inductor entra a la célula, a partir de la ecuación diferencial 2 (B) se especuló cuanto *ácido vanílico* entraría y se definió mediante la ecuación diferencial 3 (C) cuánto tiempo permanece activo con relación a 24 horas. Posteriormente, con la ecuación diferencial 4 (D) se planteó cuantas copias de ARNm por célula se traducirán (**Figura 3**).



$$\frac{dV_0}{dt} = (-drv)(v_0)$$

Ecuación diferencial 1.

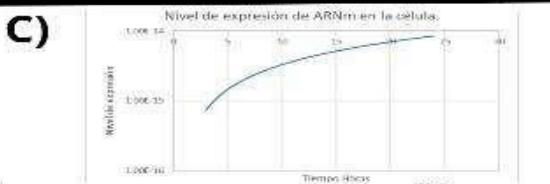
V_0 = Concentración de ácido vanílico fuera de la célula (1 M)
 v = volumen celular (1e-15m³)
 drv = tasa de degradación de Ácido vanílico (0.00001 s)



$$\frac{dV_c}{dt} = \frac{Jmv(V_0 - V_c)}{v}$$

Ecuación diferencial 2.

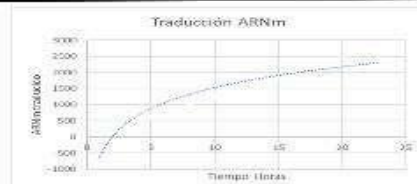
Jmv = flujo del ácido vanílico dentro de membrana (4e-21)
 V_c = Concentración de ácido vanílico dentro de la célula
 v = volumen celular (1e-15m³).



$$\frac{d(mRNA)}{dt} = \frac{(c)(Pops)(Y_{min} + (Y_{max} - Y_{min})) \times \frac{V_c^n}{K^n + V_c^n}}{(V)(N)} - (Y_m)(m)$$

Ecuación diferencial 3.

c = número de copias de plásmido (25)
 $Pops$ = tasa de transcripción promedio de *Escherichia coli* (0.025 kb/s)
 Y_{min} = tasa de transcripción mínima del promotor (2.4e-3)
 Y_{max} = tasa de transcripción máxima del promotor (3)
 k = constante de botella de marionett (18 M) flujo constante dentro de un recipiente
 n = constante de michaelis-menten (5)
 ym = constante de degradación del ARNm (0.0072 kb/s)
 $mRNA$ = nivel de producción.



$$\frac{d(PETasa)}{dt} = (a)(F) - (D)$$

Ecuación diferencial 4.

a = Tasa de traducción de ARNm (122.9 au)
 F = Molaridad Ácido Vanílico (1M)
 D = Tasa de degradación de ARNm (0.0072 kb/s).

Figura 3. Resultados estadísticos del análisis *in silico* mediante uso de ecuaciones diferenciales resueltas en Rstudio y graficado en Microsoft Excel 365.

El resultado indica que en 24 horas habría alrededor de 2,826 copias de ARNm de la PETasa en cada célula. Que, dividido entre el tamaño de la proteína de 306 aminoácidos, resulta en una constante de eficiencia de traducción de 0.11. Si se multiplica este factor por la cantidad de biomasa producida por un cultivo de células bacterianas de *E. coli* (20.5 g/L), obtendremos la densidad de biomasa máxima conseguida en cultivos celulares en medios de cultivo utilizados [8]. Con estos valores se presenta la ecuación en donde la cantidad de biomasa de 20.5 g, multiplicada por la eficiencia de traducción de 0.11 y dividido entre el volumen del cultivo de 3 L, permitiría asignar un valor teórico a nuestra producción de proteína recombinante de 0.75 g/L que, de acuerdo con [9], representa una producción óptima de proteínas recombinantes en *Escherichia coli*. Finalmente, para caracterizar la enzima el docking molecular realizado en UCSF Chimera requirió de la preparación de la proteína seleccionada, añadiendo cargas e hidrógenos para después buscar su ligando PET-termoformado y someterlo a una optimización mediante el software Avogadro. La herramienta UCSF Chimera permitió estudiar la eficacia catalítica de la PETasa sobre el PET termoformado, en donde el resultado indicó una afinidad tal que los valores negativos de Kcal/mol reflejaron una energía de interacción favorable, sugiriendo que el ligando PET tiene una buena capacidad de encaje en el sitio activo de la proteína [10]. El resultado obtenido so dentro del rango de -5.1 a -5.9, demostrando que la interacción química del sitio activo con el ligando es factible y favorable a nuestros diseños.

CONCLUSIONES

Se identificó y seleccionó una PETasa termo resistente a partir de las bases de datos disponibles con la capacidad de degradar el PET a altas temperaturas, esto debido a su capacidad para mantener su estructura y actividad catalítica en condiciones de procesos industriales de tratamiento de PET en donde otras enzimas convencionales podrían desnaturalizarse o perder su actividad. También se diseñó un sistema biológico sintético para la producción recombinante de la PETasa termo resistente seleccionada utilizando un promotor inducible por *ácido vanílico* como un método de regulación génica, facilitando su manipulación y aplicación en diversos entornos a nivel experimental. Además, se evaluó *in silico* la efectividad de producción de la PETasa propuesta mediante un modelo matemático que permitió predecir la manera en la que el inductor utilizado sería absorbido por la bacteria para permitir el proceso de transición del gen y la traducción de la proteína recombinante. Finalmente, se evaluó *in silico* la actividad catalítica de la PETasa mediante un análisis de interacción molecular entre la enzima y el PET termoformado, sugiriendo una afinidad idónea y estabilidad en la unión entre el ligando y la proteína. Estos resultados podrían indicar una interacción favorable entre el PET y la PETasa, mostrando que tendría la capacidad de reconocer y unirse específicamente al PET para degradación y reciclaje. De esta manera, se puede concluir que se diseñó y evaluó un sistema biológico *in silico* para la producción de una PETasa termo resistente en *Escherichia coli* regulado en presencia de *ácido vanilínico* para la degradación de *polietileno tereftalato* (PET) termoformado de manera eficiente, sugiriendo así una posible alternativa al tratamiento previo al reciclaje de dicho plástico de una manera amigable con el medio ambiente.

REFERENCIAS

1. Audie, J. y Scarlata, S. (2007). Una nueva función de energía libre empírica que explica y predice las afinidades de unión proteína-proteína. *Química biofísica*, 129 (2-3), 198-211.
2. Cortés-Arriagada, D. (2021). Elucidating the co-transport of bisphenol, A with polyethylene terephthalate (PET) nanoplastics: A theoretical study of the adsorption mechanism. *Environmental Pollution*, 270, 116192.
3. Hiraga, K., Taniguchi, I., Yoshida, S., Kimura, Y., & Oda, K. (2019). Biodegradation of waste PET. *PUBMED*, 20(11). <https://doi.org/10.15252/embr.201949365>
4. Mergulhão, F. J. M., Summers, D. K., & Monteiro, G. A. (2005). Recombinant protein secretion in *Escherichia coli*. *Biotechnology advances*, 23(3), 177-202.
5. Nakamura, A., Kobayashi, N., Koga, N., & Iino, R. (2021). Positive charge introduction on the surface of thermostabilized PET hydrolase facilitates PET binding and degradation. *ACS Catalysis*, 11(14), 8550-8564.
6. Prata, J. C., & Dias-Pereira, P. (2023). Microplastics in terrestrial domestic Animals and Human Health: implications for food security and food safety and their role as sentinels. *Animals*, 13(4), 661. <https://doi.org/10.3390/ani13040661>
7. Sevilla, M. E., Garcia, M. D., Pérez-Castillo, Y., Armijos-Jaramillo, V., Casado, S., Vizueté, K., Debut, A., & Cerda-Mejía, L. A. (2023). Degradation of PET bottles by an engineered *Ideonella Sakaiensis* PETASE. *Polymers*, 15(7), 1779. <https://doi.org/10.3390/polym15071779>
8. Soong, Y. V., Sobkowicz, M. J., & Xie, D. (2022). Recent Advances in Biological Recycling of Polyethylene Terephthalate (PET) Plastic Wastes. *Bioengineering*, 9(3), 98. <https://doi.org/10.3390/bioengineering9030098>
9. Trassaert, M., Vandermies, M., Carly, F., Denies, O., Thomas, S., Fickers, P., & Nicaud, J. M. (2017). New inducible promoter for gene expression and synthetic biology in *Yarrowia lipolytica*. *Microbial Cell Factories*, 16, 1-17.
10. Puskeiler R, Kaufmann K, Weuster-Botz D. (2005) Development, parallelization, and automation of a gas-inducing milliliter-scale bioreactor for high-throughput bioprocess design (HTBD). *Biotechnol Bioeng*. 89(5):512-23.

DESARROLLO DE COMUNIDADES NITRIFICANTES Y DESNITRIFICANTES A PARTIR DE UN SIMBIONTE DE LARVAS DE *TENEBRIO MOLITOR*.

DEVELOPMENT OF NITRIFYING AND DENITRIFYING COMMUNITIES FROM A *TENEBRIO MOLITOR* LARVAL SYMBIONT.

Daniela García Tijerina¹, Pasiano Rivas García¹, José Julián Cano Gómez¹, Héctor Javier Amézquita García^{1*}

¹Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Departamento de Ingeniería Química, Ave. Universidad S/N, Cd. Universitaria, San Nicolás de los Garza N.L. México, C.P. 66455.

* hector.amezquitagr@uanl.edu.mx

RESUMEN. Las larvas de *Tenebrio molitor* se han estudiado dado su capacidad de masticar plástico y degradarlo parcialmente al hacerlo pasar por su intestino. Sin embargo, el rol de las comunidades microbianas en la microbiota intestinal es ambiguo. Este estudio se encarga de simular ingenierilmente que tipos microorganismos crecen en biorreactores inoculados con un simbiote de larvas de *Tenebrio molitor* (26 g de macerado) y alimentados continuamente con un medio mineral libre de fuente de carbono. Cuatro biorreactores, uno sin soporte microbiano (R1, control) y tres empacados con poliestireno (R2, 1.78 g), poliuretano (R3, 2.79 g) y polietileno (R4, 3.68 g), se trabajaron en cuatro etapas experimentales: ETAPA 1 aerobia con TRH de 24 h; ETAPA 2 a los biorreactores aerobios se añaden tres biorreactores anaerobios en serie con TRH de 48 h, denominados R2-A, R3-A y R4-A; ETAPA 3 se alimenta etanol como fuente de carbono exógena a 1000 mg DQO/L a los biorreactores aerobios y ETAPA 4 el etanol se alimenta directamente a los biorreactores anaerobios.

En la ETAPA 1 se observó un incremento gradual en la concentración de nitratos hasta un nivel estable de 160 mg N-nitratos/L, aproximadamente, evidenciando un proceso nitrificante. En la ETAPA 2 se observó una desnitrificación parcial de aproximadamente el 14% de los nitratos que ingresaban de los biorreactores aerobios. En la ETAPA 3, se observó un consumo total de la fuente de carbono que no afectó el proceso nitrificante (160 mg N-nitratos/L). Por último, en la ETAPA 4 se observó una disminución de la concentración de nitratos hasta niveles por debajo de 5 mg/L, indicando un proceso desnitrificante. Globalmente, el porcentaje en peso de los plásticos aumentó un 2, 11 y 80% en el poliestireno, poliuretano y polietileno debido a la deposición de biopelícula, pero no a un proceso de biodegradación del plástico.

Palabras clave: *simbiote; biorreactor; nitrificación; desnitrificación; plástico*

ABSTRACT. Larvae of the genus *Tenebrio molitor* were studied for their ability to chew plastic and partially degrade it by passing it through their intestines. However, the role of microbial communities in the intestinal microbiota is ambiguous. This study simulates engineering conditions under which microorganisms will grow in bioreactors inoculated with a symbiont of *Tenebrio molitor* larvae (26 g of macerate) and continuously fed with a mineral medium free of carbon sources. Four bioreactors, one without microbial support (R1, control) and three packed with polystyrene (R2, 1.78 g), polyurethane (R3, 2.79 g), and polyethylene (R4, 3.68 g), were worked in four experimental stages: STAGE 1 aerobic with 24-h HRT; STAGE 2 three anaerobic bioreactors (TRH of 48 h) were added in series after aerobic bioreactors, namely R2-A, R3-A and R4-A; STAGE 3 ethanol was fed as an exogenous carbon source at 1000 mg COD/L to the aerobic bioreactors and STAGE 4 ethanol was fed directly to the anaerobic bioreactors.

In STAGE 1, a gradual increase in the nitrate concentration was observed up to a stable level of approximately 160 mg N-nitrates/L, evidencing a nitrifying process. In STAGE 2, partial denitrification of approximately 14% of the nitrates entering the aerobic bioreactors was observed. In STAGE 3, a total consumption of the carbon source was observed that did not affect the nitrifying process (160 mg N-nitrates/L). Finally, in STAGE 4 a decrease in the nitrate concentration was observed to levels below 5 mg/L, indicating a denitrifying process. Globally, the percentage by weight of plastics increased by 2, 11, and 80% in polystyrene, polyurethane, and polyethylene due to biofilm deposition, but not to a biodegradation process of the plastic.

Keywords: *symbiont; bioreactor; nitrification; denitrification; plastic*

INTRODUCCIÓN

Las larvas de *Tenebrio molitor* se han reportado por su capacidad para degradar plásticos parcialmente al masticarlos y pasarlos por su intestino donde la microbiota intestinal presente secreta enzimas capaces de romper enlaces carbono-carbono y con ello depolimerizar parcialmente a los plásticos de los cuales estas se alimentan [1]. Sin embargo, no hay en la literatura reportes de que este mismo sistema de biodegradación/biotransformación se estudien ingenierilmente bajo condiciones controladas como las de un biorreactor.

Una de las principales desventajas de trabajar con plásticos como los que comúnmente se consumen por la sociedad y que actualmente representan un gran problema de acumulación de basura plástica es que usualmente son plásticos expandidos, con burbujas de aire u otros gases en su interior, lo cual los vuelve menos densos que el agua y tienden a flotar. Al no haber un contacto óptimo entre el plástico y el medio mineral circundante, los microorganismos se ven limitados y no pueden aprovechar al máximo la superficie plástica. Una solución a este problema puede ser el uso de reactores empacados con los plásticos fijos en su interior, para lo cual tampoco existen referencias sobre su estudio.

Por último, para demostrar que los microorganismos tienen la capacidad de biotransformar al plástico (depolimerización parcial) o incluso biodegradarlo (oxidación completa a CO₂) primero se tiene que trabajar en un medio mineral que no utilice una fuente de carbono externa diferente a los plásticos. Si hubiera una biodegradación o biotransformación de los plásticos, entonces teóricamente se liberarían compuestos orgánicos como metabolitos intermediarios que servirían como fuente de carbono para otros microorganismos dentro de la comunidad microbiana. Para esto es crucial que el medio mineral no provea una fuente de carbono exógena, pero si una fuente de nitrógeno y algunos minerales esenciales. Para este fin se propone el uso del medio descrito en el "Standard practice for determining resistance of plastics to bacteria" [2], que consiste de las siguientes sustancias disueltas en 1 L de solución: KH₂PO₄, K₂HPO₄, MgSO₄*7H₂O, NH₄NO₃, NaCl, FeSO₄*7H₂O, ZnSO₄*7H₂O, MnSO₄*H₂O en cantidades 0.7, 0.7, 0.7, 1.0, 0.005, 0.002, 0.002 y 0.001 g, respectivamente.

El objetivo de este trabajo es tratar de reproducir en biorreactores las condiciones químicas e ingenieriles que se dan en el intestino de una larva de *Tenebrio molitor* para averiguar el tipo de microorganismos que crecen en ambientes aerobios y anaerobios en un medio mineral sin fuente de carbono. Los resultados de este trabajo serán importantes en el desarrollo de biotecnologías que sean capaces de biotransformar o biodegradar los plásticos de una forma más rápida y sustentable.

METODOLOGÍA

Cuatro biorreactores de vidrio de 500 mL fueron estudiados cada uno inicialmente con un inóculo de 26 ± 0.1 g de larvas de *Tenebrio molitor* previamente maceradas en un mortero. El reactor control denominado R1, no contenía material polimérico como soporte microbiano. Los demás biorreactores fueron empacados con 8 cubos de plástico con un peso global de 1.78 g de PS, 2.79 g de PU y 3.86 g de PE como tal se muestra en la **Figura 1**, correspondientes a los reactores R2, R3, R4, respectivamente. El tiempo de retención hidráulica (TRH) de R1, R2, R3 y R4 fue de 24h y operaron en condiciones aerobias. Reactores adicionales conectados en serie a los reactores aerobios y denominados R2-A, R3-A y R4-A, operaron en condiciones anaerobias a TRH de 48h y fueron empacados con 7.70 g PS, 10.42 g PU, 8.38 g PE, respectivamente.

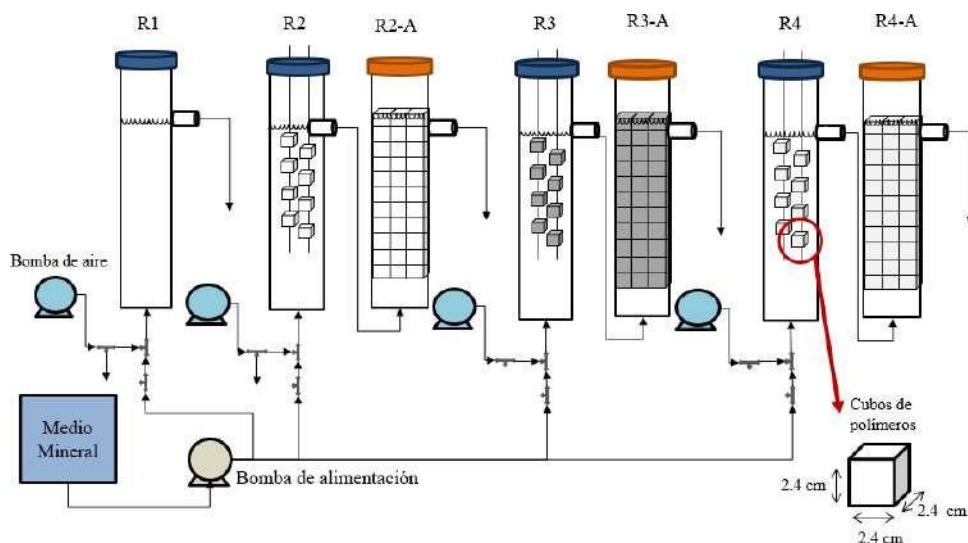


Figura 1. Esquema experimental de la remoción de nitrógeno en reactores empacados.

A continuación, se describen las etapas experimentales:

ETAPA 1: El medio mineral libre de fuente de carbono fue alimentado de forma aerobia durante 4 días a los reactores R1, R2, R3 y R4. ETAPA 2: Se conectaron en serie los reactores anaerobios R2-A, R3-A y R4-A tal como se muestra en la **Figura 1**, durante así 13 días. ETAPA 3: Alimentación de etanol como fuente exógena de carbono a concentración de 1000 mg DQO/L, durante 7 días. Durante esta etapa el etanol pasó primero por los reactores aerobios (R1, R2, R3 y R4) y después por los anaerobios (R2-A, R3-A y R4-A). ETAPA 4: los reactores aerobios R2, R3 y R4 fueron deshabilitados para promover el paso de la materia orgánica (1000 mg DQO/L) directamente a la sección anaerobia (R2-A, R3-A y R4-A), mientras que el reactor R1 dejó de recibir aireación, cambiando así a modo anaerobio. Esta última etapa se mantuvo por 7 días.

A lo largo de las 4 etapas se realizaron mediciones periódicas de pH, DQO (colorimetría con uso de dicromato como oxidante) y concentración de $N-NO^-$ (espectrofotometría UV-vis). [3]

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Los resultados que se describen en este trabajo son producto del uso de un medio mineral libre de fuente de carbono, tal como se describe en la sección experimental. El objetivo original fue el de degradar parcial o totalmente a los plásticos con el simbiote de *Tenebrio molitor*, tal como fue reportado en experimentos en lote en previos estudios [1], sin embargo, aún no se conocía el resultado de trabajar este mismo medio en reactores de flujo continuo, tal como se describe a continuación.

En la **Figura 2** pueden observarse los principales cambios en la concentración de N-NO_3^- . Otras variables como el pH y la DQO se mantuvieron relativamente estables a lo largo del experimento, por lo que sólo se mencionan resultados concretos en el texto.

En la ETAPA 1 se expuso el inóculo a un ambiente aerobio con un TRH de 24 horas. Se observó un incremento en la concentración de nitrógeno en forma de nitratos (N-NO_3^-) en el efluente de los biorreactores a partir del día 1 hasta un valor de 160 mg $\text{N-NO}_3^-/\text{L}$, atribuido a un proceso de nitrificación del amonio presente en el medio mineral. Esto ocurrió principalmente en aquellos biorreactores empacados con plásticos R2, R3 y R4, a diferencia del R1 donde esto ocurrió de manera gradual. Este resultado puede deberse a la formación de biopelícula en los soportes microbianos poliméricos, lo cual promueve la transferencia de masa debido a la dispersión de las células en una mayor área superficial.

La DQO observada inicialmente en la ETAPA 1 se debió al inóculo inicialmente presente, sin embargo, la concentración de DQO decayó hasta valores indetectables después del día 4, indicando el lavado de la materia orgánica suspendida. Los valores de pH se mantuvieron estables entre un valor de 7.20 ± 0.3 a lo largo de la ETAPA 1.

En la ETAPA 2 los reactores aerobios fueron complementados con su parte anaerobia durante un periodo de 16 días. Los reactores aerobios (R1, R2, R3 y R4) siguieron produciendo nitratos a una concentración de 173.6 mg NO_3^-/L , mientras que en la parte anaerobia adjunta (R2-A, R3-A y R4-A) se observó un decremento en la concentración de 132.7 mg NO_3^-/L a la salida de estos reactores, resultado de un proceso desnitrificante parcial. Esta puede deberse debido al flujo de materia orgánica de los reactores aerobios a los anaerobios promoviendo el crecimiento de los desnitrificantes heterótrofos. [4]

La ETAPA 3 presentó un decaimiento en la concentración de nitratos simultáneamente en los reactores aerobios y anaerobios, esto siendo resultado de la presencia de etanol como fuente de carbono exógena en el medio. Esta disminución fue de 25% nuevamente señalando un proceso desnitrificante. Esto puede explicarse por el desarrollo de comunidades microbianas desnitrificantes que se alimentaba de la fuente de carbono adicionada (heterótrofas). [4,5]

Finalmente, se demostró la presencia de microorganismos desnitrificantes al eliminar la parte aerobia del proceso en la ETAPA 4 y alimentar directamente el etanol a los biorreactores R1, R2-A R3-A y R4-A. Bajo estas condiciones de presencia de materia orgánica y nitratos se observó un proceso desnitrificante basados en una disminución de la concentración de nitratos de 122.3 a 0.65 mg $\text{N-NO}_3^-/\text{L}$, y un aumento de pH de 6.5 a 7.2. Cualitativamente, la presencia de burbujas se volvió más notoria en la superficie de los soportes microbianos poliméricos.

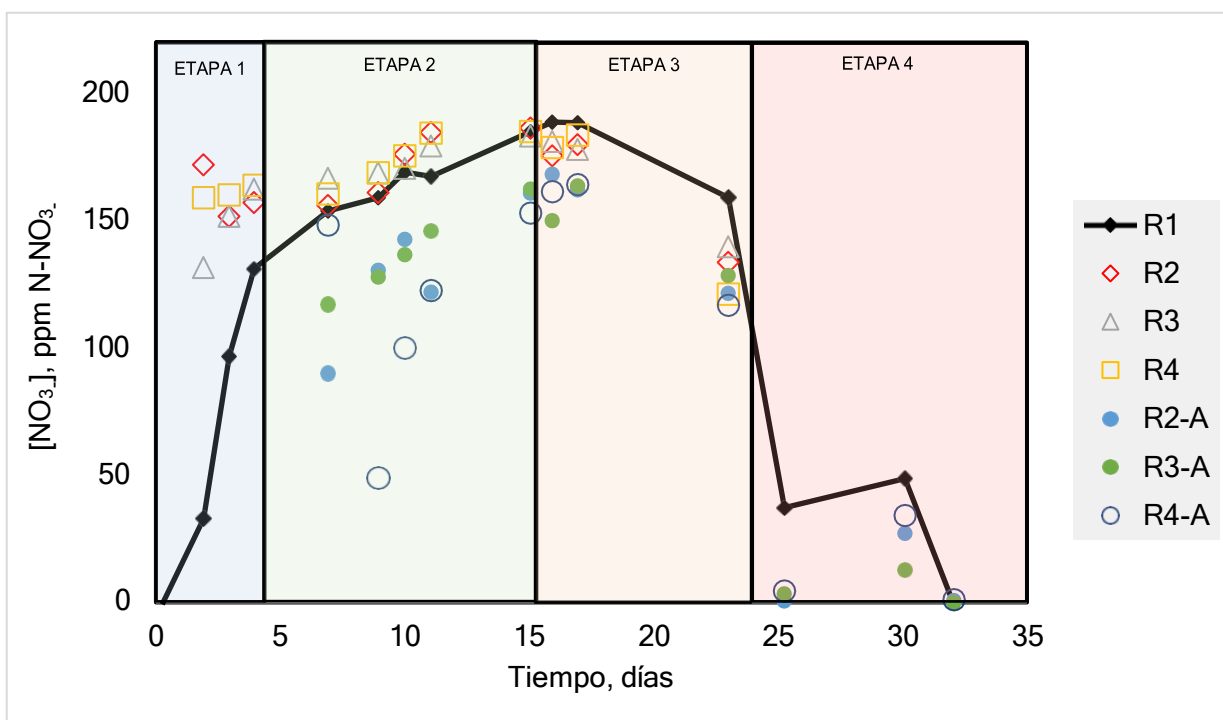


Figura 2. Monitoreo de la concentración de N- NO_3^- en cada biorreactor.

CONCLUSIONES

En las etapas experimentales 1 y 2 (condiciones aerobias) se demostró que el inóculo del simbionte de larvas de *Tenebrio molitor* resultó en un proceso nitrificante en el cual el amonio del medio mineral se transformó a nitratos. Bajo condiciones anaerobias sucedió una desnitrificación parcial durante la etapa 2 del experimento debido a la baja concentración de materia orgánica. Al incrementar la materia orgánica en la etapa 3 se pudo observar que el proceso nitrificante se mantuvo, aunque el etanol era consumido por completo en los reactores aerobios. Al retirar esta parte aerobia en la ETAPA 4, la materia orgánica junto con la presencia de nitratos resultaron en el desarrollo de microorganismos desnitrificantes que disminuyeron la concentración de N-nitratos a niveles por debajo del límite de detección. En su conjunto se observó el desarrollo de comunidades microbianas nitrificantes y desnitrificantes a partir del inóculo de larvas maceradas de *Tenebrio molitor*. En este estudio no se observó la degradación/biotransformación de los plásticos utilizados, tanto de forma cualitativa (cambios físicos o deformaciones en los cubos plásticos) como cuantitativamente (sin decremento en la masa de los soportes). Globalmente, los resultados indican que el uso de inóculos como el simbionte de larvas de *Tenebrio molitor* en reactores de flujo continuo llevan al desarrollo de comunidades microbianas nitrificantes y desnitrificantes bajo condiciones aerobias y anaerobias, respectivamente.

REFERENCIAS

[1] Yang Y, Yang J, Wu WM, Zhao J, Song Y, Gao L, Yang R, Jiang L. Biodegradation and mineralization of polystyrene by plastic-eating mealworms: Part 2. Role of gut microorganisms. *Environmental Science and Technology*, 49, 2015, 12087-12093.

[2] ASTM International. ASTM G22-76, Standard practice for determining resistance of plastics to bacteria; ASTM International. West Conshohocken, PA, 1996.

[3] Baird R, Eaton A, y Rice E. Standard methods for the examination of water and wastewater. 23va Ed. Editorial: American Publica Health Association. p 484 y 587.

[4] Bruce E. Rittman y Perry L. McCarthy. Environmental biotechnology: principles and applications. 2da Ed. Editorial: Mc Graw Hill. 2020 p 501-506.

[5] Huang F, Pan L, He Z, Zhang M, y Zhang M. Identification, interactions, nitrogen removal pathways and performances of culturable heterotrophic nitrification-aerobic denitrification bacteria from mariculture water by using cell culture and metanogenomics. Science of the total environment, 732, 139268, 2020.



VII CONGRESO INTERNACIONAL DE
QUÍMICA E INGENIERÍA VERDE

EJE TEMÁTICO 2

CIENCIAS FARMACÉUTICAS Y BIOMEDICINA



INCORPORACIÓN DE LA LACASA CU1 EN NANOPARTÍCULAS A BASE DE POLIMETACRILATO

INCORPORATION OF CU1 LACCASE INTO POLYMETHACRYLATE-BASED NANOPARTICLES

Joel Horacio Elizondo-Luévano ^{1,2}, Samuel Alfredo Soto-Vázquez ¹, Juanita Guadalupe Gutiérrez-Soto ², Rocío Castro-Ríos ³, Marsela Garza-Tapia ³, Abelardo Chávez-Montes ^{1,*}.

¹Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Biológicas, Departamento de Química, Ave. Universidad S/N, Cd. Universitaria, San Nicolás de los Garza N.L. México, C.P. 66455.

²Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Agronomía, Ave. Francisco I. Madero S/N, Ex Hacienda el Cañada, Cd. Gral. Escobedo N.L. México, C.P. 66050.

³Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Medicina, Departamento de Química Analítica, Ave. Dr. José Eleuterio González 235, Mitras Centro, Monterrey N.L. México, C.P. 66460.

*e-mail del autor de correspondencia / e-mail correspondence autor
abelardo.chavezmn@uanl.edu.mx

RESUMEN. Las enzimas modificadoras de lignina (Lacasas), producidas por el hongo *Trametes maxima*, pueden degradar celulosas, colorantes y compuestos xenobióticos, pero aún son poco funcionales en remediación a gran escala por las condiciones adversas de los efluentes (quelantes, sales, detergentes, etc.) que inhiben su acción. Una alternativa para preservar su actividad es la inmovilización, en nanopartículas poliméricas (NP). **Objetivo:** Inmovilización de la lacasa CU1 (LCU1) de *T. maxima* en NP. **Metodología:** La nanoencapsulación de la enzima se realizó mediante la técnica de doble emulsión-evaporación con el copolímero catiónico Eudragit RL-PO. El tamaño de las NP y su grado de homogeneidad (PDI) se caracterizó por espectroscopía de correlación fotónica, la morfología de las NP se determinó mediante microscopía electrónica de barrido (MEB), la eficiencia de encapsulación (EE) fue determinada por la oxidación del sustrato 2,6-Dimetoxifenol (DMPO). Como prueba de estabilidad de la enzima incorporada en NP y libre fue sometida a pH 2/1h. **Resultados:** Se obtuvieron NP de 200 - 500 nm, PDI de 0.24 ± 0.02 , con morfología esférica y una EE de hasta un 75% de enzima inmovilizada. La prueba de estabilidad demostró un decremento en la estabilidad de hasta el 14 % para el caso de la enzima inmovilizada en las NP y de hasta el 80 % para el caso de la enzima libre. **Conclusiones:** Mediante el uso del copolímero Eudragit RL-PO y empleando la técnica de doble emulsión-evaporación se logró la inmovilización de la LCU1 de *T. maxima* en NP con de tamaños estables y homogéneos, así como un alta EE. Esto abre una posibilidad del uso de lacasas en el área ambiental, para la captura de contaminantes industriales.

Palabras clave: Lacasa, Enzimas, Doble emulsión, Nanopartículas, *Trametes máxima*.

ABSTRACT. Lignin-modifying enzymes (Laccases), produced by the fungus *Trametes maxima*, can degrade celluloses, dyes, and xenobiotic compounds but are still not very functional in large-scale remediation due to the adverse conditions of the effluents (chelates, salts, detergents, etc.) that inhibit their action. An alternative to preserve their activity is immobilization in polymeric nanoparticles (NPs). **Objective:** Immobilization of CU1 laccase (LCU1) from *T. maxima* in NPs. **Methodology:** Nanoencapsulation of the enzyme was carried out by the double emulsion-evaporation technique with the cationic copolymer Eudragit RL-PO. The size of the NPs and their degree of homogeneity (PDI) was characterized by photon correlation spectroscopy, the morphology of the NPs was determined by scanning electron microscopy (SEM), the encapsulation efficiency (EE) was determined by oxidation of the substrate 2,6-Dimethoxyphenol (DMPO). As a stability test,

the enzyme incorporated in NP and the free enzyme was subjected to pH 2/1h. **Results:** NPs of 200 - 500 nm, PDI of 0.24 ± 0.02 , with spherical morphology, and an EE of up to 75% of immobilized enzyme were obtained. The stability test showed a decrease in stability of up to 14 % for the case of the enzyme immobilized in NPs and up to 80 % for the case of the free enzyme. **Conclusions:** Through the Eudragit RL-PO copolymer and using the double emulsion-evaporation technique, the immobilization of the LCU1 of *T. maxima* in NPs with stable and homogeneous sizes was achieved, as well as a high EE. This opens a possibility for the use of laccases in the environmental area, for the capture of industrial pollutants.

Keywords: Laccase, Enzyme, Double emulsion, Nanoparticles, *Trametes maxima*.

INTRODUCCIÓN

Las enzimas, son biocatalizadores clave para nuevos procesos industriales debido a su facilidad de producción y especificidad de sustrato [1]. Se sabe que los hongos basidiomicetos causantes de la podredumbre blanca como *Trametes máxima* CU1 son productores de enzimas ligninolíticas [2], como las lacasas (LCU1). La enzima lacasa forma parte de un grupo de enzimas denominadas polifenoloxidasas las cuales catalizan la reducción de dos electrones del oxígeno molecular acoplada a la oxidación de cuatro hidrógenos del sustrato para formar agua [3]. Las lacasas se ha utilizado en el tratamiento de contaminantes ambientales como tintes en la industria textil, modificación de materiales lignocelulósicos en la industria papelera y la síntesis de nuevos antibióticos en la industria farmacéutica [4]. El uso de enzimas inmovilizadas presenta varias ventajas sobre la aplicación de enzimas libres, ya que pueden reutilizarse, manteniendo a menudo la actividad durante grandes periodos de tiempo [5,6]. El atrapamiento consiste en la inclusión de la enzima en una matriz polimérica orgánica o inorgánica por lo cual se han utilizado micro y nanopartículas (NP) entéricas para mejorar la biodisponibilidad de las enzimas [7]. Por lo tanto, el objetivo del presente estudio fue inmovilizar la lacasa LCU1 producida por *T. maxima* CU1, mediante la técnica de evaporación de disolvente de doble emulsión, empleando el polímero sensible al pH Eudragit® RL-PO; y evaluar su estabilidad al pH *in-vitro*, con el fin de aplicar estas NP para la liberación sitio-específica dependiente del pH en el tracto gastrointestinal.

METODOLOGÍA

Reactivos: Los solventes y reactivos utilizados fueron de grado analítico y se adquirieron en Sigma-Aldrich® (Merck KGaA, Darmstadt, Alemania). El copolímero Eudragit® RL-PO se adquirió en Helm México (© HELM AG, Hamburgo, Alemania). La extracción de la lacasa CU1 (LCU1) de *T. maxima* CU1 esta previamente documentada en <https://doi.org/10.1139/cjas-2016-0150> [8].

Inmovilización de la LCU1 en NP: Las NP se obtuvieron mediante un método de doble emulsión (agua/fase orgánica/agua) modificado por evaporación-solvente [9]. Se añadieron 300 µL del extracto enzimático acuoso (0.2234 U/mL) a 6 mL de la fase orgánica, compuesta por 300 mg del copolímero Eudragit® RL-PO y 6 mL de sistema disolvente diclorometano. Para preparar la emulsión, la mezcla se homogeneizó por sonicación durante 2 minutos (Ultrasonic Branson 2510MT, Merck KGaA, Darmstadt, Alemania). A continuación, se añadió la primera emulsión (W1/O) en 12.5 mL de la fase acuosa externa que contenía 6.5 mL de un sistema disolvente (4,12 mL de etanol: 1.7 mL de alcohol isopropílico: 0.68 mL de diclorometano) y 6 mL de alcohol polivinílico acuoso (PVA) al 8% p/v. Las fases formadas se agitaron a 500 rpm durante 15 min (Eurostar Power-B Ika® Werke, Merck KGaA, Darmstadt, Alemania). Por último, se evaporó el disolvente orgánico de la emulsión a presión reducida (60 rpm / 25 °C.) en un rotaevaporador (Heidolph Rotatory Evaporator Laborota 4003, Merck KGaA, Darmstadt, Alemania).

Tamaño y morfología: El tamaño medio de las NP en nm y la polidispersidad (PDI) se determinaron mediante espectroscopia de correlación de fotones (ECF) en un Zetasizer Nano-Zs90 (Malvern, Worcestershire, U.K.), las mediciones se realizaron tras la dispersión acuosa de las NP (en agua bidestilada) [10]. En cada caso, se registró la media de tres mediciones separadas. El tamaño en nm y la morfología de las NP se confirmó mediante microscopia electrónica de barrido a 2 kV (Hitachi U8000, Hitachi, Kyoto, Japón). Para ello, se montaron y desecaron las muestras diluidas (1:100) [7].

Eficacia de la encapsulación: Para determinar la LCU1 inmovilizada en las NP las formulaciones se centrifugaron a 25000 rpm / 4 °C durante 30 min. Se estimó de manera indirecta la LCU1 encapsulada en las NP y la no encapsulada en los sobrenadantes con la oxidación del sustrato DMPO. El análisis cuantitativo de la LCU1 se realizó comparándolo con una curva de calibración de lacasa en un espectrofotómetro UV/Vis (GENESYS 10S, Thermo Scientific Inc., Waltham, MA, EE.UU.). La eficiencia de encapsulación (% EE) se calculó de la siguiente manera (Ec. 1):

$$EE \% = \frac{LCU1_i - LCU1_s}{LCU1_i} \times 100 \quad \text{Ec.1}$$

donde LCU1_i corresponde a la quercetina inicial y LCU1_s corresponde a la LCU1 remanente en el sobrenadante después de la centrifugación [11].

Efectos del pH sobre la actividad y la estabilidad enzimática: El efecto del pH sobre la actividad de la LCU1 se determinó en el intervalo 2 (ácido) y 7 (neutro) incubando la enzima a 25 °C en DMP (ajustados con tampón fosfato 100 mM) durante 1 h. Los datos de los gráficos aparecen como actividad relativa en función del pH durante 1 min. La actividad enzimática residual se calculó por comparación con muestras no preincubadas.

Análisis estadístico: Todos los resultados se expresaron como valores medios de tres muestras ± desviación estándar (DE). Se estableció como significancia estadística un nivel de probabilidad de $p < 0.05$ (5%). Se utilizó un ANOVA unidireccional y se aplicó la prueba de Tukey para determinar la diferencia estadística entre tratamientos utilizando el software SPSS Statistics versión 24.0 (IBM Inc. Armonk, NY, EE.UU.).

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Desarrollo de NP, morfología y EE de la LCU1

Las NP presentan tamaño de 200 nm hasta 500 nm (tabla I) con una dispersión (PDI) en tamaño poblacional de 0.24. En la figura 1 se muestra una EE = 75% ($y = 0.000028x + 0.0036$) y una $R^2 = 0.9959$. En un estudio realizado por Ghandi, et. al. (2014) obtuvieron una EE semejante, utilizando el mismo polímero, pero utilizando la técnica de inmovilización por nanoprecipitación [12].

Tabla I. Tamaño de las NP con la LCU1 encapsulada PDI y EE% de LCU1.

Tamaño (nm)	PDI	EE %
200 - 500	0.24 ± 0.02	75

nm: nanómetros; PDI: índice de polidispersidad; EE% porcentaje de encapsulación.

Las cinéticas de oxidación de DMPO de NP con enzima incorporada, pellet y sobrenadante (figura 2) respaldan el alto porcentaje de EE, estos indica la posibilidad de aplicar las NP con LCU1 inmovilizada como alternativa para el tratamiento biológico de la transformación de colorantes para la descontaminación ambiental [2]. Así mismo en la figura 3 se muestra la morfología de las NP con la LCU1 inmovilizada y determinada mediante MEB. Diversas investigaciones han demostrado que las aplicaciones industriales de las enzimas pueden mejorar gracias a su inmovilización, que a menudo permite aumentar la estabilidad de la

enzima y minimizar los tiempos de difusión del sustrato en cascadas multienzimáticas [13]. Además, la inmovilización de enzimas ha avanzado gracias al descubrimiento de que las superficies de las NP suelen ser capaces de potenciar la actividad de la enzima unida [14]. Por lo cual el método aplicado en la presente investigación y conforme a los resultados se pudo obtener un proceso eficiente para la estabilidad y resistencia de la enzima LCU1 en comparación de un sistema libre, lo cual a su vez potencializa la actividad de esta y en consecuencia una mayor efectividad en la reutilización de las enzimas.

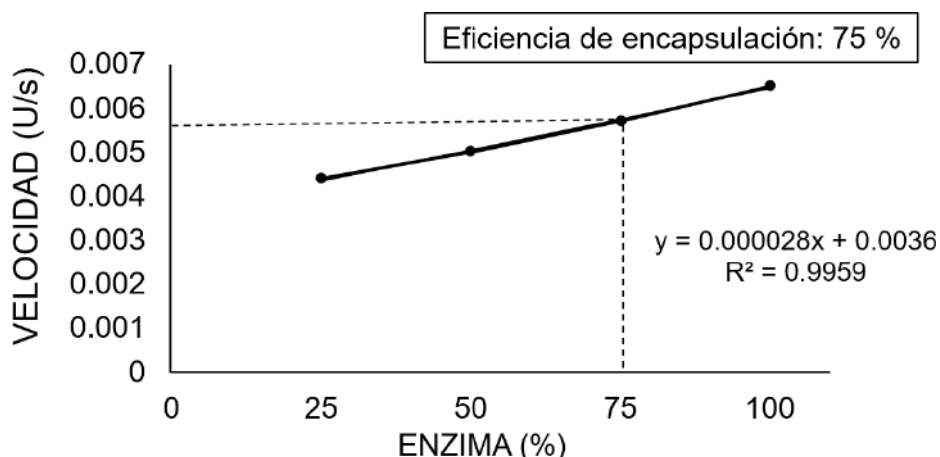


Figura 1. Curva de calibración de la LCU1. Se muestra el porcentaje (%) de encapsulación, así como la ecuación de la recta y el coeficiente de determinación (R^2). U/s: Unidad de actividad enzimática sobre segundo.

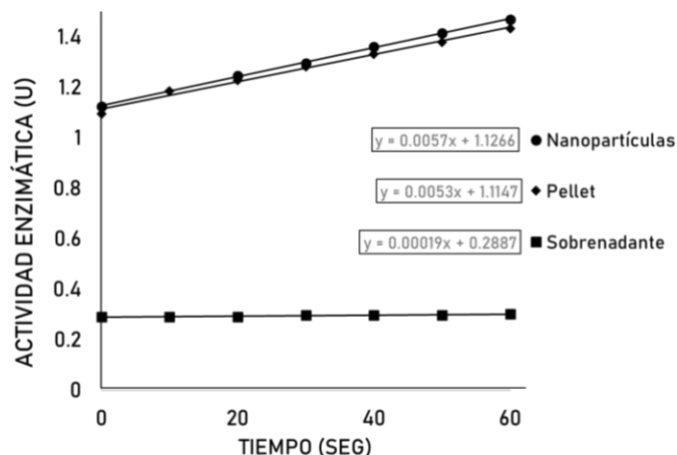


Figura 2. Cinéticas de oxidación del DMPO de enzima en NP, pellet y sobrenadante. U: Unidad de actividad enzimática.

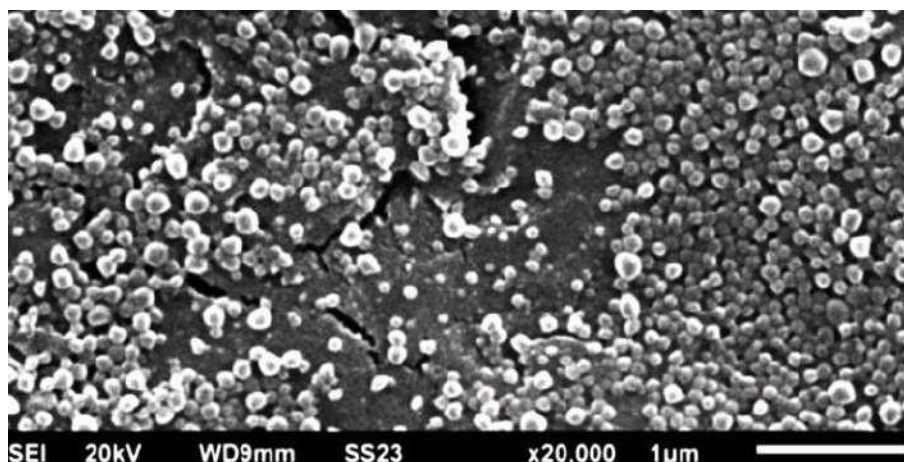


Figura 3. Morfología de las NP mediante MEB a 20 kV y escala de 1 micrómetro (μm).

Efectos del pH en la estabilidad enzimática

En la figura 3 se aprecia el efecto del pH ácido (2) y neutro (7) sobre la estabilidad de la LCU1 de manera libre o en NP. Estadísticamente no hubo diferencia significativa entre la enzima encapsulada evaluada a pH 2 y la enzima evaluada a pH 7 ya sea de manera libre o encapsulada en NP. Sin embargo, se observa que la enzima perdió su estabilidad cuando fue evaluada a pH 2 de manera libre, lo que demostró la eficiencia de la inmovilización de la enzima utilizando el copolímero Eudragit® RL-PO. En un estudio realizado por Si et. al. (2015) obtuvieron una actividad del 40 % de la lacasa cuando se evaluó a pH 2/1h [15], confirmando que el pH ácido reduce su actividad, por lo que resulta prometedora la protección que otorgar el polímero a la enzima frente a condiciones adversas.

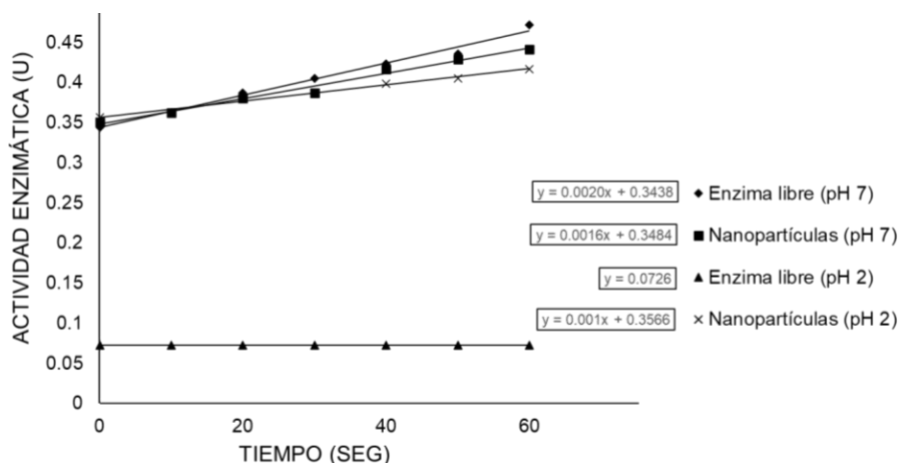


Figura 4. Se ilustra la estabilidad de LCU1 libre y en NP a pH 2 y 7 respectivamente. Se muestra la Actividad enzimática (U) y el tiempo de incubación en minutos.

CONCLUSIONES: Se logró encapsular la lacasa CU1 de *T. máxima* en hasta un 75%, además las NP presentaron tamaño, PDI y morfologías homogéneas. La EE demostró la eficacia del método. La prueba de estabilidad al pH demostró resultados prometedores que reflejan la capacidad protectora del polímero Eudragit® RL-PO hacia la enzima.

REFERENCIAS

1. Brijwani, K.; Rigdon, A.; Vadlani, P. V. Fungal Laccases: Production, Function, and Applications in Food Processing. *Enzyme Res.* **2010**, *2010*, 1-10, doi:10.4061/2010/149748.

2. Sánchez-López, M.I.; Guerra, G.; Hechevarria, Y.; Domínguez, O.; Manzano, A.M.; Torres, G.; Arguelles, J.; Ramos-Leal, M. Estabilidad y actividad enzimática del crudo enzimático del cultivo de *Trametes maxima*, decoloración *in vitro* de colorantes sintéticos. *Rev. CENIC. Ciencias Biológicas* **2010**, *41*, 1-13.
3. Niño-Medina, G.; Gutiérrez-Soto, G.; Urías-Orona, V.; Hernández-Luna, C.E. Effect of laccase from *Trametes maxima* CU1 on physicochemical quality of bread. *Cogent Food Agric.* **2017**, *3*, 1328762, doi:10.1080/23311932.2017.1328762.
4. Kudanga, T.; Nyanhongo, G.S.; Guebitz, G.M.; Burton, S. Potential applications of laccase-mediated coupling and grafting reactions: A review. *Enzyme Microb. Technol.* **2011**, *48*, 195-208, doi:10.1016/j.enzmictec.2010.11.007.
5. Shao, B.; Liu, Z.; Zeng, G.; Liu, Y.; Yang, X.; Zhou, C.; Chen, M.; Liu, Y.; Jiang, Y.; Yan, M. Immobilization of laccase on hollow mesoporous carbon nanospheres: Noteworthy immobilization, excellent stability and efficacious for antibiotic contaminants removal. *J. Hazard. Mater.* **2019**, *362*, 318-326, doi:10.1016/j.jhazmat.2018.08.069.
6. Daronch, N.A.; Kelbert, M.; Pereira, C.S.; de Araújo, P.H.H.; de Oliveira, D. Elucidating the choice for a precise matrix for laccase immobilization: A review. *Chem. Eng. J.* **2020**, *397*, 125506, doi:10.1016/j.cej.2020.125506.
7. Chong-Cerda, R.; Levin, L.; Castro-Ríos, R.; Hernández-Luna, C.E.; González-Horta, A.; Gutiérrez-Soto, G.; Chávez-Montes, A. Nanoencapsulated Laccases Obtained by Double-Emulsion Technique. Effects on Enzyme Activity pH-Dependence and Stability. *Catalysts* **2020**, *10*, 1085, doi:10.3390/catal10091085.
8. Hernández-Martínez, C.A.; Maldonado Herrera, J.A.; Méndez-Zamora, G.; Hernández-Luna, C.E.; Gutiérrez-Soto, G. Enzymatic extract of *Trametes maxima* CU1 on productive parameters and carcass yield of rabbits. *Can. J. Anim. Sci.* **2017**, *97*, 683-688, doi:10.1139/CJAS-2016-0150.
9. Naranjos-Ramírez, N.; Torres-Cantú, D.; Castillo-Rodríguez, V.; Galindo-Rodríguez, S.A.; Chávez-Montes, A.; Castro-Ríos, R.; Álvarez-Román, R.; Martínez-Barbosa, M.E. Preparación de nanopartículas poliméricas con aplicación farmacéutica usando técnicas basadas en emulsificación. *Rev. Mex. Fís.* **2011**, *57*, 41-43.
10. Pacheco-Ordaz, A.; Sánchez-García, E.; Quintanilla-Licea, R.; Bazaldúa-Rodríguez, A.F.; Pérez-Hernández, R.A.; Hernández-García, M.E.; Báez-González, J.G.; Castro-Ríos, R.; Elizondo-Luévano, J.H.; Chávez-Montes, A. Amoebicidal and trichomonocidal capacity of polymeric nanoparticles loaded with extracts of the plants *Curcuma longa* (*Zingiberaceae*) and *Berberis vulgaris* (*Berberidaceae*). *Rev. Biol. Trop.* **2022**, *70*, 319-331, doi:10.15517/rev.biol.trop.v70i1.48746.
11. Elizondo-Luevano, J.H.; Castro-Ríos, R.; Parra-Saldívar, R.; Larqué-García, H.; Garza-Tapia, M.; Melchor-Martínez, E.M.; Chávez-Montes, A. Influence of the Polymer and Solvent Variables on the Nanoencapsulation of the Flavonoid Quercetin: Preliminary Study Based on Eudragit® Polymers. *Appl. Sci.* **2023**, *13*, 7816, doi:10.3390/app13137816.
12. Gandhi, A.; Jana, S.; Sen, K.K. In-vitro release of acyclovir loaded Eudragit RLPO® nanoparticles for sustained drug delivery. *Int. J. Biol. Macromol.* **2014**, *67*, 478-482.
13. Eş, I.; Vieira, J.D.G.; Amaral, A.C. Principles, techniques, and applications of biocatalyst immobilization for industrial application. *Appl. Microbiol. Biotechnol.* **2015**, *99*, 2065-2082, doi:10.1007/s00253-015-6390-y.
14. Vranish, J.N.; Ancona, M.G.; Oh, E.; Susumu, K.; Medintz, I.L. Enhancing coupled enzymatic activity by conjugating one enzyme to a nanoparticle. *Nanoscale* **2017**, *9*, 5172-5187, doi:10.1039/c7nr00200a.
15. Si, W.; Wu, Z.W.; Wang, L.L.; Yang, M.M.; Zhao, X. Enzymological characterization of Atm, the first laccase from *Agrobacterium* sp. S5-1, with the ability to enhance *in vitro* digestibility of maize straw. *PLoS One* **2015**, *10*, 1-11, doi:10.1371/journal.pone.0128204.

ACTIVIDAD CITOTÓXICA DE *RUTA CHALEPENSIS* Y DE SUS COMPONENTES PRINCIPALES LAS FURANOCOUMARINAS CHALEPENSINA Y RUTAMARINA

CYTOTOXIC ACTIVITY OF *RUTA CHALEPENSIS* AND ITS MAIN COMPONENTS THE FURANOCOUMARINS CHALEPENSINE AND RUTAMARINE

Joel Horacio Elizondo-Luévano ^{1,2}, Nancy Edith Rodríguez-Garza ^{1,2}, Aldo Fabio Bazaldúa-Rodríguez ¹, Ricardo Gómez-Flores ², César Iván Romo-Sáenz ², Ramiro Quintanilla-Licea ^{1,*}.

¹Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Biológicas, Departamento de Química, Ave. Universidad S/N, Cd. Universitaria, San Nicolás de los Garza N.L. México, C.P. 66455.

²Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Biológicas, Departamento de Microbiología e Inmunología, Ave. Universidad S/N, Cd. Universitaria, San Nicolás de los Garza N.L. México, C.P. 66455.

* e-mail del autor de correspondencia / e-mail correspondence autor

ramiro.quintanillalc@uanl.edu.mx

RESUMEN. El cáncer es una enfermedad con una distribución mundial con más de 800,000 casos al año en el mundo; la resistencia a los quimio-fármacos ha provocado una creciente demanda de nuevos compuestos antitumorales con baja toxicidad para las células normales. Los compuestos producidos por las plantas representan una fuente potencial de nuevos fármacos con capacidad antitumoral. La planta herbácea *Ruta chalepensis* L. (*Rutaceae*) ha sido ampliamente estudiada por sus aplicaciones medicinales. **Objetivo:** Evaluar la actividad citotóxica de *R. chalepensis* y sus furanocoumarinas (chalepensina y rutamarina). **Metodología:** La caracterización de las furanocoumarinas se determinó por técnicas espectroscópicas. La viabilidad celular en las células normales (VERO) y tumorales (HEP-G2) se determinó mediante la reducción del bromuro de 3-(4,5-dimetiltiazol-2-il)-2,5-difeniltetrazolio (MTT). Las diferencias significativas se determinaron mediante ANOVA, la concentración inhibitoria media (IC₅₀) mediante Probit y la prueba de Tukey para determinar diferencia entre los controles y los tratamientos. Los ensayos se realizaron por triplicado. **Resultados:** Los análisis espectroscópicos de los extractos de *R. chalepensis* demostraron la presencia de la chalepensina y rutamarina como los componentes principales. Ninguno de los tratamientos mostró ser citotóxico frente a las células VERO. El extracto completo de *R. chalepensis* mostró buena actividad contra las células HEP-G2, la subpartición hexánica presentó actividad citotóxica con un índice de selectividad (IS) de 9.48 y una IC₅₀ de 18.3µg/mL, frente a las células HEP-G2. La chalepensina y rutamarina presentaron IS de 5 y 3.3 respectivamente frente a las células HEP-G2. **Conclusiones:** Los extractos de *R. chalepensis*, y las furanocoumarinas, chalepensina y rutamarina, demuestran una eficiente actividad citotóxica (*in-vitro*) y altos IS contra las células tumorales HEP-G2.

Palabras clave: Chalepensina, Extractos, Ruda, *Ruta chalepensis*, Rutamarina.

ABSTRACT. Cancer is a disease with a worldwide distribution of more than 800,000 cases per year in the world; resistance to chemo-drugs has led to an increasing demand for new antitumor compounds with low toxicity to normal cells. Compounds produced by plants represent a potential source of new drugs with antitumor capacity. The herbaceous plant *Ruta chalepensis* L. (*Rutaceae*) has been widely studied for its medicinal applications. **Objective:** To evaluate the cytotoxic activity of *R. chalepensis* and its furanocoumarins

(chalepensin and rutamarin). **Methodology:** furanocoumarin characterization was determined by spectroscopic techniques. Cell viability in normal (VERO) and tumor (HEP-G2) cells was determined by 3-(4,5-dimethylthiazol-2-yl)-2,5-diphenyltetrazolium bromide (MTT) reduction. Significant differences were determined by ANOVA, mean inhibitory concentration (IC₅₀) by Probit and Tukey's test to determine the difference between controls and treatments. Assays were performed in triplicate. **Results:** Spectroscopic analysis of *R. chalepensis* extracts showed the presence of chalepensin and rutamarin as the main components; none of the treatments showed to be cytotoxic against VERO cells. The complete extract of *R. chalepensis* showed activity against HEP-G2 cells, and the *n*-hexane subpartition showed cytotoxic activity with a selectivity index (SI) of 9.48 and an IC₅₀ of 18.3µg/mL against HEP-G2 cells. Chalepensin and rutamarin presented SI of 5 and 3.3, respectively, against HEP-G2 cells. **Conclusions:** *R. chalepensis* extracts and the furanocoumarins, chalepensin, and rutamarin, demonstrate efficient cytotoxic activity (*in-vitro*) and high IS against HEP-G2 tumor cells.

Keywords: *Chalepensis, Extracts, Rue, Ruta chalepensis, Rutamarin.*

INTRODUCCIÓN: El cáncer es una de las principales causas de mortalidad ya que una de cada cuatro personas corre el riesgo de desarrollarlo a lo largo de su vida [1]. Las alternativas disponibles para el tratamiento del cáncer son limitadas y a menudo producen efectos secundarios; por ello, la búsqueda de nuevos fármacos contra el cáncer que sean seguros es una de las principales tareas que se llevan a cabo para descubrir nuevos medicamentos, por lo cual se han estudiado plantas por sus posibles efectos antitumorales [2]. *Ruta chalepensis* (ruda), es una planta utilizada por sus propiedades medicinales [3]. La ruda posee diferentes metabolitos bioactivos como alcaloides, cumarinas y flavonoides [4,5]. Diversos estudios han demostrado sus actividades citotóxicas, anti-hemolíticas y antiparasitarias [6,7]. El objetivo del presente estudio fue evaluar las actividades citotóxicas de los extractos de *R. chalepensis* y las furanocoumarinas chalepensina y rutamarina.

METODOLOGÍA

Extracción: El extracto metanólico (MeOH) crudo de *R. chalepensis*, las subfracciones de *n*-hexano, cloroformo (CHCl₃) y MeOH, se prepararon como se informó previamente [8]. Para purificar la chalepensina y rutamarina principales metabolitos de *R. chalepensis*, el extracto de MeOH se separó en diferentes componentes mediante extracción con *n*-hexano y el residuo producido mostró una actividad significativa frente a las células tumorales HEP-G2 y L5178Y-R. La posterior cromatografía de este residuo en columna de gel sílice resultó en el aislamiento de chalepensina. El procesamiento adicional del residuo de MeOH implicó la partición entre MeOH y acetato de etilo (EtOAc), seguido de la cromatografía del residuo de EtOAc en una columna de gel de sílice y produjo rutamarina alta pureza. La caracterización de las furanocoumarinas se determinó por técnicas espectroscópicas [5,7]. Los porcentajes de rendimiento de extracción se calcularon con la siguiente fórmula (1):

$$\% \text{ de Rendimiento} = \frac{\text{Peso final del extracto seco}}{\text{Peso inicial de planta seca}} \times 100 \quad \text{Ec.1}$$

Ensayo de Citotoxicidad: La línea celular de carcinoma hepatocelular humano HEP-G2 (ATCC HB-8065) y la línea celular epitelial de riñón de mono VERO (ATCC CCL-81) se cultivaron en medio de cultivo Eagle modificado de Dulbecco (DMEM), las células de linfoma murino L5178Y-R (ATCC CRL-1722) y las células mononucleares de sangre periférica humana (PBMC) se mantuvieron en medio de cultivo RPMI-1640. Las células se suplementado con un 10% de SFB (suero fetal bovino) [6]. Los ensayos se realizaron con células HEP-G2 y VERO adherentes en microplacas de fondo plano y con células L5178Y-

R y PBMC no adherentes en microplacas de fondo redondo [8]. Las células se cultivaron a 37 °C y 5% de CO₂ por 72 h. Después se incubaron con bromuro de 3-(4,5-dimetiltiazol-2-il)-2,5-difeniltetrazolio (MTT) a 37 °C en 5% de CO₂ durante 3 h y se desecharon los sobrenadantes tras el periodo de incubación. Los cristales de formazán resultantes se disolvieron añadiendo 80 µL de dimetilsulfóxido (DMSO) y las densidades ópticas (DO) se midieron a 540 nm, en un lector de microplacas. Se determinaron los valores de concentración inhibitoria media (IC₅₀) tras 72 h de incubación, el control positivo consistió en 0.05 µg/mL de vincristina y el control negativo consistió en medio de cultivo sin tratamiento [9]. Todos los tratamientos se diluyeron en DMSO hasta una concentración final de ensayo en pocillo no superior al 0.5% (v/v). La viabilidad se determinó con la siguiente fórmula (Ec. 2):

$$\% \text{ de Viabilidad celular} = \frac{\text{DO tratamiento}}{\text{DO C} -} \times 100 \quad \text{Ec. 2}$$

El índice de selectividad (IS) [9] se calculó con la siguiente fórmula (Ec. 3):

$$\text{IS} = \frac{\text{IC}_{50} \text{ de las células normales}}{\text{IC}_{50} \text{ de las células tumorales}} \quad \text{Ec. 3}$$

Análisis estadístico: Los ensayos se realizaron por triplicado y se muestran como las medias ± la desviación estándar (DE). Las diferencias significativas se determinaron mediante Anova de 1 vía (intervalo de confianza de 95%), la IC₅₀ mediante la prueba de Probit y la prueba de Tukey se utilizó para determinar diferencia significativa ($p < 0.05$) entre los tratamientos. Los ensayos se realizaron por triplicado. Los análisis se realizaron con el software SPSS ver.21 (IBM® Inc., Armonk, N.Y., USA).

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Extracción y aislamiento biodirigido: El número de identificación adjudicado a la planta fue FCB-UANL-30654. La Tabla I muestra los rendimientos de extracción para el extracto crudo de *R. chalepensis*, las particiones y las furanocoumarinas chalepentina y rutamarina. El rendimiento de extracción del extracto crudo fue del 19%, seguido por la partición de MeOH, sin embargo, para la partición de CHCl₃, la chalepentina y rutamarina, el rendimiento fue menor al 1 %. Se ha reportado que las diferencias en los perfiles químicos normalmente dependen de los métodos de extracción [10] así como de los solventes utilizados [11]. En este estudio se utilizó la extracción por equipo Soxhlet con calor, ya que esta metodología ayuda a la extracción de una mayor cantidad de metabolitos [7]. En la figura 1 se muestran los análisis espectroscópicos de la chalepentina y rutamarina.

Tabla I. Rendimientos de extracción

Extractos	% de rendimiento
<i>R. chalepensis</i> extracto MeOH	19
Partición <i>n</i> -hexano	2
Partición CHCl ₃	< 1
Partición MeOH	8
Chalepentina	< 1
Rutamarina	< 1

%; Porcentaje del rendimiento de extracción.

Los bajos rendimientos de metabolitos secundarios pueden deberse al método de extracción y a los disolventes utilizados en nuestra investigación, un estudio utilizando fluidos subcríticos con CO₂ mostró un número significativo de componentes, dicho estudio reportó 6.6% de chalepentina y 7% de chalepina en extractos de hojas, en los extractos de

flores 11% de chalepensina y 9% de rutamarina; en extractos de tallos 13% de chalepensina [12]. Además, también puede haber diferencias en la concentración de metabolitos secundarios, dependiendo de la sección de la planta, así como en subvariedades en distintas zonas geográficas [13,14].

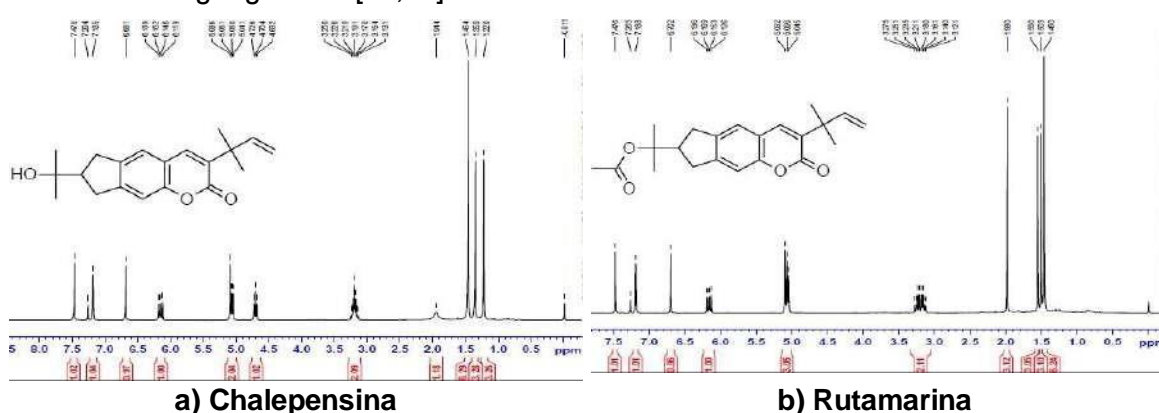


Figura 1. Estructura de **a)** Chalepensina (PubChem CID: 128834; <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Chalepsin>) y **b)** Rutamarina (PubChem CID: 26948; <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/26948>). Enlaces cotejados el 14/10/2022.

Actividad citotóxica: El objetivo terapéutico de los tratamientos contra el cáncer es provocar la muerte de las células tumorales, con este fin, se están probando plantas medicinales y productos derivados de plantas [15]. Las furanocumarinas, han demostrado sus bioactividades, sin embargo, faltan informes sobre los ensayos preclínicos de estos compuestos [16]. En la Tabla II se muestran los resultados de la actividad citotóxica (IC_{50}) de todos los tratamientos evaluados contra las distintas líneas celulares, así como los IS correspondientes.

Tabla II. Actividad citotóxica de *R. chalepensis* y las furanocoumarinas e IS

Tratamiento	IC_{50} ($\mu\text{g/mL}$)			IC_{50} ($\mu\text{g/mL}$)		
	VERO	HEP-G2	IS	PBMC	L5178Y-R	IS
Extracto MeOH	522.1 \pm 30.8 ^e	2.1 \pm 0.6 ^a	249	183.9 \pm 12 ^c	1.6 \pm 0.2 ^a	115
Partición <i>n</i> -hexano	173.6 \pm 11.4 ^b	18.3 \pm 1.6 ^b	10	225 \pm 20.6 ^d	86.1 \pm 5.4 ^d	3
Partición CHCl_3	84.4 \pm 4.1 ^a	36.6 \pm 3.7 ^c	2	54.8 \pm 12.5 ^a	1.6 \pm 0.1 ^a	34
Partición MeOH	1125.7 \pm 21 ^f	519 \pm 20.3 ^f	2	339 \pm 21.1 ^e	311.5 \pm 33 ^e	1
Chalepensina	387.2 \pm 9.2 ^c	76.2 \pm 3.9 ^d	5	226.5 \pm 5.7 ^d	9.2 \pm 1.9 ^b	25
Rutamarina	430 \pm 4.1 ^d	129.6 \pm 3.7 ^e	3	151.0 \pm 10 ^b	15.1 \pm 3.8 ^c	10
<i>p</i> Anova	< 0.01	< 0.001	< 0.05	< 0.05	< 0.001	< 0.01

Los datos se muestran como las medias \pm DE de la IC_{50} . Las letras distintas en la misma columna son significativamente diferentes (Tukey, $p < 0.05$). [†] Los valores de IC_{50} superiores a 1200 $\mu\text{g/mL}$ no se incluyeron en el análisis de la prueba de Tukey.

También se logra apreciar cómo se comportaron los distintos extractos, siendo el crudo el más activo frente a las líneas tumorales, las furanocoumarinas mostraron alta actividad frente las líneas L5178Y-R. El extracto completo de *R. chalepensis* mostró buena actividad contra las células HEP-G2 y L5178Y-R, la subpartición hexánica presentó actividad citotóxica con un IS de 10 e IC_{50} de 18.3 $\mu\text{g/mL}$, frente a las células HEP-G2. La subpartición clorofórmica mostró IS = 34 frente a las células L5178Y-R. La chalepensina y rutamarina presentaron IS de 25 y 10 frente a las células L5178Y-R respectivamente. Por lo que se demuestra su capacidad frente a células tumorales ya que presentaron IS superiores a 3, lo que indica su alto potencial antitumoral [17]. Se han documentado actividades

antiinflamatorias, antivirales, antiparasitarias y amebicidas de estos compuestos [5,16,18]; sin embargo, existen muy pocos ensayos en modelos *in-vivo* la mayoría de los estudios sobre la bioactividad de estos compuestos se han realizado de manera *in-vitro* [19,20]. Además de lo anterior, un estudio previo demostró que la graveolina de *R. graveolens*, inducía la muerte celular apoptótica y autofágica en células de melanoma cutáneo [21], lo que indica el posible mecanismo de acción por parte de la chalepentina y rutamarina.

CONCLUSIONES: Los extractos de *R. chalepensis* y las furanocoumarinas, chalepentina y rutamarina, demuestran una eficiente actividad citotóxica (*in-vitro*) y altos IS contra las células tumorales HEP-G2 y L5178Y-R.

AGRADECIMIENTOS: Agradecemos al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT, No. Reg. 877783, 935405) por el apoyo financiero a través de la beca de estancia posdoctoral del programa “Estancias posdoctorales por México” y al Programa de Apoyo a la Investigación Científica y Tecnológica (PAICYT-UANL 307-CN-2022) por el apoyo económico en la presente investigación.

CONFLICTO DE INTERESES: Los autores declaran que no existe conflicto de intereses.

REFERENCIAS

- [1] Hausman, D.M. What Is Cancer? *Perspect. Biol. Med.* 2019, 62, 778-784, doi:10.1353/pbm.2019.0046.
- [2] Jacobo-Herrera, N.J.; Jacobo-Herrera, F.E.; Zentella-Dehesa, A.; Andrade-Cetto, A.; Heinrich, M.; Pérez-Plasencia, C. Medicinal plants used in Mexican traditional medicine for the treatment of colorectal cancer. *J. Ethnopharmacol.* 2016, 179, 391-402, doi:10.1016/j.jep.2015.12.042.
- [3] Khelifi, D.; Sghaier, R.M.; Amouri, S.; Laouini, D.; Hamdi, M.; Bouajila, J. Composition and anti-oxidant, anti-cancer and anti-inflammatory activities of *Artemisia herba-alba*, *Ruta chalepensis* L. and *Peganum harmala* L. *Food Chem. Toxicol.* 2013, 55, 202-208, doi:10.1016/j.fct.2013.01.004.
- [4] Elizondo-Luévano, J.H.; Gomez-Flores, R.; Verde-Star, M.J.; Tamez-Guerra, P.; Romo-Sáenz, C.I.; Chávez-Montes, A.; Rodríguez-Garza, N.E.; Quintanilla-Licea, R. *In Vitro* Cytotoxic Activity of Methanol Extracts of Selected Medicinal Plants Traditionally Used in Mexico against Human Hepatocellular Carcinoma. *Plants* 2022, 11, 2862, doi:10.3390/plants11212862.
- [5] Bazaldúa-Rodríguez, A.F.; Quintanilla-Licea, R.; Verde-Star, M.J.; Hernández-García, M.E.; Vargas-Villarreal, J.; Garza-González, J.N. Furanocoumarins from *Ruta chalepensis* with Amebicide Activity. *Molecules* 2021, 26, 3684, doi:10.3390/molecules26123684.
- [6] Rodríguez-Garza, N.E.; Quintanilla-Licea, R.; Romo-Sáenz, C.I.; Elizondo-Luevano, J.H.; Tamez-Guerra, P.; Rodríguez-Padilla, C.; Gomez-Flores, R. *In Vitro* Biological Activity and Lymphoma Cell Growth Inhibition by Selected Mexican Medicinal Plants. *Life* 2023, 13, 958, doi:10.3390/life13040958.
- [7] Quintanilla-Licea, R.; Mata-Cárdenas, B.D.; Vargas-Villarreal, J.; Bazaldúa-Rodríguez, A.F.; Ángeles-Hernández, I.K.; Garza-González, J.N.; Hernández-García, M.E. Antiprotozoal activity against *Entamoeba histolytica* of plants used in northeast mexican traditional medicine. Bioactive compounds from *Lippia graveolens* and *Ruta chalepensis*. *Molecules* 2014, 19, 21044-21065, doi:10.3390/molecules191221044.
- [8] Elizondo-Luévano, J.H.; Rodríguez-Garza, N.E.; Bazaldúa-Rodríguez, A.F.; Romo-Sáenz, C.I.; Tamez-Guerra, P.; Verde-Star, M.J.; Gomez-Flores, R.; Quintanilla-Licea, R. Cytotoxic, Anti-Hemolytic, and Antioxidant Activities of *Ruta chalepensis* L. (*Rutaceae*) Extract, Fractions, and Isolated Compounds. *Plants* 2023, 12, 2203, doi:10.3390/plants12112203.
- [9] Quintanilla-Licea, R.; Rodríguez-Garza, N.E.; Torres-Hernández, Á.D.; Verde-Star, M.J.; Elizondo-Luévano, J.H. Actividad citotóxica, antioxidante y antihemolítica del extracto metanólico de

Cymbopogon citratus (DC.) Stapf. Investig. y Desarro. en Cienc. y Tecnol. Aliment. 2023, 8, 957-964, doi:10.29105/idcyta.v8i1.121.

[10] Snoussi, M.; Noumi, E.; Punchappady-Devasya, R.; Trabelsi, N.; Kanekar, S.; Nazzaro, F.; Fratianni, F.; Flamini, G.; De Feo, V.; Al-Sieni, A. Antioxidant properties and anti-quorum sensing potential of *Carum copticum* essential oil and phenolics against *Chromobacterium violaceum*. J. Food Sci. Technol. 2018, 55, 2824-2832, doi:10.1007/s13197-018-3219-6.

[11] Elizondo-Luévano, J.H.; Castro-Ríos, R.; Sánchez-García, E.; Hernández-García, M.E.; Vargas-Villarreal, J.; Rodríguez-Luis, O.E.; Chávez-Montes, A. *In Vitro* Study of Antiamoebic Activity of Methanol Extracts of *Argemone mexicana* on Trophozoites of *Entamoeba histolytica* HM1-IMSS. Can. J. Infect. Dis. Med. Microbiol. 2018, 2018, 7453787, doi:10.1155/2018/7453787.

[12] Stashenko, E.E.; Acosta, R.; Martínez, J.R. High-resolution gas-chromatographic analysis of the secondary metabolites obtained by subcritical-fluid extraction from Colombian rue (*Ruta graveolens* L.). J. Biochem. Biophys. Methods 2000, 43, 379-390, doi:10.1016/S0165-022X(00)00079-8.

[13] Jianu, C.; Golet, I.; Stoin, D.; Cocan, I.; Bujancă, G.; Mișcă, C.; Mioc, M.; Mioc, A.; Șoica, C.; Lukinich-Gruia, A.T.; et al. Chemical Profile of *Ruta graveolens*, Evaluation of the Antioxidant and Antibacterial Potential of Its Essential Oil, and Molecular Docking Simulations. Appl. Sci. 2021, 11, 11753, doi:10.3390/app112411753.

[14] Mejri, J.; Abderrabba, M.; Mejri, M. Chemical composition of the essential oil of *Ruta chalepensis* L: Influence of drying, hydro-distillation duration and plant parts. Ind. Crops Prod. 2010, 32, 671-673, doi:10.1016/j.indcrop.2010.05.002.

[15] Popoca, J.; Aguilar, A.; Alonso, D.; Villarreal, M.L. Cytotoxic activity of selected plants used as antitumorals in Mexican traditional medicine. J. Ethnopharmacol. 1998, 59, 173-177, doi:10.1016/S0378-8741(97)00110-4.

[16] Nahar, L.; Al-Majmaie, S.; Al-Groshi, A.; Rasul, A.; Sarker, S.D. Chalepin and chalepensis: Occurrence, biosynthesis and therapeutic potential. Molecules 2021, 26, 1-12, doi:10.3390/molecules26061609.

[17] Romero-Arguelles, R.; Romo-Sáenz, C.I.; Morán-Santibáñez, K.; Tamez-Guerra, P.; Quintanilla-Licea, R.; Orozco-Flores, A.A.; Ramírez-Villalobos, J.M.; Tamez-Guerra, R.; Rodríguez-Padilla, C.; Gomez-Flores, R. *In Vitro* Antitumor Activity of Endophytic and Rhizosphere Gram-Positive Bacteria from *Ibervillea sonorae* (S. Watson) Greene against L5178Y-R Lymphoma Cells. Int. J. Environ. Res. Public Health 2022, 19, 894, doi:10.3390/ijerph19020894.

[18] Loizzo, M.R.; Falco, T.; Bonesi, M.; Sicari, V.; Tundis, R.; Bruno, M. *Ruta chalepensis* L. (*Rutaceae*) leaf extract: chemical composition, antioxidant and hypoglycaemic activities. Nat. Prod. Res. 2018, 32, 521-528, doi:10.1080/14786419.2017.1326491.

[19] Bailly, C. *Ruta angustifolia* Pers. (Narrow-Leaved Fringed Rue): Pharmacological Properties and Phytochemical Profile. Plants 2023, 12, doi:10.3390/plants12040827.

[20] Koziol, E.; Luca, S.V.; Aǧalar, H.G.; Saǧlık, B.N.; Demirci, F.; Marcourt, L.; Wolfender, J.-L.; Jóźwiak, K.; Skalicka-Woźniak, K. Rutamarin: Efficient Liquid-Liquid Chromatographic Isolation from *Ruta graveolens* L. and Evaluation of Its *In Vitro* and *In Silico* MAO-B Inhibitory Activity. Molecules 2020, 25, 2678, doi:10.3390/molecules25112678.

[21] Ghosh, S.; Bishayee, K.; Khuda-Bukhsh, A.R. Graveoline Isolated from Ethanolic Extract of *Ruta graveolens* Triggers Apoptosis and Autophagy in Skin Melanoma Cells: A Novel Apoptosis-Independent Autophagic Signaling Pathway. Phyther. Res. 2014, 28, 1153-1162, doi:10.1002/ptr.5107.

EVALUACIÓN DE LAS ACTIVIDADES BIOLÓGICAS DE ARGEMONE MEXICANA EN ENSAYOS *IN-VITRO*

EVALUATION OF THE BIOLOGICAL ACTIVITIES OF ARGEMONE MEXICANA ON *IN-VITRO* ASSAYS

Joel Horacio Elizondo-Luévano ^{1,2}, Nancy Edith Rodríguez-Garza ^{1,2}, César Iván Romo-Sáenz ², Ricardo Gómez-Flores ², Patricia Tamez Guerra ², Ramiro Quintanilla-Licea ^{1,*}.

¹Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Biológicas, Departamento de Química, Ave. Universidad S/N, Cd. Universitaria, San Nicolás de los Garza N.L. México, C.P. 66455.

²Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Biológicas, Departamento de Microbiología e Inmunología, Ave. Universidad S/N, Cd. Universitaria, San Nicolás de los Garza N.L. México, C.P. 66455.

*e-mail del autor de correspondencia / e-mail correspondence autor
ramiro.quintanillalc@uanl.edu.mx

RESUMEN. *Argemone mexicana* es una planta utilizada tradicionalmente por que posee actividad antitumoral, y citotóxica. Esto debido a sus componentes naturales principalmente alcaloides. **Objetivo:** El objetivo principal de esta investigación está enfocado en reportar distintos efectos biológicos (citotóxicos, actividad antioxidante, hemolítica y anti-hemolítica). **Metodología:** Se prepararon extractos metanólicos (MeOH) y acuosos (H₂O) de *A. mexicana* con un equipo Soxhlet. La viabilidad de células normales (VERO: células de riñón del mono verde africano y PBMC: células mononucleares de sangre periférica humana) y tumorales (HEP-G2: hepatocarcinoma humano y L5178Y-R: linfoma murino) se determinó mediante la técnica de reducción del bromuro de 3-(4,5-dimetiltiazol-2-il)-2,5-difeniltetrazolio (MTT), la actividad antioxidante mediante el método de reducción del radical α,α -difeníl- β -picrilhidracilo (DPPH), la actividad hemolítica y anti-hemolítica se determinó mediante hemólisis de células rojas humanas. Las diferencias significativas se determinaron mediante Anova, la concentración inhibitoria media (IC₅₀) mediante Probit y la prueba de Tukey para determinar diferencia entre los tratamientos. Los ensayos se realizaron por triplicado. **Resultados:** Contra las células L5178Y-R, el extracto metanólico presentó actividad citotóxica significativa con un índice de selectividad (IS) = 5.6 y una IC₅₀ de 71 $\mu\text{g}/\text{mL}$, el extracto acuoso mostró IS = 1.3 e IC₅₀ > 1000 $\mu\text{g}/\text{mL}$. Los extractos de MeOH y de H₂O mostraron IC₅₀ de 567 y 660 $\mu\text{g}/\text{mL}$ de actividad antioxidante respectivamente. El extracto de MeOH presentó alta actividad anti-hemolítica (IC₅₀ = 20 $\mu\text{g}/\text{mL}$). **Conclusiones:** El extracto metanólico posee mejor actividad biológica significativa en comparación con el extracto acuoso de *A. mexicana*; así mismo el extracto de metanol mostró actividad citotóxica prometedora contra las células tumorales L5178Y-R, sin afectar las células normales PBMC y VERO y una alta actividad anti-hemolítica.

Palabras clave: *Amapola, Argemone, Citotoxicidad, Hepatocarcinoma, Linfoma.*

ABSTRACT. *Argemone mexicana* is a plant traditionally used because it possesses anti-tumor and cytotoxic activity. This is due to its natural components, mainly alkaloids. **Objective:** The main objective of this research is focused on reporting different biological effects (cytotoxic, antioxidant activity, hemolytic, and anti-hemolytic). **Methodology:** Methanolic (MeOH) and aqueous (H₂O) extracts of *A. mexicana* were prepared with Soxhlet equipment. The viability of normal (VERO: African green monkey kidney cells and PBMC: human peripheral blood mononuclear cells) and tumor cells (HEP-G2: human hepatocarcinoma and L5178Y-R: murine lymphoma) was determined by the 3-(4,5-dimethylthiazol-2-yl)-2,5-diphenyltetrazolium bromide (MTT)

reduction technique, antioxidant activity by the α,α -diphenyl- β -picrylhydrazyl (DPPH) reduction method, hemolytic and anti-hemolytic activity was determined by the hemolysis of human red cells. Significant differences were determined by Anova, mean inhibitory concentration (IC₅₀) by Probit and Tukey's test to determine the difference between treatments. Assays were performed in triplicate. **Results:** Against L5178Y-R cells, the methanolic extract showed significant cytotoxic activity with a selectivity index (SI) = 5.6 and an IC₅₀ of 71 $\mu\text{g/mL}$, the aqueous extract showed SI = 1.3 and an IC₅₀ > 1000 $\mu\text{g/mL}$. MeOH and H₂O extracts showed IC₅₀ of 567 and 660 $\mu\text{g/mL}$ of antioxidant activity, respectively. The MeOH extract exhibited high anti-hemolytic activity (IC₅₀ = 20 $\mu\text{g/mL}$). **Conclusions:** Overall, the methanolic extract possesses better significant biological activity compared to the aqueous extract of *A. mexicana*; likewise, the methanol extract showed promising cytotoxic activity against L5178Y-R tumor cells without affecting normal PBMC and VERO cells, and high anti-hemolytic activity.

Keywords: *Poppy, Argemone, Cytotoxicity, Hepatocarcinoma, Lymphoma.*

INTRODUCCIÓN

Argemone mexicana (L. 1753) conocida como amapola mexicana, cardo santo o chicalote, es una planta de la familia de las papaveráceas (tabla I) utilizada en México por sus propiedades analgésica, antidiurética y antiséptica; además posee actividad antiparasitaria y citotóxica [1,2]. Dichas propiedades se deben a la presencia de alcaloides [3] como la berberina, coptisina y sanguinarina. El objetivo de esta investigación está enfocado en reportar los efectos citotóxicos en líneas celulares tumorales, así como su acción antioxidante y anti-hemolítica en eritrocitos humanos, lo cual brindará una mejor perspectiva sobre los efectos benéficos de la planta.

MÉTODOS

Extracción: El material vegetal se colectó en la ciudad de San Nicolás de los Garza, Nuevo León, México (14/07/2021) y se le asignó un número de identificación. La extracción se realizó con metanol absoluto (MeOH) y con agua destilada (H₂O). Para cada extracto, 50 g de material vegetal seco (hojas de *A. mexicana*) se sometieron a extracción con 500 mL de MeOH o H₂O, utilizando un equipo Soxhlet durante 48 h. El extracto crudo se filtró, concentró y almacenó a 4 °C en obscuridad hasta su uso. Con la fórmula siguiente (Ec. 1) se calculó el porcentaje (%) de rendimiento de extracción: % Rendimiento = (Peso final del extracto / Peso inicial de planta seca) x 100.

Pruebas fitoquímicas: A los extractos se le realizaron las siguientes pruebas para grupos de compuestos químicos: insaturaciones, carbohidratos, esteroides, flavonoides, cumarinas, sesquiterpénlactonas, saponinas, quinonas, taninos y alcaloides [4].

Actividad citotóxica: Se evaluaron las líneas celulares adherentes de hepatocarcinoma humano (HEP-G2) y células de riñón del mono verde africano (VERO); las líneas celulares no adherentes linfoma murino (L5178Y-R) y células mononucleares de sangre periférica humana (PBMC). Las células adherentes se incubaron en el medio de cultivo Eagle modificado de Dulbecco (DMEM) y las no adherentes se mantuvieron en medio Roswell Park Memorial Institute (RPMI) 1640 (Life Technologies, Grand Island, NY, USA). En ambos casos los medios se suplementaron con 10% de suero fetal bovino (FBS; Life Technologies) + 1% de solución de penicilina/estreptomicina/ anfotericina B (Life Technologies) [5]. Todas las células se cultivaron a 37 °C en una atmósfera de 5% de CO₂ y 95% de aire. Antes de evaluar los extractos, las células se incubaron durante 24 h para su adaptación en su medio de cultivo correspondiente, luego se evaluaron los extractos a concentraciones de 50 a 500 $\mu\text{g/mL}$ en un volumen final de 200 μL en una microplaca de 96 pozos y se incubaron por 48 h [6]. El control positivo (C+) consistió en el fármaco antineoplásico sulfato de vincristina

(0.05 µg/mL) y como control negativo (C-) se utilizó medio de cultivo sin tratar. La viabilidad celular se determinó mediante la técnica de reducción del bromuro de 3-(4,5-dimetiltiazol-2-il)-2,5-difeniltetrazolio (MTT), añadiendo 15 µL de MTT (concentración final de 500 µg/mL) e incubando durante 3 h. Posteriormente, se disolvieron los cristales de formazán con 80 µL de dimetilsulfóxido (DMSO) y se midieron las absorbancias (Abs) a 570 nm con un lector de microplacas. La viabilidad celular se determinó mediante la siguiente fórmula (Ec. 2): % Viabilidad celular = (Abs tratamiento / Abs C-) x 100. Los valores de IC₅₀ se utilizaron para determinar el IS del extracto [7]. El IS se calculó con la siguiente fórmula (Ec. 3): IS = IC₅₀ de las células normales / IC₅₀ células tumorales.

Actividad antioxidante: La actividad antioxidante se determinó mediante el método de reducción del radical α,α-difenil-β-picrilhidracilo (DPPH) [8], para lo cual, los tratamientos se evaluaron a concentraciones de 62.50 a 500 µg/mL, el DPPH se preparó a 125 µM en MeOH absoluto. Todos los tratamientos se incubaron 30 min a 37 °C en obscuridad, después de lo cual se colocaron 200 µL de cada tratamiento en una microplaca de 96 pozos y se realizó la lectura de la Abs a 517 nm con un lector de microplacas. Como C+, se utilizó una solución de ácido ascórbico y MeOH como C-. El % de reducción del DPPH se calculó con la siguiente fórmula (Ec. 4): [(Abs C- — Abs tratamiento) / Abs C-] x 100.

Actividad hemolítica y antihemolítica: Estos ensayos se realizaron en eritrocitos humanos los cuales se lavaron con EDTA y se centrifugaron a 1000 rpm (5 min) a temperatura ambiente. Esta suspensión se lavó y centrifugó cinco veces en PBS-1x (pH 7.4), eliminando los sobrenadantes cada vez y se preparó una suspensión al 5% v/v en PBS [9]. Para la evaluación de la hemólisis, la suspensión de eritrocitos se incubó con diferentes concentraciones (100 a 1000 µg/mL) del extracto, así como de soluciones testigo durante 30 min (37 °C), en oscuridad. El C- consistió en eritrocitos sin tratamiento y el C+ consistió en H₂O destilada como inductor de hemólisis. Para determinar el efecto anti-hemolítico, a los tratamientos se les añadió el reactivo dicloruro de 2,2'-azobis (2- amidinopropano) (AAPH a 150 mM) más la suspensión de eritrocitos y se incubaron por 5 h (37 °C / 200 rpm), en obscuridad. El C-, consistió en PBS con la suspensión de eritrocitos sin añadir AAPH y como C+ los eritrocitos con AAPH. En ambos casos pasado el tiempo de incubación, todos los tratamientos se centrifugaron durante 5 min (13000 rpm a 4 °C), después 200 µL de sobrenadante se transfirieron a una microplaca de 96 pozos [10]. La hemólisis se determinó mediante la lectura de la Abs (540 nm). El % de hemólisis se determinó con la siguiente fórmula (Ec. 5): % Hemólisis = [(Abs tratamiento — Abs C-) / (Abs C+ — C-)] x 100. La actividad anti-hemolítica se determinó con la siguiente fórmula (Ec. 6): % reducción de AAPH = 1 - [(Abs tratamiento — C-) / (Abs C+ — C-)] x 100.

Análisis estadístico: Los ensayos se realizaron por triplicado y se muestran como las medias ± la desviación estándar (DE). Se usó la prueba Anova de una vía y la prueba *post-hoc* de Tukey para determinar la diferencia entre los tratamientos (intervalo de confianza de 95%). La concentración inhibitoria media (IC₅₀) se determinó mediante la prueba de Probit. Los análisis se realizaron con el software SPSS ver.21 (IBM Inc., Chicago, IL, USA).

RESULTADOS y DISCUSIÓN

Pruebas fitoquímicas

El extracto metanólico dio negativo para las pruebas de carbohidratos, quinonas, saponinas y taninos. El extracto acuoso dio negativo solo para las pruebas de cumarinas y quinonas (tabla I). Algunos de estos datos referentes al % de extracción y de las pruebas fitoquímicas en el extracto de MeOH de *A. mexicana* difieren a algunos resultados reportados por Elizondo y col. en 2018 [11], en donde reportaron rendimientos de extracción más bajos, así como reacción negativa en algunas de las pruebas fitoquímicas. En dicho estudio los

extractos se realizaron por el método de maceración y en nuestro estudio usamos extracción por Soxhlet, lo cual ayuda a extraer una mayor cantidad de metabolitos [12].

Tabla I. Análisis fitoquímico del extracto metanólico y acuoso y taxonomía de *A. mexicana*

Prueba fitoquímica	Extracto		Taxonomía	
	MeOH	H ₂ O	Reino:	<i>Plantae</i>
Insaturaciones	+	+	División:	<i>Magnoliophyta</i>
Carbohidratos	-	+	Clase:	<i>Magnoliopsida</i>
Sesquiterpen-lactonas	+	+	Subclase:	<i>Magnoliidae</i>
Cumarinas	+	-	Orden:	<i>Papaverales</i>
Alcaloides	+	+	Familia:	<i>Papaveraceae</i>
Esteroles	+	+	Subfamilia:	<i>Papaveroideae</i>
Quinonas	-	-	Tribu:	<i>Papavereae</i>
Saponinas	-	+	Género:	<i>Argemone</i>
Flavonoides	+	+	Especie:	<i>Argemone</i>
Taninos	-	+		<i>Mexicana</i> L.
Rendimiento	11.3	19.6	Voucher id	29127



Prueba negativa: -; Prueba positiva: +; Rendimiento: %. Taxonomía y descripción de *A. mexicana*: Hierba con tallos de 60 a 80 cm de alto, hojas con espinas y flores amarillas [3].

Actividad citotóxica

En la figura 1 se observa el % de viabilidad contra las líneas celulares HEP-G2 y L5178Y-R causado por los extractos de *A. mexicana*. También se aprecia cómo se comportaron los extractos, siendo el de MeOH más activo en comparación que el de H₂O, la actividad citotóxica de los extractos en general dependió de la concentración.

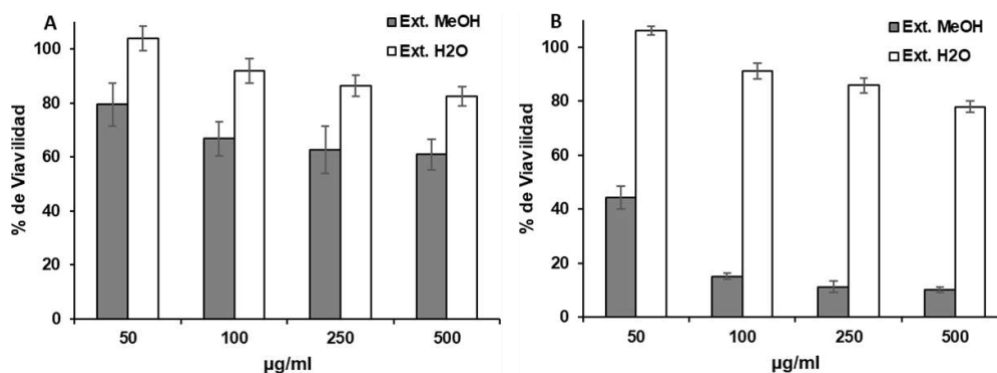


Figura 1. Los datos se muestran como las medias \pm DE ($P < 0.05$) del % de viabilidad de las células tumorales HEP-G2 (A) y L5178Y-R (B) causado por los extractos metanólico y acuoso de *A. mexicana* a distintas concentraciones ($\mu\text{g/mL}$).

En la tabla II se muestran los resultados de la actividad citotóxica (IC_{50}) de ambos extractos contra las líneas celulares evaluadas, así como los IS correspondientes. Ambos extractos no presentaron actividad considerable frente a las células HEP-G2, dado que estos presentaron IS de 0.30 para el caso del extracto de MeOH y de 0.44 para el de H₂O. Contra las células L5178Y-R, el extracto metanólico presentó actividad citotóxica con una IC_{50} de 70.73 $\mu\text{g/mL}$ (IS = 5.63), el extracto acuoso no mostró actividad significativa, dado que presentó una $IC_{50} > 1000 \mu\text{g/mL}$ (IS = 1.27). Estos resultados concuerdan con los reportados en un ensayo similar, en el cual evaluaron distintas plantas mexicanas, como *A. mexicana* contra las células HEP-G2 y VERO, donde se observó que el extracto metanólico causaba citotoxicidad significativa contra las células VERO, pero sí en las células HEP-G2 [2]. Nuestro estudio reporta por primera vez actividad citotóxica de *A. mexicana* contra

las células L5178Y-R; además, se observó que el extracto acuoso presentó $IC_{50} > 500$ $\mu\text{g}/\text{mL}$ contra células normales, lo que indica su baja toxicidad frente a éstas (tabla II).

Tabla II. Actividad citotóxica del extracto metanólico y acuoso de *A. mexicana*

Extracto	IC_{50} ($\mu\text{g}/\text{L}$)			IC_{50} ($\mu\text{g}/\text{mL}$)		
	Vero	HEP-G2	IS	PMBC	L5178Y-R	IS
MeOH	245.41 \pm 13.05 ^a	820.78 \pm 20.80 ^a	0.30	398.45 \pm 7.97 ^a	70.73 \pm 2.36 ^a	5.63
H ₂ O	550.07 \pm 54.85 ^b	1246.01 \pm 26.72 ^b	0.44	1390.38 \pm 73.79 ^b	1094.06 \pm 96.02 ^b	1.27

Los datos se muestran como las medias \pm DE de la IC_{50} ($\mu\text{g}/\text{mL}$). Las letras distintas en la misma columna son significativamente diferentes (Tukey, $P < 0.05$).

Actividad antioxidante, hemolítica y anti-hemolítica

Nuestros resultados indican que el extracto metanólico fue significativamente mejor en estas pruebas biológicas, en comparación con el extracto acuoso (tabla III). El extracto de MeOH mostró una mejor actividad antioxidante ($IC_{50} = 565.90$ $\mu\text{g}/\text{mL}$) en comparación con el acuoso ($IC_{50} = 658.92$ $\mu\text{g}/\text{mL}$). Los compuestos flavonoides, esteroides y alcaloides, han presentado efecto positivo debido a sus propiedades antimicrobianas, antioxidantes y antiinflamatorias [5-7]. En cuanto a la actividad hemolítica ambos extractos no presentaron actividad de hemólisis en eritrocitos humanos. Ambos extractos mostraron un $IC_{50} > 973$ $\mu\text{g}/\text{mL}$. Además, presentaron alto potencial de captar el AAPH, lo que indica su efecto anti-hemolítico [2]. Estos resultados concuerdan con los reportados previamente, en donde determinamos que el extracto metanólico de *A. mexicana* posee alto efecto anti-hemolítico [13]. Las pruebas para evaluar la actividad hemolítica, son comúnmente utilizadas para evaluar la seguridad de nuevas moléculas con potencial uso farmacológico [14].

Tabla III. Actividad antioxidante hemolítica y anti-hemolítica del extracto metanólico y acuoso de *A. mexicana*

Extracto	IC_{50} ($\mu\text{g}/\text{mL}$)		
	Antioxidante	Hemolítica	Antihemolítica
MeOH	565.90 \pm 17.6 ^a	973.8 \pm 38.64 ^a	20.32 \pm 0.28 ^a
H ₂ O	658.92 \pm 37.70 ^b	2924.24 \pm 255.71 ^b	259.01 \pm 31.73 ^b

Los datos se muestran como las medias \pm DE de la IC_{50} ($\mu\text{g}/\text{mL}$). Las letras distintas en la misma columna son significativamente diferentes (Tukey, $P < 0.05$).

CONCLUSIONES

El extracto metanólico de *A. mexicana* posee actividad citotóxica contra el linfoma murino L5178Y-R, sin afectar las células normales PMBC, además, no presentó actividad contra las células normales VERO. Ninguno de los extractos mostró actividad hemolítica significativa frente a eritrocitos humanos, lo cual indica su potencial uso etnofarmacológico.

AGRADECIMIENTOS: Al PAICYT por el apoyo en la presente investigación.

CONFLICTO DE INTERESES: Los autores declaran que no existe conflicto de intereses.

REFERENCIAS

- [1] Elizondo-Luévano, J.H.; Hernández-García, M.E.; Pérez-Narváez, O.A.; Castro-Ríos, R.; Chávez-Montes, A. Berberina, curcumina y quercetina como potenciales agentes con capacidad antiparasitaria. *Rev. Biol. Trop.* 2020, 68, 1241-1249, doi:10.15517/rbt.v68i4.42094.
- [2] Elizondo-Luévano, J.H.; Gomez-Flores, R.; Verde-Star, M.J.; Tamez-Guerra, P.; Romo-Sáenz, C.I.; Chávez-Montes, A.; Rodríguez-Garza, N.E.; Quintanilla-Licea, R. *In Vitro* Cytotoxic Activity of

Methanol Extracts of Selected Medicinal Plants Traditionally Used in Mexico against Human Hepatocellular Carcinoma. *Plants* 2022, 11, 2862, doi:10.3390/plants11212862.

[3] Priya, C.L.; Rao, kokati V.B. Ethanobotanical an Current Ethanopharmacological Aspects of *Argemone Mexicana* Linn: an Overview. *Ijpsr* 2012, 3, 2143-2148.

[4] Cárdenas-Garza, G.R.; Elizondo-Luévano, J.H.; Bazaldúa-Rodríguez, A.F.; Chávez-Montes, A.; Pérez-Hernández, R.A.; Martínez-Delgado, A.J.; López-Villarreal, S.M.; Rodríguez-Rodríguez, J.; Sánchez-Casas, R.M.; Castillo-Velázquez, U.; et al. Benefits of Cardamom (*Elettaria cardamomum* (L.) Maton) and Turmeric (*Curcuma longa* L.) Extracts for Their Applications as Natural Anti-Inflammatory Adjuvants. *Plants* 2021, 10, 1908, doi:10.3390/plants10091908.

[5] López-Villarreal, S.M.; Elizondo-Luévano, J.H.; Pérez-Hernández, R.A.; Sánchez-García, E.; Verde-Star, M.J.; Castro-Ríos, R.; Garza-Tapia, M.; Rodríguez-Luis, O.E.; Chávez-Montes, A. Preliminary Study of the Antimicrobial, Anticoagulant, Antioxidant, Cytotoxic, and Anti-Inflammatory Activity of Five Selected Plants with Therapeutic Application in Dentistry. *Int. J. Environ. Res. Public Health* 2022, 19, 7927, doi:10.3390/ijerph19137927.

[6] Rodríguez-Garza, N.E.; Quintanilla-Licea, R.; Romo-Sáenz, C.I.; Elizondo-Luevano, J.H.; Tamez-Guerra, P.; Rodríguez-Padilla, C.; Gomez-Flores, R. *In Vitro* Biological Activity and Lymphoma Cell Growth Inhibition by Selected Mexican Medicinal Plants. *Life* 2023, 13, 958.

[7] Elizondo-Luévano, J.H.; Rodríguez-Garza, N.E.; Bazaldúa-Rodríguez, A.F.; Romo-Sáenz, C.I.; Tamez-Guerra, P.; Verde-Star, M.J.; Gomez-Flores, R.; Quintanilla-Licea, R. Cytotoxic, Anti-Hemolytic, and Antioxidant Activities of *Ruta chalepensis* L. (*Rutaceae*) Extract, Fractions, and Isolated Compounds. *Plants* 2023, 12, 2203, doi:10.3390/plants12112203.

[8] Elizondo-Luévano, J.H.; Pérez-Narváez, O.A.; Sánchez-García, E.; Castro-Ríos, R.; Hernández-García, M.E.; Chávez-Montes, A. *In-Vitro* Effect of *Kalanchoe daigremontiana* and Its Main Component, Quercetin against *Entamoeba histolytica* and *Trichomonas vaginalis*. *Iran. J. Parasitol.* 2021, 16, 394-401, doi:10.18502/ijpa.v16i3.7092.

[9] Elizondo-Luevano, J.H.; Castro-Ríos, R.; Parra-Saldívar, R.; Larqué-García, H.; Garza-Tapia, M.; Melchor-Martínez, E.M.; Chávez-Montes, A. Influence of the Polymer and Solvent Variables on the Nanoencapsulation of the Flavonoid Quercetin: Preliminary Study Based on Eudragit® Polymers. *Appl. Sci.* 2023, 13, 7816, doi:10.3390/app13137816.

[10] Quintanilla-Licea, R.; Rodríguez-Garza, N.E.; Torres-Hernández, Á.D.; Verde-Star, M.J.; Elizondo-Luévano, J.H. Actividad citotóxica, antioxidante y antihemolítica del extracto metanólico de *Cymbopogon citratus* (DC.) Stapf. *Investig. y Desarro. en Cienc. y Tecnol. Aliment.* 2023, 8, 957-964, doi:10.29105/idcyta.v8i1.121.

[11] Elizondo-Luévano, J.H.; Castro-Ríos, R.; Sánchez-García, E.; Hernández-García, M.E.; Vargas-Villarreal, J.; Rodríguez-Luis, O.E.; Chávez-Montes, A. *In Vitro* Study of Antiamoebic Activity of Methanol Extracts of *Argemone mexicana* on Trophozoites of *Entamoeba histolytica* HM1-IMSS. *Can. J. Infect. Dis. Med. Microbiol.* 2018, 2018, 7453787, doi:10.1155/2018/7453787.

[12] Quintanilla-Licea, R.; Mata-Cárdenas, B.D.; Vargas-Villarreal, J.; Bazaldúa-Rodríguez, A.F.; Ángeles-Hernández, I.K.; Garza-González, J.N.; Hernández-García, M.E. Antiprotozoal activity against *Entamoeba histolytica* of plants used in northeast mexican traditional medicine. Bioactive compounds from *Lippia graveolens* and *Ruta chalepensis*. *Molecules* 2014, 19, 21044-21065.

[13] Elizondo-Luévano, J.H.; Castro-Ríos, R.; López-Abán, J.; Gorgojo-Galindo, O.; Fernández-Soto, P.; Vicente, B.; Muro, A.; Chávez-Montes, A. Berberine: A nematocidal alkaloid from *Argemone mexicana* against *Strongyloides venezuelensis*. *Exp. Parasitol.* 2021, 220, 108043.

[14] Pacheco-Ordaz, A.; Sánchez-García, E.; Quintanilla-Licea, R.; Bazaldúa-Rodríguez, A.F.; Pérez-Hernández, R.A.; Hernández-García, M.E.; Báez-González, J.G.; Castro-Ríos, R.; Elizondo-Luévano, J.H.; Chávez-Montes, A. Amoebicidal and trichomonocidal capacity of polymeric nanoparticles loaded with extracts of the plants *Curcuma longa* (*Zingiberaceae*) and *Berberis vulgaris* (*Berberidaceae*). *Rev. Biol. Trop.* 2022, 70, 319-331, doi:10.15517/rev.biol.trop..v70i1.48746.

ANÁLISIS DEL PERFIL METABOLÓMICO Y ACTIVIDAD CITOTÓXICA DE EXTRACTOS DE *CISSUS INCISA* UTILIZANDO UN ENFOQUE DE FARMACOLOGÍA DE RED

ANALYSIS OF THE METABOLOMIC PROFILE AND CYTOTOXIC ACTIVITY OF *CISSUS INCISA* EXTRACTS USING NETWORK PHARMACOLOGY APPROACH

Deyani Nocedo Mena^{1*}, María del Rayo Camacho Corona², María Yolanda Ríos³, Leticia González-Maya⁴, Orestes Boffill Beltrán¹

¹Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, Pedro de Alba, Niños Héroes, Ciudad Universitaria, San Nicolás de los Garza, N.L. México, C.P. 66451

²Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Ave. Universidad S/N, Cd. Universitaria, San Nicolás de los Garza N.L. México, C.P. 66455.

³Centro de Investigaciones Químicas- IICBA. Av. Universidad 1001, Cuernavaca, Morelos. México, C.P. 62209

⁴Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Facultad de Farmacia. Av. Universidad 1001, Cuernavaca, Morelos. México, C.P. 62209.

*e-mail del autor de correspondencia/ e-mail correspondence autor
deyani.nocedomn@uanl.edu.mx

RESUMEN. *Cissus incisa* es una planta medicinal utilizada en la medicina tradicional mexicana para tratar diversas afecciones. La metabolómica no dirigida permite analizar mezclas complejas como los extractos vegetales. Por su parte, el enfoque de Farmacología de Red examina las interacciones entre metabolitos con múltiples objetivos, permitiendo explorar la interacción metabolito/gen/enfermedad en el contexto del cáncer. El objetivo de nuestro estudio fue analizar el perfil metabolómico de tres extractos de *C. incisa*, determinar su actividad citotóxica *in vitro* y utilizar la Farmacología de Red para interpretar los resultados. A partir de la planta seca y molida se obtuvieron los tres extractos: hexánico, cloroformo/metanol 1:1 y acuoso. La actividad citotóxica se evaluó en seis líneas de cáncer utilizando el kit de proliferación celular Cell Titer 96®. Se determinó IC₅₀ e Índice de Selectividad. El perfil metabolómico se obtuvo por UHPLC-QTOF-MS/MS con fines de desreplicación, y se incluyeron Análisis de Componentes Principales y un diagrama de Venn. Además, se utilizaron las bases de datos MetaboAnalyst, STITCH, y MetPA. El extracto hexánico fue el más activo en la línea de cáncer hepatocelular Hep3B (IC₅₀=27±3 µg/mL), y el extracto CHCl₃/MeOH fue el más selectivo en la misma línea celular (Índice de Selectividad=2.77). La metabolómica reveló: *i*) 80 metabolitos coincidentes entre los dos extractos bioactivos y *ii*) la existencia de compuestos citotóxicos principalmente en extracto hexánico. La Farmacología de Red identificó los metabolitos responsables: difosfato de preescualeno, fitol, ácido esteárico, δ-tocoferol, ácido ursólico, ácido γ-linolénico, y los genes diana implicados en procesos celulares como la apoptosis. Este enfoque correlacionó la actividad citotóxica/perfil metabolómico del extracto hexánico mostrando los metabolitos contribuyentes y sus dianas. Se comprobó la sinergia entre compuestos para lograr el efecto biológico. Aplicando el enfoque de Farmacología de Red se puede explicar el enfoque holístico de formulaciones herbarias en el tratamiento del cáncer.

Palabras clave: metabolómica; citotoxicidad, Farmacología de Red; extractos naturales; cáncer

ABSTRACT. *Cissus incisa* is a medicinal plant used to treat several conditions. Untargeted metabolomics allows the analysis of complex mixtures such as plant extracts. By other hand, Network Pharmacology identifies metabolite/multitarget interactions. This approach is used to explore the metabolite/gene/disease interaction in the cancer context. The aim of our study was to analyze the metabolomic profile of three extracts from *C. incisa*, determine their *in vitro* cytotoxic activity, and use the Network Pharmacology to interpret the results. The three extracts hexane, chloroform/methanol 1:1, and aqueous were obtained from the dried and ground plant. Cytotoxic activity was evaluated in six cancer lines using the Cell Titer 96® cell proliferation kit. IC₅₀ and Selectivity Index were determined. The metabolomic profile was obtained by UHPLC-QTOF-MS/MS for dereplication purposes, including Principal Component Analysis and a Venn diagram. In addition, MetaboAnalyst, STITCH, and MetPA were used. The hexane extract was the most active in the Hep3B hepatocellular cancer line (IC₅₀=27±3 µg/mL), and the CHCl₃/MeOH extract was the most selective in the same cell line (Selectivity Index=2.77). The metabolomic study revealed: *i*) 80 coincident metabolites between the bioactive extracts and *ii*) that cytotoxic compounds are mainly present in the hexane extract. Network Pharmacology revealed the responsible metabolites: presqualene diphosphate, phytol, stearic acid, δ-tocopherol, ursolic acid, γ-linolenic acid, and the target genes involved in cellular processes such as apoptosis. This approach correlated the cytotoxic activity/metabolomic profile of the hexane extract by revealing the contributing metabolites and their targets. The synergy between compounds to achieve the biological effect was demonstrated. By applying the Network Pharmacology approach the holistic approach of herbal formulations in cancer treatment can be explained.

Keywords: *metabolomics; cytotoxicity, Network Pharmacology; natural extracts; cancer*

INTRODUCCIÓN

El cáncer es la principal causa de muerte en el mundo, en el 2020 se atribuyeron a esta enfermedad casi 10 millones de defunciones. A pesar de los significativos avances alcanzados en medicina y tecnología, las terapias actuales dirigidas para el tratamiento del cáncer tienen efectos secundarios y complicaciones severas, además del desarrollo de resistencia. En este contexto, la exploración y el hallazgo de compuestos antitumorales derivados de plantas medicinales está desempeñando una función importante [1, 2]. Los extractos naturales obtenidos de plantas medicinales se erigen como una fuente primordial de agentes antitumorales con aplicaciones en la terapia moderna contra el cáncer. Se ha constatado que los efectos sinérgicos de los metabolitos incluidos en los extractos medicinales pueden desempeñar un rol crucial en las actividades biológicas, en contraposición a la acción de un único compuesto [3].

En años recientes, la metabolómica no dirigida ha emergido como una herramienta valiosa para examinar de manera simultánea múltiples compuestos presentes en mezclas complejas, como los extractos vegetales. Su principal ventaja es que posibilita la exploración exhaustiva de grupos de metabolitos sin la obligación de identificar o cuantificar un compuesto específico [4]. Por otra parte, ha surgido un innovador paradigma conocido como Farmacología de Red (FR), que está ganando reconocimiento como estrategia para fusionar datos ómicos y avanzar en el desarrollo de fármacos con múltiples objetivos. Este enfoque combina principios de biología de redes y polifarmacología. FR busca comprender las acciones y las interacciones de los metabolitos con diversos objetivos. En la actualidad, este enfoque está captando la atención en la investigación del cáncer a partir de productos naturales, ya que dichos productos tienen la capacidad de incidir en múltiples proteínas y, por ende, presentan conexiones con diversos tipos de cáncer [5].

México destaca por su práctica en el uso de plantas medicinales para tratar diversas afecciones. Una de estas plantas es *Cissus incisa* (Nutt.) Des Moul. Ex S. Watson (syn. *C.*

trifoliata), perteneciente a la familia Vitaceae. Sus hojas se utilizan en la medicina tradicional mexicana para tratar infecciones de la piel y tumores. Investigaciones previas dan cuenta del aislamiento y caracterización de compuestos bioactivos de las hojas de esta planta [6, 7]. Adicionalmente, otros estudios se llevan a cabo para validar su uso tradicional. En este sentido nuestro trabajo se centró en analizar el perfil metabolómico de tres extractos obtenidos de *C. incisa*, determinar la actividad citotóxica *in vitro* y utilizar el enfoque de FR para interpretar los resultados.

METODOLOGÍA

C. incisa fue colectada en Rayones, Nuevo León, México. Sus hojas se secaron a temperatura ambiente durante 2 semanas, luego fueron molidas. Se realizaron maceraciones secuenciales con hexano, cloroformo/metanol (1:1) y agua. La metodología de trabajo fue la misma: filtración y destilación al vacío hasta sequedad para los extractos orgánicos, en el caso del extracto acuoso se realizó una liofilización. La actividad citotóxica se evaluó en células cancerosas humanas: PC3 (próstata), Hep3B (hepatocelular), HepG2 (hepatocelular), MCF7 (mama), A549 (pulmón) y HeLa (cervical), además IHH (hepatocitos humanos inmortalizados) como control de células no cancerosas. Las células se cultivaron según lo reportado en otras publicaciones [8]. La actividad citotóxica se determinó mediante el kit de ensayo de proliferación celular Cell Titer 96® siguiendo el protocolo del proveedor. Se determinaron la IC₅₀ y el Índice de Selectividad (IS) siguiendo informes anteriores [9]. Paclitaxel fue el control. Por otro lado, los extractos se analizaron por UHPLC-QTOF-MS/MS. Se identificaron los compuestos mediante METLIN_Metabolites en el software Agilent MassHunter Qualitative Analysis B.08.00, y se realizaron asignaciones putativas para cada compuesto en función de su masa exacta. Se consultaron otras bases de datos disponibles: Dictionary of Natural Products, PubChem, LIPID MAPS y Human Metabolome Database (HMDB). Se realizaron Análisis de Componentes Principales (PCA) y un diagrama de Venn, considerando significativo un valor de $p < 0.05$ según el ANOVA. Las bases de datos MetaboAnalyst y STITCH fueron utilizados para el análisis topológico de la red. Dentro del módulo MetPA, se seleccionó la red de interacción metabolito-gen-enfermedad, integrando análisis topológicos de la red, la exploración de red interactiva y el análisis de enriquecimiento funcional.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Actividad citotóxica

La **Tabla I** muestra los resultados de la actividad citotóxica de los tres extractos obtenidos de las hojas de *C. incisa*. El extracto hexánico exhibió la mejor actividad citotóxica, alcanzando IC₅₀=27±3 µg/mL sobre Hep3B y IC₅₀=30±6 µg/mL en HepG2. Este resultado está respaldado por el Instituto Nacional del Cáncer de los Estados Unidos de América, que considera un extracto activo si éste alcanza una IC₅₀ ≤ 30 µg/mL en células tumorales [10]. Sobre estas mismas líneas cancerosas, el extracto CHCl₃/MeOH, fue poco menos activo con una IC₅₀=39±3 µg/mL y 31±2 µg/mL, respectivamente. Sin embargo, el extracto acuoso no mostró citotoxicidad en ninguna línea celular de cáncer, ni en las células sanasevaluadas. El IS se determinó únicamente para las líneas de carcinoma hepatocelular, pues fueron las más sensibles. Según la **Tabla I** el extracto CHCl₃/MeOH fue el más selectivo, exhibiendo un IS=2.77 en Hep3B y IS=2.21 en HepG2, superando al control en las mismas líneas celulares.

Tabla I. Actividad citotóxica de los extractos de hojas de *C. incisa*

Líneas celulares	Extracto hexánico		Extracto CHCl ₃ /MeOH		Extracto acuoso		Paclitaxel	
	IC ₅₀ (µg/mL)	IS	IC ₅₀ (µg/mL)	IS	IC ₅₀ (µg/mL)	IS	IC ₅₀ (µg/mL)	IS
HepG2	30±6	1.5	39±3	2.21	>100	ND	64 x 10 ⁻³	1.24
Hep3B	27±3	1.66	31±2	2.77	>100	ND	33 x 10 ⁻³	2.41
HeLa	40±2	ND	61±4	ND	>100	ND	4.78 x 10 ⁻³	ND
A549	52±2	ND	77±6	ND	>100	ND	5.12 x 10 ⁻³	ND
PC3	76±5	ND	57±4	ND	>100	ND	10.2 x 10 ⁻³	ND
MCF7	74±6	ND	50.7±6	ND	>100	ND	4.27 x 10 ⁻³	ND
IHH	45±3		86±5		>100		79.4 x 10 ⁻³	

ND: No determinado

Perfil metabólico

En cuanto al análisis del perfil metabólico de los tres extractos analizados, se obtuvieron los siguientes resultados: se identificaron putativamente 171, 260 y 114 metabolitos en los extractos hexánico, CHCl₃/MeOH y acuoso, respectivamente (lista de datos no mostrados). El PCA mostró perfiles metabólicos cercanos para los tres extractos, dando cuenta de una composición similar en cuanto a la presencia de metabolitos tanto primarios como secundarios, a pesar de que su proporción dentro de los extractos sea diferente (no mostrado). Este resultado se confirmó con el Diagrama de Venn (no incluido), que además mostró 33 compuestos comunes entre los tres extractos. De igual forma se detectaron 80 compuestos coincidentes en los extractos bioactivos, o sea, solo en el hexánico y el CHCl₃/MeOH. Este resultado junto con la actividad similar en las células de cáncer hepatocelular, muestran una correspondencia entre los perfiles metabólicos de los extractos activos y la actividad biológica exhibida.

Basado en lo anterior, centramos nuestro análisis en estos 80 compuestos coincidentes entre los extractos activos. Es importante destacar que, dentro de estos 80 metabolitos mencionados, algunos ya han sido previamente informados por su actividad contra células cancerosas hepatocelulares. Estos son: α -tocoferolquinona, fitol, ácido grandiflorico, cucurbitacina E, acetato de α -amirina, ácido ursólico, ácido γ -linolénico, oxiacantina, ácido esteárico y matricina. La presencia de estos metabolitos puede explicar la citotoxicidad observada en los extractos.

Adicionalmente se confeccionó un mapa de calor con las áreas relativas normalizadas (no mostrado). El cual ayudó a tener una mejor perspectiva acerca de la distribución en cada extracto, de los metabolitos citotóxicos reportados en la literatura, frente a las mismas seis líneas celulares evaluadas en este estudio. Se obtuvo que la mayoría de los compuestos citotóxicos están en mayor abundancia en el extracto hexánico.

Estudios previos han demostrado que los fitoesteroles y los terpenos (triterpenos y sus glucósidos) alteran el ciclo celular e inducen la apoptosis al activar las caspasas 3 y 9 en las células cancerosas. Los mismos han mostrado efectividad contra las células cancerosas y la inducción del mecanismo de apoptosis [11]. Estos fitocompuestos están presentes en ambos extractos (hexano y CHCl₃/MeOH).

Farmacología de Red

El enfoque de FR se utilizó para explorar la interacción metabolito/gen/enfermedad en el contexto del cáncer. Los resultados revelaron la sinergia de ciertos metabolitos para lograr un efecto anticancerígeno. Compuestos como el difosfato de preescualeno, el fitol, el ácido esteárico, el δ -tocoferol, el ácido ursólico y el ácido γ -linolénico demostraron participación

directa en las cinco redes de interacción identificadas. A continuación, solo se presentan resultados en tres redes.

En la red #1 (la más extensa, con un mayor número de nodos involucrados), se identificaron genes clave que el Centro Nacional de Información Biotecnológica (NCBI) reconoce por su relevante papel en el desarrollo de fármacos anticancerígenos [12]. Uno de estos genes es el CASP3 (caspasa 3), cuya proteína juega un papel fundamental en la fase de ejecución de la apoptosis celular. Además, se encuentran dos receptores nucleares (PARP1; NR3C1) que participan en la regulación de procesos celulares vitales como la diferenciación, la proliferación y la recuperación celular tras daño del ADN. Además, tres genes diferentes (BAX, BCL2, STAT3) cuyas proteínas influyen en el crecimiento celular y la apoptosis fueron identificados. La red también incluye dos moléculas de señalización ampliamente reconocidas (PTPN6 y PTPN3), que regulan diversos procesos celulares como el crecimiento, la diferenciación, el ciclo mitótico y la transformación oncogénica. Finalmente, se identificó la ADN topoisomerasa (TOP2A), un componente clave en la regulación de la estructura y función del ADN [12].

El análisis de la red también reveló otros genes que pueden contribuir al efecto terapéutico del extracto, ya que están directamente relacionados con la respuesta inflamatoria que puede ocurrir en diversas condiciones patológicas como el cáncer. Estos genes son: CXCL8, ALOX5 y ALOX15, que pueden actuar como dianas terapéuticas.

En las redes #2 y #3 se encontró que específicamente el fitol apunta a PPAR α , el cual desempeña un papel en la proliferación celular, la diferenciación celular y las respuestas inmunitarias e inflamatorias. Junto con el difosfato de preescualeno, el fitol se dirige a genes que codifican proteínas involucradas en el metabolismo de fármacos y la síntesis de colesterol, esteroides y otros lípidos (CYP46A1 y FDFT1, respectivamente) [12].

CONCLUSIONES

El análisis de los perfiles metabolómicos con enfoque no dirigido junto con las técnicas estadísticas empleadas permitió determinar las similitudes y diferencias fitoquímicas entre los tres extractos de *C. incisa* y comprender, además, sus efectos citotóxicos por la presencia de metabolitos bioactivos. El extracto hexánico logró una citotoxicidad notable en las células cancerosas hepatocelulares, por lo que la combinación de los datos del metaboloma con su actividad biológica podría respaldar en el futuro un aislamiento dirigido. El enfoque de Farmacología de Red utilizado fue exitoso para la interpretación de los resultados experimentales, porque se revelaron los metabolitos que contribuyen a la actividad citotóxica y las vías moleculares involucradas.

REFERENCIAS

- [1] Organización Mundial de la Salud (agosto 2022), Cáncer. Recuperado de <https://www.who.int/es/news-room/fact-sheets/detail/cancer>
- [2] Kim C, Kim B. Anti-cancer natural products and their bioactive compounds inducing ER stress-mediated apoptosis: A review. *Nutrients* 2018; 10: 1021.
- [3] Arellanes MAJ, Garrido JC, Díaz RL. Las plantas medicinales mexicanas como fuente de compuestos antimicobacterianos. *Revista Mexicana de Ciencias Farmacéuticas* 2010; 41: 22-29.
- [4] Abdelhafez OH, Othman EM, Fahim JR, Desoukey SY, Pimentel-Elardo SM, Nodwell JR, Schirmeister T, Tawfike A, Abdelmohsen UR. Metabolomics analysis and biological investigation of three Malvaceae plants. *Phytochem. Anal.* 2020; 31: 204-214.
- [5] Chandran U, Mehendale N, Patil S, Chaguturu R, Patwardhan B. *Network Pharmacology. Innov. Approaches Drug Discov* 2017; 127-164.
- [6] Alvarado Vázquez MA, Rocha Estrada, A, Moreno Limón, S. De La Lechuguilla a Las Biopelículas Vegetales: Las Plantas Útiles de Nuevo León: Plantas medicinales de Nuevo

León editado por Nohemí Zavala, editorial: Universidad Autónoma de Nuevo León 2010 p.109-117

- [7] Nocedo-Mena D, Rivas-Galindo VM, Navarro P, Garza-González E, González-Maya L, Ríos MI, García A, Ávalos-Alanís, FG, Rodríguez-Rodríguez J, Camacho-Corona MDR. Actividades antibacterianas y citotóxicas de nuevos esfingolípidos y otros constituyentes aislados de hojas de *Cissus incisa*. Heliyon 2020; 6: e04671.
- [8] Basu A, Kousuke Saito M, Ratna BK. Stellate cell apoptosis by a soluble mediator from immortalized human hepatocytes. Apoptosis 2006; 11: 1391-1400.
- [9] Badisa RB, Darling-Reed SF, Joseph P, Cooperwood JS, Latinwo LM, Goodman CB. Selective cytotoxic activities of two novel synthetic drugs on human breast carcinoma MCF-7 cells. Anticancer Res 2009; 29: 2993-2996
- [10] Suffness M, Pezzuto J. Methods in Plant Biochemistry: Assays for Bioactivity: Assays related to cancer drug discovery, editorial: Academic Press 1990; pp. 71-133.
- [11] Shen S, Li W, Ouyang MA, Wang J. Structure-activity relationship of Triterpenes and derived Glycosides against cancer cells and mechanism of apoptosis induction. Nat. Prod. Res. 2017; 32: 654-661
- [12] National Library of Medicine (Marzo 2021). Gene. Recuperado de <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/gene>



VII CONGRESO INTERNACIONAL DE
QUÍMICA E INGENIERÍA VERDE

EJE TEMÁTICO 3

EVALUACIÓN DE LA CONTAMINACIÓN AMBIENTAL



MODELADO DE LA DISPERSIÓN DE CONTAMINANTES MEDIANTE EL SOFTWARE AERMOD APLICADO A LA ERUPCIÓN DEL VOLCÁN ARENAL DE COSTA RICA, 1968

AIR DISPERSION MODELING OF POLLUANTS BY AERMOD SOFTWARE APPLIED TO THE ERUPTION OF THE ARENAL VOLCANO IN COSTA RICA, 1968

José Pablo Sibaja Brenes¹, Rosa Alfaro Solís¹, Ian Godfrey¹, María Martínez Cruz², Guillermo Alvarado Induni³

¹ Laboratorio de Química de la Atmósfera (LAQAT-UNA), Escuela de Química, Universidad Nacional, Costa Rica

² Observatorio Vulcanológico y Sismológico de Costa Rica (OVSICORI), Universidad Nacional, Costa Rica

³ Grupo Geociencias, Proceso de Ingeniería, Instituto Costarricense de Electricidad (ICE), San José, Costa Rica

*e-mail del autor de correspondencia/ e-mail correspondence autor

jose.sibaja.brenes@una.ac.cr

RESUMEN. El volcán Arenal es uno de los cinco volcanes activos de Costa Rica, se ubica a unos 151 km de la capital San José. Tiene aproximadamente 1755 m s.n.m. El 29 de julio de 1968, a las 7:30 a. m., hora local, el volcán entró en actividad con una explosión de tipo peleano que formó el cráter A. Emitió una corriente piroclástica, acompañada de un bombardeo de bloques, que llegaron a dos pueblos al pie del volcán, Tabacón y Pueblo Nuevo, y mató al menos unas 70 personas. Modelar mediante el programa AERMOD la dispersión de gases y de ceniza emitidos por el volcán Arenal durante la erupción de 1968. Se realizó una estimación de las emisiones del volcán Arenal, con base en el modelo computacional AERMOD, donde se tomaron datos meteorológicos de 10 años de zonas alrededor del volcán, ya que no hay un registro de valores del propio lugar para la fecha. Se estimó una emisión de partículas (ceniza) y de dióxido de azufre (SO₂) de 40 kg/s y 10 kg/s, respectivamente. La caída de ceniza estimada alcanzó las ciudades de Tilarán y Cañas, lo que concuerda con lo reportado por los medios de comunicación en 1968. El SO₂ expulsado por el volcán se dispersó en diferentes direcciones, con un componente principal hacia el oeste, y demuestra la nube de gases que se acumuló en la zona, que representó problemas respiratorios. Los gases generaron lluvia ácida que se depositó a 1 km a la redonda del cráter, donde se visualiza con la disminución de la vegetación por años en la zona. El programa AERMOD tuvo buena concordancia con lo sucedido en 1968 y es una herramienta útil para recrear erupciones y estimar próximas emanaciones de gases y ceniza por los volcanes.

Palabras clave: AERMOD, Dispersión, Modelado, SO₂, Volcán

ABSTRACT. The Arenal volcano is one of the five active volcanoes in Costa Rica, it is located about 151 km from the capital San José. It is approximately 1755 m a.s.l. On July 29, 1968, at 7:30 a.m., local time, the volcano became active with a peleano-type explosion that formed crater A. It emitted a pyroclastic current, accompanied by rocks fall, which reached two villages near the volcano, Tabacón and Pueblo Nuevo, and killed at least 70 people. To model the dispersion of volcanic gases and ash emitted by the Arenal

volcano during the 1968 eruption by using the AERMOD software. An estimate of the emissions from the Arenal volcano was made, based on the AERMOD computational model, where 10-year meteorological data from area around the volcano were used, since there is no record of values from the place itself for the date. An emission of particles (ash) and sulfur dioxide (SO₂) of 40 kg/s and 10 kg/s, respectively, was estimated. The estimated ash fall reached the cities of Tilarán and Cañas agrees with the reported by the news in 1968. The SO₂ ejected by the volcano dispersed in different directions, with a main component to the west site, and demonstrates the cloud of gases that accumulated in the area, which represented respiratory problems. The gases generated acid rain that was deposited 1 km around the crater, which is visualized with the decrease in vegetation for years in the area. The AERMOD program had a good agreement with what happened in 1968 and is a useful tool to recreate eruptions and estimate upcoming gas and ash emissions from volcanoes.

Keywords: AERMOD, Dispersion, Modeling, SO₂, Volcano

INTRODUCCIÓN

Costa Rica forma parte de la línea ígnea conformada por países cuyas costas están bañadas por el Océano Pacífico, comenzando por Chile y ascendiendo por la costa Sur de América, Centro América, México, Estados Unidos, Alaska, Japón, Filipinas, Papúa, Nueva Guinea, las islas del Pacífico Sur hasta Nueva Zelanda, también llamado "el cinturón de fuego del Pacífico"; esto, debido a la interacción de las placas Coco y la del Caribe [1].

El volcán Arenal se ubica en una de las estribaciones de la cordillera de Tilarán, entre las cordilleras volcánicas de Guanacaste y la Central, a unos 151 km de San José. Con aproximadamente 1755 m s n m, es un imponente estratovolcán (aprox. 1,1 km de altura) de forma cónica, con un área es de 33 km² (11-15 km³) [2].

Este volcán es uno de los cinco volcanes activos del país; se le conoce como un volcán desde el siglo XIX, pero a partir de la erupción de julio de 1968, las cuales comenzaron después de un periodo de entre 400-700 años en reposo [3]. En ese momento pasó a ser el sitio de investigación vulcanológica más importante de Costa Rica y uno de los más reconocidos del mundo [4], debido a que algunas erupciones fueron muy violentas y destructivas (tipo pliniano que son erupciones de pómez y cenizas con columnas de hasta 23 km de altura) que se repiten en ciclos que van desde varias centenas a mil años. Otras son del tipo estromboliano (erupciones de bombas y escorias) que se mantienen por un tiempo considerable [2 y 3].

En la actualidad, la actividad del volcán Arenal se restringe a una sismicidad baja de fondo (temblores volcanotectónicos, temores casuales, sismos de baja frecuencia), fumarolas de alta temperatura y actividad exhalativa, aunque algún día en décadas o centurias, todos los vulcanólogos concuerdan en que se va a volver a despertar y quizás de manera igual o más violenta que en 1968 [5]. Es por ello por lo que la modelación de la dispersión de los gases y de las cenizas durante la erupción de 1968, haciendo uso del programa AERMOD es importante, ya que permite recrear las erupciones y estimar la dispersión de los gases y de las cenizas y por ende identificar las zonas que serán afectadas en una eventual erupción, insumo que podrá ser utilizado por la Comisión Nacional de Emergencia para atender de forma temprana la emergencia.

METODOLOGÍA

Para el estudio de la dispersión de gases y material particulado en aire debido a la erupción del volcán Arenal, en Costa Rica, se utilizó el programa computacional AERMOD

9.8.3. Este programa tomó en cuenta las condiciones meteorológicas de la zona (temperatura, humedad relativa, radiación solar, lluvia y velocidad y dirección del viento), la topografía de la zona (que fue descargada de la página de www.webgis.com, Figura 1) y las condiciones del foco emisor (300 °C de los gases, 50 m de diámetro del cráter, 40000 g/s como tasa de emisión diaria de SO₂ y 10000 g/s para el material particulado), para estimar la concentración de los gases y las partículas alrededor de la fuente (50 km de distancia a la redonda). Como durante la erupción del volcán Arenal en 1968, no se tenía equipo de medición de los parámetros meteorológicos, éstos fueron estimados con una base de datos de estaciones meteorológicas cercanas al volcán Arenal, tomando en cuenta 10 años de mediciones, entre el 2010 y el 2019.

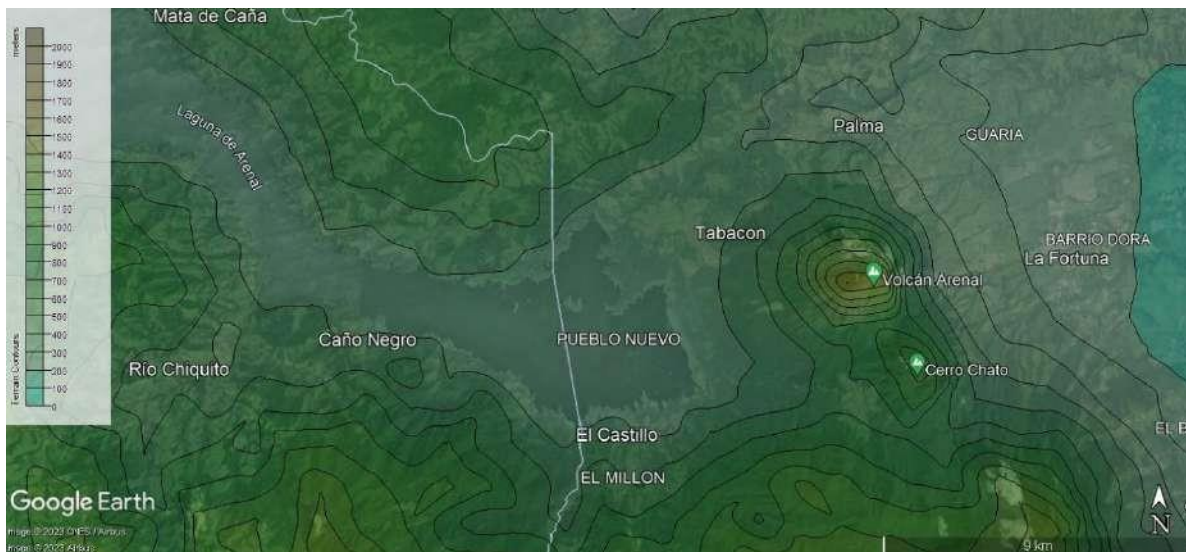


Figura 1. Mapa de la topografía de la zona alrededor del volcán Arenal

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La explosión del volcán Arenal en 1968 fue registrada en los barógrafos de la mayoría de los observatorios meteorológicos del mundo [6 y 7]. La estimación de las emisiones de material particulado (ceniza) y SO₂ debido a la erupción del volcán Arenal en 1968, se realizó para especificar la posible afectación y alcance que se presentó en el pueblo de La Fortuna de San Carlos y sus alrededores. El resultado del cálculo con el programa AERMOD mostró una dispersión del gas azufrado hacia los 360° alrededor del cráter eruptivo (Figura 2), donde la mayor concentración de SO₂ fue en las faldas del volcán, a 5 km a la redonda. Además, se tuvo una serie de isolíneas de concentración de SO₂ que se dispersaron mayoritariamente hacia el oeste y el sur del cráter. Hacia el oeste del cráter está el sector de Tabacón, el cual fue la zona de mayor impacto por las emisiones, la caída de ceniza y los balísticos. Según la estimación realizada con el programa AERMOD para el SO₂, la pluma de dispersión llegaría hasta la provincia de Guanacaste, a más de 50 km de distancia del volcán Arenal [8]. Además, las isolíneas de mayor concentración del SO₂ (color rojo) se encontrarían hacia el sureste y hacia el oeste, donde se encuentran el Parque Nacional Volcán Arenal y los poblados de Tabacón y Pueblo Nuevo, lugares que tuvieron afectaciones e incluso se presentó la muerte de personas [6, 7, 8]. No se

tienen mediciones de las concentraciones de gases o ceniza en la zona, solamente se publicó información de las coladas de lava y de las muertes en la zona. Hacia la zona de Tabacón y Pueblo Nuevo se dio un flujo de piroclastos que petrificó a las personas que estaban en la zona cercana a las faldas del volcán. Se estimó que hubo al menos unas 70 muertes, ya que no se tiene datos exactos de las defunciones. Además, no hubo autopsias, por lo que no se conocieron las causas específicas de cada muerte. Sin embargo, se estima que algunos murieron producto del impacto de bloques y por las temperaturas superiores a los 400 °C de corrientes de densidad piroclástica (los seres humanos no pueden sobrevivir más de unos pocos segundos expuestos a temperaturas >200 °C). Otra causa fue el inhalar conjuntamente gases y cenizas ardientes en ausencia de oxígeno, lo que debió de producir la pérdida de conciencia al cabo de unas pocas inhalaciones y graves quemaduras en el tracto respiratorio, las cuales probablemente crearon una masa húmeda en los pulmones y tráquea, que causó la asfixia y la muerte, la cual, si no fue instantánea, no estuvo exenta de agonía [6].

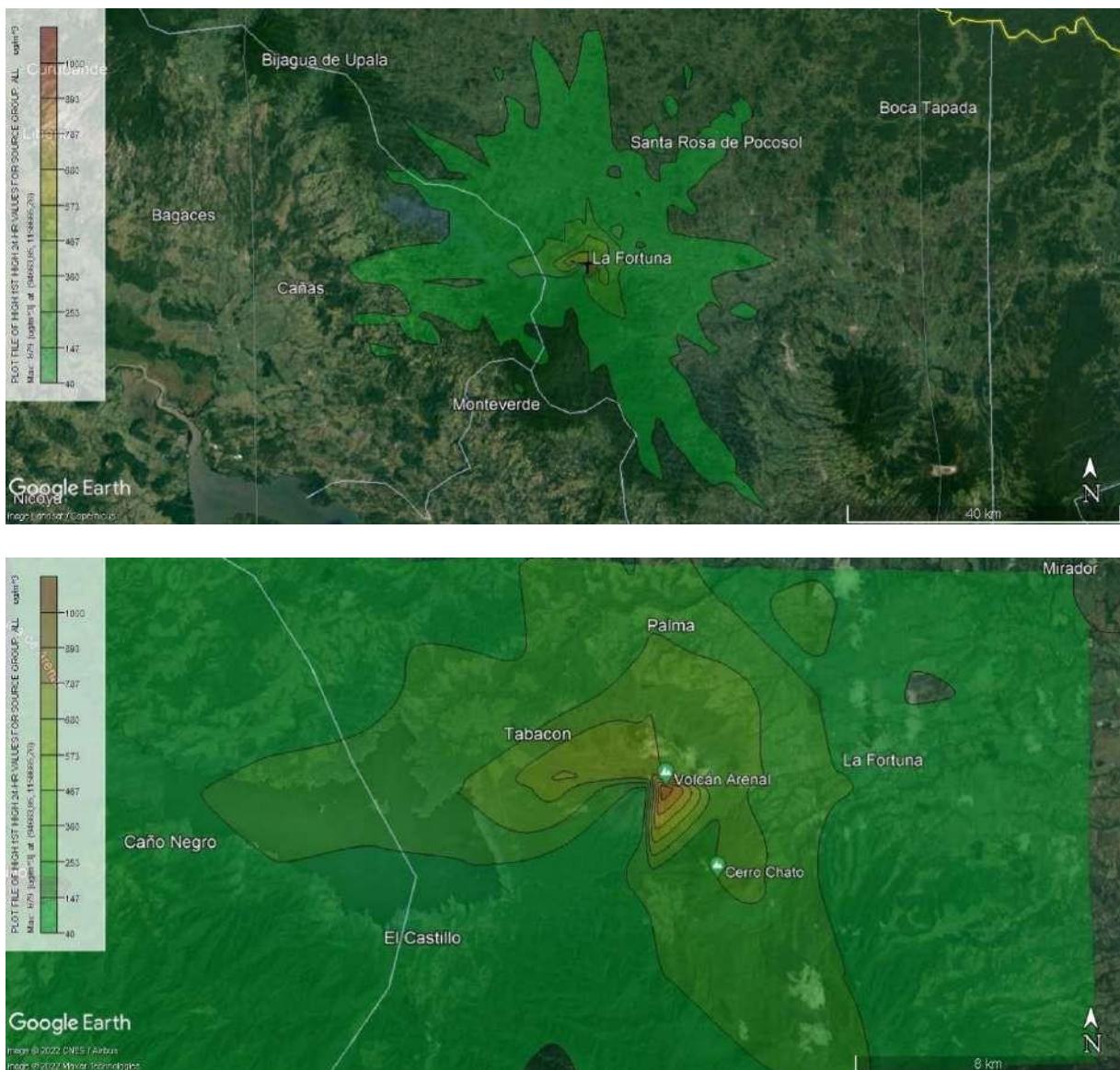


Figura 2. Dispersión del SO₂ por la emisión del volcán Arenal, 1968.

Para las Partículas Totales en Suspensión (PTS) (ceniza), la Figura 3 muestra la dispersión según los parámetros meteorológicos de la zona, en donde la dispersión hace que se alcance los más de 50 km de distancia alrededor del foco emisor, llegando a zonas de Guanacaste y el golfo de Nicoya con concentraciones más bajas. En la zona de Guanacaste hubo una disminución de la visibilidad y problemas respiratorios. Las concentraciones más altas estimadas se localizan en los alrededores del volcán Arenal, específicamente en el parque nacional (color rojo). Con tonalidades amarillas estarían Tabacón, volcán Chato y La Fortuna, principalmente. Según reportes de 1968, un área total de 15 km² fue devastada, donde los poblados de Tabacón y Pueblo Nuevo quedaron como comarcas desoladas [6].



Figura 3. Dispersión de las PTS por la emisión del volcán Arenal, 1968.

La Figura 4 muestra al SO_2 que llegó a la superficie por medio de la lluvia (lluvia ácida) que, a su vez, podría oxidarse a ácido sulfúrico por medio de una superficie donde pueda reaccionar, como el suelo o partículas en el aire. Las zonas con las isolíneas de color rojo se dan dentro del parque, donde se llega hasta acumulaciones de 22 g/m^2 alrededor del cráter activo. Esto dio al paso la degradación de la vegetación, las plantas y los árboles [9]. Actualmente, la zona con baja cantidad de vegetación y suelo con ausencia de cobertura verde concuerda con los mapas de caída de lluvia ácida. La lluvia ácida en la zona en el 2004 tuvo un valor de pH entre 4 y 5, por lo que, en 1968, el pH pudo ser más bajo, llegando hasta valores de 2 [10]. Actualmente, la actividad ha disminuido, donde el montaña ha ido retomando el color verde por la vegetación que cubre la superficie del volcán, debido a una disminución de los aerosoles ácidos que se emiten.

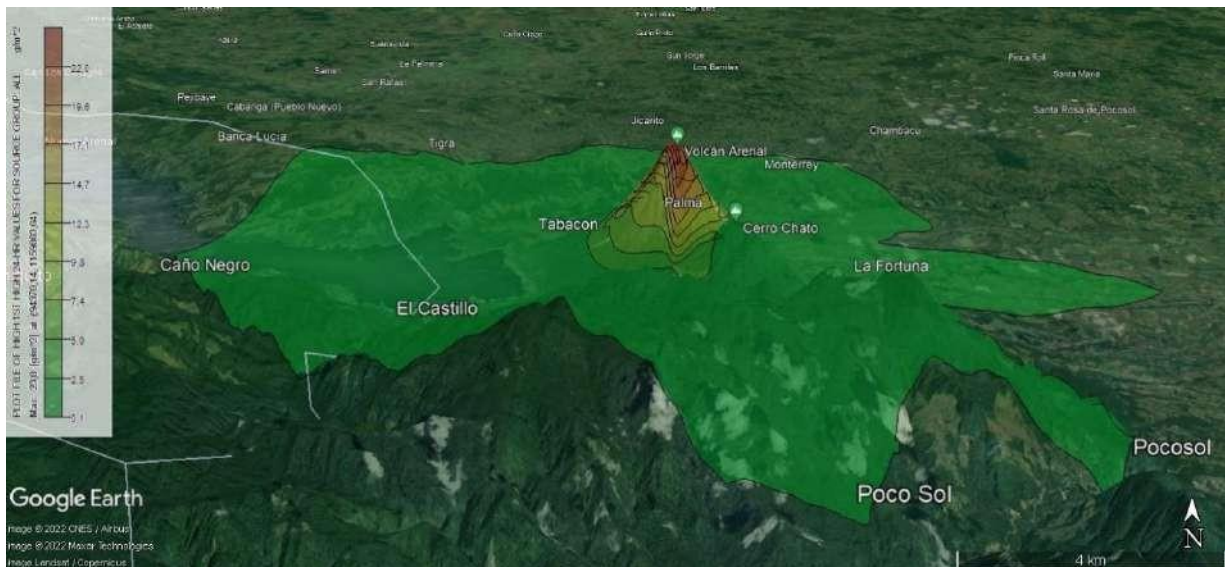


Figura 4. Concentración diaria de SO_2 por deposición húmeda debido a las emisiones del volcán Arenal, 1968

La Figura 5 muestra la deposición húmeda de las PTS (arrastre de las cenizas a la superficie por la lluvia). La zona de mayor impacto se localiza en los alrededores del volcán, con una mayor influencia en el parque nacional. La deposición húmeda de las cenizas, generan lahares en conjunto con las partículas que se depositaron por la acción de la gravedad. Los lahares fueron frecuentes en las faldas del volcán, por el material que se acumulaba, afectando a los pobladores de la zona [6]. Según la pendiente del volcán en sus laderas, genera que el flujo de agua de lluvia descienda con una velocidad considerable, arrastrando ceniza, árboles y rocas de las erupciones anteriores.

Para la deposición seca (deposición de gases y partículas en la superficie terrestre en ausencia de precipitación pluvial), se presenta la Figura 6, en donde la caída de ceniza tuvo un alcance de más de 50 km de distancia alrededor del volcán, pero con baja influencia. El impacto más alto se daría en las faldas del volcán Arenal, donde se llega a las tonalidades rojas y amarillas.

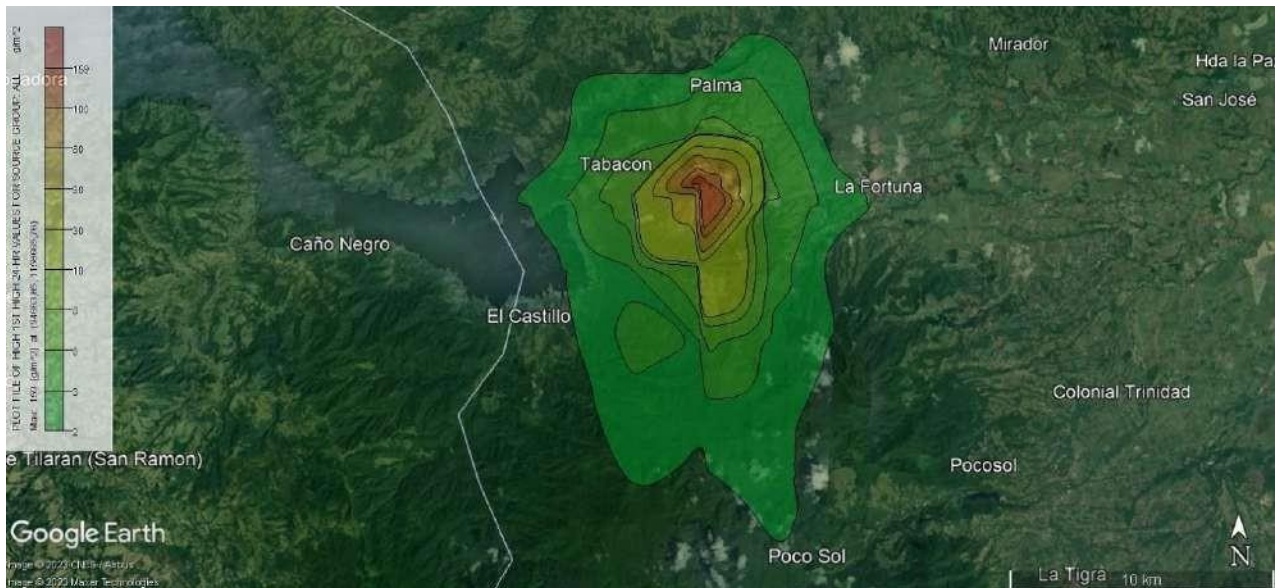


Figura 5. Concentración diaria de PTS por deposición húmeda debido a las emisiones del volcán Arenal



Figura 6. Concentración diaria de PTS por deposición seca debido a las emisiones del volcán Arenal, 1968

CONCLUSIONES

El programa AERMOD tuvo buena concordancia con lo sucedido en la erupción de 1968. La no existencia de mediciones y escaso material bibliográfico del momento de la erupción hace que los datos no sean suficientes para la estimación, pero los problemas por lahares, los problemas respiratorios, la lluvia ácida y la acumulación de ceniza, dan una buena similitud con lo calculado por el programa AERMOD. Por lo cual el software es una herramienta útil para recrear erupciones del volcán Arenal y estimar próximas emanaciones de gases y ceniza en Costa Rica, tomando en cuenta las erupciones de tipo pleleano, y calculado el material en el aire (gases y ceniza) y la precipitación húmeda y seca. Este es un instrumento adicional para el país y los tomadores de decisiones en

temas de percepción del riesgo, la prevención y la posible afectación futura por las erupciones volcánicas.

REFERENCIAS

- [1] Alvarado-Induni G, Vargas-Villalobos A, Campos-Sánchez N, Chaves-Salas I. El riesgo derivado de la amenaza volcánica en Costa Rica. Comisión Nacional de prevención de riesgos y atención de emergencias. San José, Costa Rica, 2014; 32 p. ISBN 978-9968-716-31-4.
- [2] Alvarado G. E. (2021). *Costa Rica y sus volcanes*. EUCR, EUNA, ETCR.
- [3] Sáenz-Ruiz, R. (1). Erupción del Volcán Arenal en el año 1968. *Revista Geográfica de América Central*, 1(5-6), 149-188. Recuperado a partir de <https://www.revistas.una.ac.cr/index.php/geografica/article/view/2291>
- [4] Soto G.J. & Alvarado, G.E., 2006. Eruptive history of Arenal Volcano, Costa Rica, 7 ka to present. *J. Volcanol. Geotherm. Res.*, 157: 254-269.
- [5] Alvarado G.E. y Soto, G.J., 2002: Pyroclastic flows generated by crater-wall collapse and outpouring of the lava pool of Arenal volcano, Costa Rica. *Bull. Volcanol.*, 63, 557-568.
- [6] Melson, W. G. y Saénz, R. (1968). The 1968 eruption of Volcan Arenal: preliminary summary of field laboratory studies. Smithsonian Center for Short-Lived Phenomena, Report 7. Trad. Española: La erupción del volcán Arenal. Costa Rica en julio de 1968, *Rev. Geogr. Amer. Central*, 5-6, 55- 148.
- [7] Fudali, R. F. y Melson, W. G. (1972) Ejecta Velocities, Magma Chamber Pressure and Kinetic Energy Associated with the 1968 Eruption of Arenal Volcano. *Bull. Volcanol.*, 35, 383-401.
- [8] Guillermo E. Alvarado, José Brenes-André, David Núñez, Jason Borbón, Martín A. Ramírez, Yemerith Alpizar, Santiago Núñez. José P. Sibaja. Lidier Esquivel. (2023). Actualización del análisis del peligro volcánico del Arenal, Costa Rica. Instituto Costarricense de Electricidad (ICE), Costa Rica.
- [9] Arroyo, I., Alvarado, G. E., Taylor, W., Madrigal, L. A., Arias, F. (2000). La actividad del volcán Arenal durante el año 2000. *Bol. OSIVAM*, 12 (23-24):15-29.
- [10] Vargas, G., Cortes, V. y Zuñiga, W. (1992). Evolución de la dinámica vegetal entre 1985 y 1993 sobre las lavas recientes (1968-92) y flujos piroclásticos (1968) del volcán Arenal. *Bol. Obs. Vulc. Arenal*, 5 (9-10), 31-51.

ESTUDIO CINÉTICO DE LA ADSORCIÓN DE NAPROXENO EN BENTONITA MODIFICADA POR EL SURFACTANTE HDTMA

KINETIC STUDY OF NAPROXENE ADSORPTION ON HDTMA-SURFACTANT MODIFIED BENTONITE

Mónica A. Alviso Coronado¹, Gloria L. Dimas Rivera^{1*}, Adriana Liñán Montes¹, David de Haro del Río¹, Teresa de Jesús Montalvo H.¹, Ladislao Sandoval Rangel².

¹Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Departamento de Ingeniería Química, Av. Universidad S/N, Cd. Universitaria, San Nicolás de los Garza, N. L., México, C.P. 66455.

²Tecnológico de Monterrey, Av. Eugenio Garza Sada 2501 Sur, N.L., C.P. 64849, México.
**gdimasr@uanl.edu.mx*

RESUMEN. El naproxeno es uno de los fármacos antiinflamatorios no esteroideos más utilizados y distribuidos. Se han reportado concentraciones desde 0.05 ppb a ppm de naproxeno en efluentes y descargas, siendo esto un riesgo toxicológico para los seres vivos. En este trabajo se estudió la cinética de adsorción de naproxeno en la arcilla bentonita modificada con el surfactante bromuro de hexadeciltrimetilamonio (HDTMA). Las propiedades físicas de la bentonita modificada se evaluaron con FT-IR, Fisisorción de N₂, y XRD. La presencia del surfactante HDTMA en las capas de la bentonita se identificó por las bandas fuertes a 2850 y 2923 cm⁻¹ atribuidas a las vibraciones de estiramientos simétricos y asimétricos de los grupos de metileno (nCH₂). En los resultados de fisisorción se observó que la microporosidad y el volumen de poro de la bentonita disminuyeron después de la modificación con el HDTMA y en los patrones XRD de la bentonita natural y la modificada se identificó que en la posición de reflexión del plano 001 había un cambio pequeño en la dirección de ángulo y el ancho del pico por la modificación de la bentonita. Esto sugiere que los poros de la bentonita fueron ocupados por el surfactante. El estudio cinético se ajustó al modelo de pseudo primer orden con una constante K de 0.013 min⁻¹, indicando que el proceso de adsorción se controla principalmente mediante adsorción física. El modelo de difusión intrapartícula se aplicó para analizar si el paso limitante de la velocidad es la difusión (difusión entre las placas o los poros de la bentonita), y los resultados mostraron que la adsorción se lleva a cabo en tres etapas: adsorción rápida en la superficie externa, posteriormente adsorción gradual controlada por la difusión intrapartícula (posiblemente entre las capas) y finalmente una adsorción lenta y estable debido al equilibrio y adsorción máxima del naproxeno.

Palabras clave: Adsorción, Bentonita, HDTMA, Naproxeno, Surfactante.

ABSTRACT. Naproxen is one of the most used and distributed nonsteroidal anti-inflammatory drugs. Concentrations ranging from 0.05 ppb up to several ppm of naproxen have been reported in water effluents and discharges, becoming a toxicological risk for living beings. In this work, naproxen adsorption kinetics were evaluated using bentonite clay previously modified with a surfactant (hexadecyl trimethyl ammonium, HDTMA). Physical properties of the modified bentonite were characterized using Fourier-transform Infrared spectroscopy (FTIR), nitrogen physisorption and X-ray diffraction (XRD). The presence of HDTMA surfactant within bentonite layers was identified by strong signals at 2850 and 2923 cm⁻¹, which are attributed to symmetric and asymmetric bending of methylene groups (nCH₂). The physisorption results showed a decrease of microporosity and pore volume of modified bentonite after modification with HDTMA, while the position of reflection plane 001 was identified on the XRD patterns of natural and modified bentonite, observing a small

decrease on the diffraction angle and peak width due to bentonite modification. This suggests bentonite pores were occupied by the surfactant. The kinetic study was adjusted to pseudo first order kinetic model, with a K constant of 0.013 min^{-1} , indicating the adsorption process is controlled mainly via physical adsorption. The intraparticle diffusion model was applied to analyze if the limiting step of adsorption rate is diffusion (between layers or bentonite pores), and results showed adsorption is performed in three steps: a fast adsorption in the outer surface, a gradual adsorption controlled by intraparticle diffusion (possibly between layers), and a slow and stable adsorption due to equilibrium and maximum naproxen adsorption.

Keywords: Adsorption, Bentonite, HDTMA, Naproxen, Surfactant.

INTRODUCCIÓN

Con la reciente pandemia del SARS-CoV-2, el uso de fármacos y la automedicación para el tratamiento de esta enfermedad fue una situación común [1]. Estos fármacos terminan en cauces naturales o aguas residuales, de forma que la concentración de estos aumentó conforme el gran uso que tuvieron en los años de pandemia [2]. Los contaminantes emergentes, como el naproxeno, son compuestos desconocidos o previamente no reconocidos en el medio ambiente, los cuales suscitan una preocupación por sus posibles consecuencias sobre el medio en el que se encuentran. En la mayoría de los casos, dichos contaminantes no son eliminados en los tratamientos convencionales, debido a que las actuales depuradoras no están diseñadas para este fin [3].

Un método para eliminar los contaminantes es el proceso de adsorción, el cual ha tomado importancia como un método sencillo y económico para la remoción de contaminantes en el tratamiento de aguas residuales. Lo anterior debido a la flexibilidad en el diseño, la calidad del efluente tratado, la reversibilidad del proceso. Entre los adsorbentes más económicos y eficientes se encuentran materiales naturales como la bentonita, el caolín y las zeolitas, cuya estructura y composición les confiere una gran capacidad de intercambio catiónico. [4]. Las arcillas pueden ser modificadas con sales cuaternarias de amonio llamadas también surfactantes, que pueden ser retenidas en los espacios interlaminares y en la superficie del material. Esta modificación se da por intercambio catiónico, donde los cationes presentes de la arcilla se intercambian por los cationes de las sales cuaternarias, para obtener organoarcillas, las cuales han sido ampliamente utilizadas como adsorbentes [5].

El bromuro de hexadeciltrimetilamonio (HDTMA) ha sido un buen surfactante para la modificación de arcillas tipo montmorillonita. Está constituido por el ion amonio tetrasustituido con nitrógeno pentavalente y una cadena alifática de 16 átomos de carbono a lo largo de su estructura, que le proporciona un alto grado de hidrofobicidad [6], con una concentración micelar crítica (CMC) de $0.9 \text{ mmol}\cdot\text{L}^{-1}$ a una temperatura de $25 \text{ }^\circ\text{C}$.

En general, se han realizado estudios con arcillas modificadas con surfactantes y han mostrado buenos resultados en la adsorción de contaminantes emergentes. Pero hay poca información de la adsorción de naproxeno con bentonita modificada con el surfactante HDTMA. Esto presenta una oportunidad para una mayor investigación para comprender mejor el proceso de adsorción y por ende mejorarlo. Por lo tanto, el objetivo de este trabajo es determinar los parámetros cinéticos para definir el proceso de la adsorción de naproxeno en bentonita modificada por el surfactante HDTMA.

METODOLOGÍA

Modificación de la bentonita.

La bentonita natural (BN) se purificó mediante la adición de 50 g en una solución de HCl 6 N (600 mL) a 300 rpm durante 3 h a $50 \text{ }^\circ\text{C}$. El sólido se filtró y lavó con agua destilada

caliente hasta quedar libre de cloruros mediante la prueba de nitrato de plata y se secó a 105 °C durante 12 h. La bentonita tratada con HCl se denominó BA.

Para la modificación con bromuro de hexadeciltrimetilamonio (HDTMA), 30 g de arcilla BA se mantuvieron en contacto con 500 mL de solución de 1000 ppm de surfactante HDTMA con agitación a 300 rpm durante 4 h a 60 °C. Se filtró la arcilla y se lavó con agua destilada caliente hasta que quedó libre de iones bromuro (se realizó prueba de AgNO₃). Se llevó a sequedad en el horno durante la noche a una temperatura de 105 °C. La muestra final pasó por un tamiz de malla No. 65 y se almacenó en un recipiente hermético, este material se denominó BAS.

Caracterización.

Las arcillas BN, BA y BAS se caracterizaron por las técnicas de fisisorción de N₂, difracción de rayos X (DRX) y espectroscopia de infrarrojo con transformadas de Fourier (FT-IR), para conocer las propiedades texturales, cristalinas y de grupos funcionales de estos materiales, respectivamente.

Pruebas cinéticas.

El análisis de adsorción se realizó mezclando 10 mL de solución de naproxeno de 600 mg/L a pH 6 en contacto con 20 mg de la arcilla (BN, BS, BA y BAS), después se llevó a agitación en un agitador automático a 150 rpm a temperatura de 30 °C durante distintos tiempos (1 minuto, 5 minutos, 10 minutos, 20 minutos, 30 minutos, 1 hora, 2 horas, 3 horas y 4 horas); transcurrido el tiempo de contacto las suspensiones se centrifugaron a 2500 rpm durante 15 minutos. Los experimentos se realizaron por triplicado. Posteriormente, se analizaron por espectroscopia de adsorción en ultravioleta a 272 nm y se realizó una curva de calibración en un rango de 1 a 50 mg/L de naproxeno.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN.

Caracterización.

Las propiedades de texturales de BN, BA y BAS se muestran en la tabla I donde se observa que el área superficial de BN se incrementó con el tratamiento ácido y la modificación con HDTMA de 39.18 a 54.89 y a 61.16 m²/g, y el volumen de poro se incrementó 0.099 a 0.130 y a 0.136 cm respectivamente. En el caso de la porosidad aumentó después del tratamiento ácido de 7.16 a 10.20 m²/g, pero disminuyó después de la modificación con HDTMA a 1.62 m²/g. Este resultado revela que las propiedades texturales de la bentonita fueron afectadas significativamente por el surfactante adsorbido sobre la bentonita; lo que sugiere que los microporos de la bentonita fueron ocupados por las moléculas de surfactante intercaladas en el espacio interlamina de la bentonita [7,8].

Tabla I. Propiedades texturales de BN, BA y BAS.

Material	S _{BET} , m ² /g	S _{micro} , m ² /g	V _p , nm
BN	39.18	7.16	0.10
BA	54.89	10.20	0.13
BAS	61.16	1.62	0.14

Las muestras en polvo de BN, BT, BN-HDTA y BT-HDTA se analizaron en XRD las cuales se muestran en la Figura 1 a). La difracción de rayos X se considera un método eficaz para determinar la presencia y el efecto de la intercalación de la bentonita [9]. BN mostró una estructura cristalina similar a la de la montmorillonita (MMT). Esto se confirma por la presencia de los planos (001), (100), (110), (210) y (060) correspondientes a MMT. Como se muestra en la Figura 1 a), también se observaron picos de difracción adicionales

relacionados con impurezas como cuarzo e illita [9] [10]. En los patrones XRD de BT, BN-HDTA y BT-HDTA se observó que en la posición de reflexión del plano 001 había un cambio pequeño en la dirección de ángulo y el ancho del pico por la modificación de la bentonita. Esto puede indicar que las moléculas de HDTMA se intercalan en las capas intermedias de la bentonita [9] [11]. El resto de las reflexiones permanecieron sin cambios después de la modificación con bentonita al tratarla con HCl y HDTMA [9].

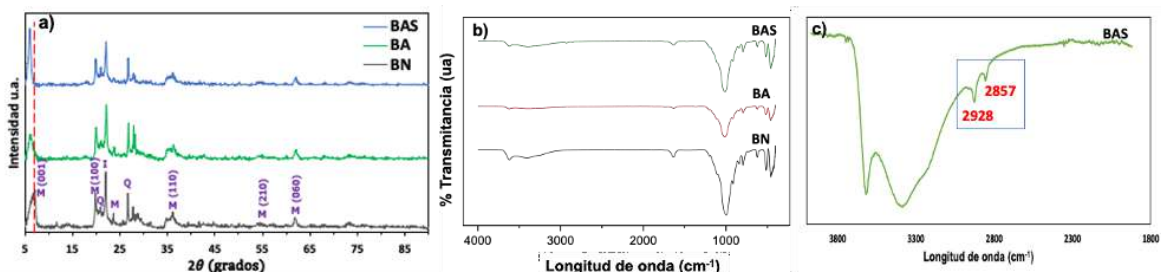


Figura 1. a) Difractogramas para BN, BA y BAS, b) espectros de FT-IR de BN, BA y BAS y c) bandas características del surfactante HDTMA en BAS.

Los espectros FT-IR para BN, BA y BAS se muestran en la figura 1 b). Las bandas a 3620 y 3622 cm^{-1} se asocian a esmectitas con altos contenidos de aluminio en la capa octaédrica y bajos contenidos de hierro [12, 13] y para el caso que se presente sustitución isomórfica de hierro (Fe^{3+}) en la capa octaédrica se observan cambios en las posiciones de las señales. Para la arcilla natural y tratada se aprecia que la banda se desplazó de 3622 a 3629 cm^{-1} , lo que indica sustitución isomórfica de Fe^{3+} en la arcilla [12]. Adicionalmente, la señal a 843 cm^{-1} se asocia también a deformaciones de los grupos AlFeOH presentes en la arcilla, debido a sustitución isomórfica [14]. Las bandas a 3422 y 1639 cm^{-1} son debidas al estiramiento y flexión de los grupos OH del agua absorbida en el espacio interlamilar de la bentonita [15].

Por su parte las señales a 1035 y 795 cm^{-1} se asocian a estiramiento del enlace Si-O en la sílice y las trazas de cuarzo presente en la muestra de arcilla. En la capa tetraédrica de la bentonita, un átomo de silicio se rodea de tres átomos de oxígeno, y su vecina capa octaédrica se compone de átomos de aluminio unidos a grupos hidroxilos, lo que explica las señales a 522 y 466 cm^{-1} , dado que las capas 47 octaédrica y tetraédrica están unidas por los oxígenos apicales, dando origen a las vibraciones a 522 cm^{-1} de los grupos SiOAl y las flexiones de los SiOSi en la capa tetraédrica [15]. En la Figura 1 c) se presentan el espectro de IR del material BAS en el rango de 3800 a 1800 cm^{-1} , en los cuales se observa dos señales características del surfactante en 2857 y 2928 cm^{-1} , correspondientes al estiramiento $\text{CH}_2\text{-N}$, de la forma asimétrica y simétrica, confirmando la presencia del grupo amino del surfactante anclado en la bentonita [16, 17, 18].

Pruebas cinéticas.

Se investigó el efecto del tiempo de contacto del naproxeno sobre la adsorción de BN, BA y BAS. La tabla II y la figura 2 muestran las ecuaciones y los resultados de la regresión no lineal del modelo cinético de pseudo primer orden y pseudo segundo orden. La adsorción del naproxeno llegó al equilibrio a los 60 min de contacto con los materiales de BA y BAS, pero en la BN el equilibrio se alcanzó a los 120 min. Los resultados muestran mayor ajuste al modelo cinético de pseudo primer orden para la remoción de naproxeno con los tres adsorbentes, BN, BA y BAS con valores de R^2 de 0.9525, 0.8551 y 0.8797 respectivamente. Por lo tanto, indica que la adsorción de naproxeno se lleva por un mecanismo físico, por

atracciones hidrofóbicas entre el surfactante que está anclado entre las placas de la bentonita y el naproxeno [19].

Tabla II. Parámetros de resultados experimentales de la cinética de adsorción.

Material	Pseudo primer orden $q_{t,exp} = q_{t,cal}(1 - e^{-k_1 t})$			Pseudo segundo orden $q_{t,exp} = \frac{k_2 q_e^2 t}{1 + k_2 q_{e,cal} t}$		
	k_1 (min ⁻¹)	q_e (mg g ⁻¹)	R ²	k_2 (g mg ⁻¹ min ⁻¹)	q_e (mg g ⁻¹)	R ²
BN	0.0167	174.65	0.9525	7.21x10 ⁻⁵	223.38	0.9391
BA	0.0453	164.45	0.8551	3.76x10 ⁻⁴	178.03	0.8256
BAS	0.0133	182.67	0.8797	3.00x10 ⁻⁵	265.88	0.8477

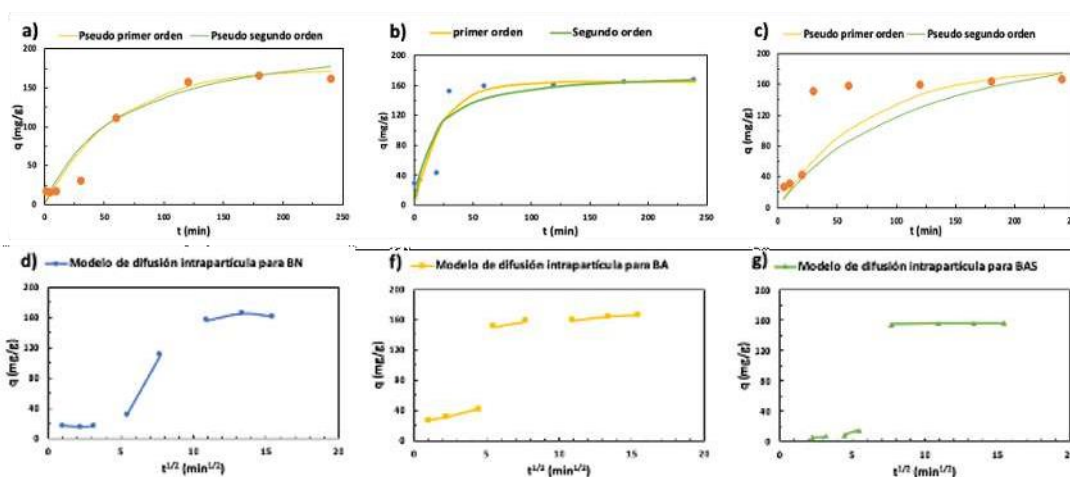


Figura 2. Resultados de los ajustes de los modelos cinéticos de a) BN, b) BA y c) BAS, y modelo de difusión intrapartícula para d) BN, f) BA y g) BAS.

Para conocer si la adsorción implica la difusión intrapartícula el modelo de Weber y Morris mostraría un gráfico de q_t versus $t^{1/2}$ de forma lineal. Pero en este trabajo los resultados indicaron que la adsorción ocurre principalmente en tres etapas; 1) la adsorción de naproxeno en la superficie externa del adsorbente, 2) después ocurre una adsorción gradual donde la velocidad está dada por la difusión intrapartícula y 3) posteriormente, la adsorción se volvió muy lenta y estable, acercándose a una etapa de equilibrio y máxima adsorción, es decir, un perfil de meseta [20, 21].

CONCLUSIONES

Se logró la modificación de la bentonita con HTMA, los resultados de fisorción, FT-IR y difracción de rayos x mostraron un cambio en la propiedades y estructura de la bentonita. El estudio cinetico se ajustó al modelo cinético de pseudo primer orden con una constante K de 0.013 min⁻¹, indicando que el proceso de adsorción se controla mediante adsorción física, principalmente. El modelo de difusión intrapartícula se aplicó para analizar si el paso limitante de la velocidad es la difusión, y los resultados mostraron que la adsorción se lleva en tres etapas, la adsorción rapida en superficie externa, una adsorción gradual controlada por la difusión intrapartícula y una adsorción lenta y estable debido al equilibrio y adsorción máxima del naproxeno.

REFERENCIAS

- [1] Organización Mundial del Comercio. (2021, junio). El comercio de productos médicos en el contexto de la lucha contra la covid-19: evolución en 2020.
- [2] Halling-Sørensen, B., Nors Nielsen, S., Lanzky, P., Ingerslev, F., Holten Lützhøft, H., & Jørgensen, S. Occurrence, fate and effects of pharmaceutical substances in the environment- A review. *Chemosphere* 1998; 36 (2): 357-393.
- [3] González-Hernández, Y., Quesada Peñate, I., Schetrite, S., Jáuregui-Haza, U. J., & Albasi, C. Utilización de un biorreactor con membranas sumergidas para el tratamiento de aguas residuales procedentes de un hospital oncológico. *Revista Internacional de Contaminación Ambiental* 2020; 36 (4): 945-956.
- [4] Worch E., Adsorption technology in water treatment. *Fundamentals, Processes, and Modeling*. Editorial: Walter de Gruyter, 2012. p. 18-19.
- [5] Gámiz B., Celis R., Cornejo J., Herminos M.C. Organoarcillas como enmiendas para aumentar la eficiencia y reducir el impacto contaminante de herbicidas en suelos agrícolas. *Revista de la Sociedad Española de Mineralogía*, 2012; 16:120-121.
- [6] Shattar S.F.A.; Zakaria N.A.; Foo K.Y. "Feasibility of montmorillonite-assisted adsorption process for the effective treatment of organo-pesticides". *Desalination and Water Treatment*, 2015. 57(29):13645-13677.
- [7] Xiao T., Luo W., Wei J., Yuan X., Huang Q., Zou L., Zhang M., Antwi P., Zhang D., Ren S. Adsorption of tungstate using cationic gemini surfactant-modified montmorillonite: Influence of alkyl chain length. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*. 2021; 629:127484.
- [8] Luo W., Sasaki K., Hirajima T. Effect of surfactant molecular structure on perchlorate removal by various organo-montmorillonites. *Applied Clay Science* 2015; 114:212-220.
- [9] Zhu Y., Cui Y., Peng Y., Dai R., Chen H., Wang Y. Preparation of CTAB intercalated bentonite for ultrafast adsorption of anionic dyes and mechanism study 2023; 658:130705.
- [10] Belkadi A., M. F. Meliani, Mokhtar A., Djelad A., Abdelkrim S., Kebir-Medjhoua Z. A., Bengueddach A., Sassi M. Amoxicillin loaded bentonite, advanced low-cost antibacterial and environmentally friendly materials. *Journal of Molecular Structure* 2022; 1270:133880.
- [11] Bougdah N., Messikh N., Bousba S., Djazi F., Magri P., Rogalski M. Removal of chlorobenzene by adsorption from aqueous solutions on the HDTMA-bentonites as a function of HDTMA/CEC ratio. *Current Research in Green and Sustainable Chemistry* 2020; 3:100038.
- [12] Carriazo, J., Molina, R., Moreno, S. Caracterización estructural y textural de una bentonita colombiana. *Revista Colombiana Química* 2007; 36(2):213-225.
- [13] Madejová, J., FTIR techniques in clay mineral studies. *Vib Spectrosc* 2003; 31(1):1-10.
- [14] Borchardt, G., Chapter 9. Montmorillonite and other smectite minerals, in *Minerals in Soil Environments*. Edited by J.B. Dixon and S.B. Weed, editorial: Soil Science Society of America: Madison, USA. 1977. p. 293-330.
- [15] Madejova, J., Komadel, P., Baseline studies of the clay minerals society source clays: Infrared methods. *Clays Clay Miner.* 2001; 49(5):410-432.
- [16] Hongping, H., Ray, F. L., Jianxi, Z. Infrared study of HDTMA+ intercalated montmorillonite. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy* 2004; 60(12):2853-2859.
- [17] Choi, J., Song, D. I., Shin, W. S. Sorption of phenols on hexadecyltrimethylammonium-modified bentonite: Application of Polanyi–Manes potential theory. *Energy & Environment* 2020; 32(5):902-920.
- [18] Serrano Fuentes, C., Otero López, M., Leyva Inzunza, Z. Modificación de carbón activado y zeolita natural para la remoción de Sulfato de Perfluorooctano del agua. *Revista Latinoamericana el Ambiente y las Ciencias* 2020; 11(28):407-410.
- [19] N. Sandhyarani. Surface modification methods for electrochemical biosensors. *Electrochemical Biosensors*. 2019, p. 45-75.
- [20] Toor, M., Jin, B. Adsorption characteristics, isotherm, kinetics, and diffusion of modified natural bentonite for removing diazo dye. *Chemical Engineering Journal* 2012; 187:79-88.
- [21] Zhu, Y., Cui, Y., Peng, Y., Dai, R., Chen, H., Wang, Y. Preparation of CTAB intercalated bentonite for ultrafast adsorption of anionic dyes and mechanism study. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects* 2023; 658:130705.



VII CONGRESO INTERNACIONAL DE
QUÍMICA E INGENIERÍA VERDE

EJE TEMÁTICO 4

**SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN Y
PROPIEDADES DE MATERIALES
PARA LA SUSTENTABILIDAD**



Síntesis de $\text{Li}_2\text{CuP}_{1-x}\text{V}_x\text{O}_4$ ($x=0.0, 0.1, 0.2$) y su evaluación como cátodo en baterías de ion-litio

Synthesis of $\text{Li}_2\text{CuP}_{1-x}\text{V}_x\text{O}_4$ ($x=0.0, 0.1, 0.2$) and its evaluation as cathode for lithium-ion batteries

Sergio Alfonso García Mata¹, Salomé Maribel de la Parra Arciniega^{1*}, Jesús Guzmán Torres¹, Eduardo Maximiano Sánchez Cervantes¹

¹Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Av. Universidad S/N, Ciudad Universitaria, 66451, San Nicolás de los Garza, Nuevo León, México.

* salome.delaparrarc@uanl.edu.mx

RESUMEN. Uno de los retos en el desarrollo de baterías de ion-litio (LIBs) es el diseño de nuevos cátodos con alta densidad de energía. Un candidato a material catódico que se ha estudiado recientemente es el fosfato de cobre (I) y litio, Li_2CuPO_4 , debido a que su densidad de energía teórica se reporta como superior a la de otros cátodos comerciales. Sin embargo, los reportes experimentales disponibles sobre este material muestran una inconsistencia en la capacidad práctica de intercalación de iones litio en la estructura cristalina, además de mostrar un desempeño electroquímico pobre. Una de las estrategias disponibles para mejorar el desempeño de un material catódico es la modificación composicional. Con el fin de verificar la habilidad del Li_2CuPO_4 de funcionar como un cátodo de LIBs, en este trabajo se estudió la sustitución parcial de fósforo por vanadio. La síntesis del sistema $\text{Li}_2\text{CuP}_{1-x}\text{V}_x\text{O}_4$ ($x=0.0, 0.1, 0.2$) se realizó con la técnica cerámica. La síntesis exitosa de las muestras se verificó mediante difracción de rayos-X en polvo y refinamiento de Rietveld. El análisis mediante microscopía electrónica de barrido reveló la obtención de partículas con morfología de poliedro irregular con una distribución heterogénea de tamaños entre 100 nm y 10 μm . Se prepararon baterías de tipo botón empleando las muestras sintetizadas como material activo en los cátodos. El ciclado galvanostático de las baterías ensambladas demostró la desintercalación de iones litio a 3.75 V vs Li/Li⁺, lo que coincide con los estudios teóricos reportados. La sustitución con vanadio mejoró el desempeño del material.

Palabras clave: LIBs, estructura tipo LISICON, fosfato, cátodo

ABSTRACT. One of the challenges in the development of lithium-ion batteries (LIBs) is the design of new cathodes with high energy density. A candidate for cathodic material that has been studied recently is lithium copper (I) phosphate, Li_2CuPO_4 , because its theoretical energy density is reported to be higher than that of other commercial cathodes. However, the experimental reports available on this material show an inconsistency in the practical capacity of lithium ion intercalation in the crystalline structure, in addition to showing poor electrochemical performance. One of the strategies available to improve the performance of a cathode material is compositional modification. In order to verify the ability of Li_2CuPO_4 to function as cathode for LIBs, the partial substitution of phosphorus for vanadium was studied in this work. The synthesis of the $\text{Li}_2\text{CuP}_{1-x}\text{V}_x\text{O}_4$ ($x=0.0, 0.1, 0.2$) system was carried out with the ceramic technique. The successful synthesis of the samples was verified by X-ray powder diffraction and Rietveld refinement. Analysis by scanning electron microscopy revealed the obtaining of particles with irregular polyhedron morphology with a heterogeneous size distribution between 100 nm and 8 μm . Coin-type batteries were prepared using the synthesized samples as the active material in the cathodes.

The galvanostatic cycling of the assembled batteries demonstrated the deintercalation of lithium ions at 3.75 V vs. Li/Li⁺, which agrees with the reported theoretical studies. The substitution with vanadium improved the performance of the material.

Keywords: LIBs, LISICON-like structure, phosphate, cathode

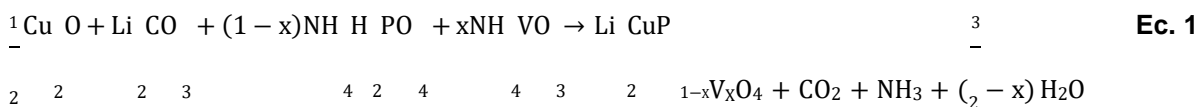
INTRODUCCIÓN

Los cátodos de fosfatos aplicados en baterías de ion-litio (LIBs) se han investigado en múltiples ocasiones debido a su alta densidad de energía y estabilidad térmica. Una de las estructuras cristalinas más importantes de esta clase de compuestos es la olivina, con representantes como el LiFePO₄ y LiMnPO₄, las cuales tienen capacidades de carga teóricas de aproximadamente 170 mAh/g [1]. En la búsqueda de alternativas con mejor desempeño que las olivinas, en el 2011 se publicó un estudio computacional que propuso a los fosfatos de cobre (I) y litio como candidatos potencialmente competitivos al compararlos con las olivinas en términos de densidad de energía y estabilidad térmica [2]. Estos compuestos se sintetizaron por primera vez en el 2014 [3], los autores encontraron que el Li₂CuPO₄ no adopta la estructura de olivina sino la estructura del LISICON o Li₃PO₄. Sin embargo, solo lograron desintercalar 0.1 iones Li del Li₂CuPO₄ durante la carga de la batería ensamblada. Lo anterior significa que la capacidad de carga experimental fue aproximadamente 15.8 mAh/g, distante del valor teórico máximo de 310 mAh/g para Li₂CuPO₄. Recientemente, en el 2021, se estudió de nuevo el Li₂CuPO₄, sin embargo, los autores no lograron desintercalar ningún ion litio de la estructura cristalina, esto lo atribuyeron a la baja conductividad del material [4]. En la literatura se ha reportado la sustitución atómica como estrategia para mejorar la conductividad de la estructura de LISICON. En el 2018 Muy S. *et al.* lograron sintetizar Li₃V_xP_{1-x}O₄ [5]. Además, en el 2016 Yahia H. *et al.* sintetizaron Li₂CuVO₄ [6] con estructura de LISICON y su aplicación como cátodo en LIBs arrojó una capacidad de carga de 205 mAh/g con retención del 85% en 30 ciclos. Los antecedentes demuestran la compatibilidad del Cu (I), V y P en la estructura de LISICON, pero no se han incorporado todos al mismo tiempo en la estructura para preparar un cátodo.

Con el objetivo de mejorar el desempeño de un material que ha sido atractivo por sus propiedades teóricas, en este trabajo se estudió la sustitución atómica de fósforo por vanadio en el sistema Li₂CuP_{1-x}V_xO₄ y su aplicación como cátodo en LIBs.

METODOLOGÍA

Se emplearon reactivos analíticos sin purificación adicional, Li₂CO₃, NH₄H₂PO₄, NH₄VO₃. Se sintetizó Cu₂O por un proceso basado en la literatura [7], partiendo de una solución de CuCl₂ alcalinizada con una solución de KOH, posteriormente se adicionó una solución de glucosa como agente reductor y se mantuvo el sistema a 80 °C por 30 minutos. Para sintetizar los compuestos Li₂CuP_{1-x}V_xO₄ se combinaron los reactivos sólidos en proporción estequiométrica de acuerdo con la **Ecuación 1** y se sometieron a molienda manual con mortero y pistilo por 20 minutos. La mezcla de reacción se comprimió en un pellet y se calentó en un horno tubular a 700-800 °C por 12 h con flujo de nitrógeno.



Las muestras sintetizadas se analizaron en un difractómetro Bruker D2 phaser. El refinamiento de Rietveld se realizó con el software Topas suite introduciendo las coordenadas atómicas y

valores de ocupancia reportados para el Li_2CuPO_4 [3]. El análisis microscópico se realizó con un FESEM JEOL JSM-6701F montando las muestras sobre un sustrato de aluminio.

Se prepararon cátodos con las muestras sintetizadas, carbón Super-P y PTFE en proporción 80:10:10. Se ensamblaron baterías tipo botón CR2032 dentro de una caja de guantes con atmósfera de argón empleando los cátodos preparados, ánodos de litio metálico, separador de polipropileno y electrolito LP30. Las baterías se sometieron a ciclado galvanostático con una tasa de C/60 en la ventana de potencial de 3.0 a 5.0 V vs Li/Li⁺ con un potenciostato MacPile.

RESULTADOS Y DISCUSION

Se lograron sintetizar las muestras mediante la técnica cerámica. Como se muestra en la **Figura 1a**, el refinamiento de Rietveld confirmó la concordancia del difractograma de la muestra Li_2CuPO_4 con la estructura reportada [3], y se observa que la línea de diferencia tiende a 0. La pureza del producto deseado se estimó en 96.91 %, superior al valor de 90% reportado por la síntesis de Vincent R. *et al.* en el 2021 [4]. Las impurezas de Cu (II) y Cu (0) han sido reportadas recurrentemente en síntesis de fosfatos de cobre (I) y se atribuyen a la reacción de disproporción de un intermediario metaestable [3, 8]. La **Figura 1b** muestra que con un contenido de vanadio de $x=0.1$ la pureza disminuyó a 94.94 % ya que se forma una nueva fase de Cu_3VO_4 , pero se suprimió la reacción de disproporción. Como se muestra en la **Figura 1c**, con un contenido de vanadio de $x=0.2$ la disproporción del Cu (I) se suprime casi por completo.

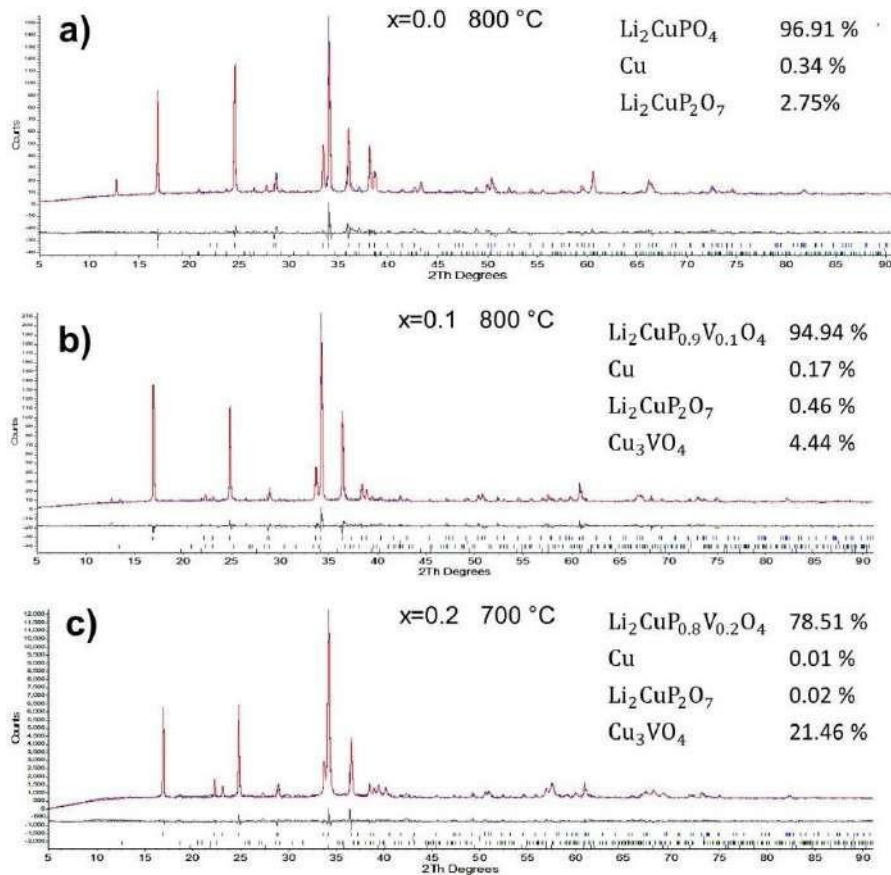


Figura 1. Difractograma experimental (azul), difractograma modelado por refinamiento de Rietveld (rojo) y diferencia entre ellos (gris) para las muestras: a) Li_2CuPO_4 , b) $\text{Li}_2\text{CuP}_{0.9}\text{V}_{0.1}\text{O}_4$, y c) $\text{Li}_2\text{CuP}_{0.8}\text{V}_{0.2}\text{O}_4$

La **Figura 2** muestra que los materiales sintetizados tienen una morfología de poliedro irregular observando partículas de entre 100 nm y 10 μm , estas características son consistentes con la literatura [3, 4] y no hay un cambio notorio al incluir vanadio en las muestras.

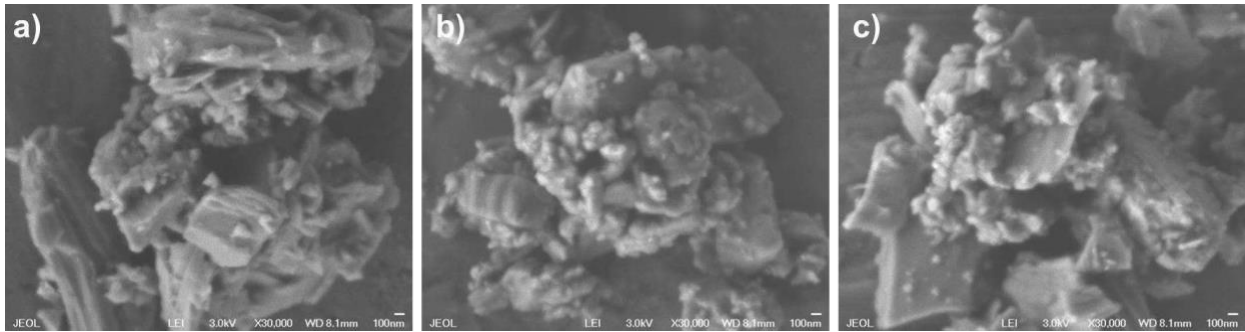


Figura 2. Micrografías obtenidas mediante FESEM para a) Li_2CuPO_4 , b) $\text{Li}_2\text{CuP}_{0.9}\text{V}_{0.1}\text{O}_4$ y c) $\text{Li}_2\text{CuP}_{0.8}\text{V}_{0.2}\text{O}_4$

La evaluación galvanostática de las baterías ensambladas solo fue posible con un contenido de vanadio de $x=0.1$. Como se muestra en la **Figura 3a**, durante la primera carga se observan dos platos que corresponden a distintos eventos electroquímicos, este resultado es similar al obtenido por Snyder K. *et al.* [3]. Sin embargo, en lo reportado en la literatura ambos platos correspondían a aproximadamente la misma magnitud de capacidad de carga, por otra parte, el resultado obtenido en este trabajo muestra que el segundo plato está asociado a una capacidad de carga considerablemente superior por lo que posiblemente la principal contribución para este segundo plato sea la descomposición del electrolito y no la desintercalación de iones litio de la estructura cristalina del material. También es posible observar que la capacidad de carga durante el primer ciclo alcanza un valor de 58.3 mAh/g, sin embargo, durante la primera descarga el valor obtenido es de solo 3.6 mAh/g. Esta discordancia puede deberse al efecto de la descomposición del electrolito, a la baja conductividad del material activo y a su posible desintegración estructural.

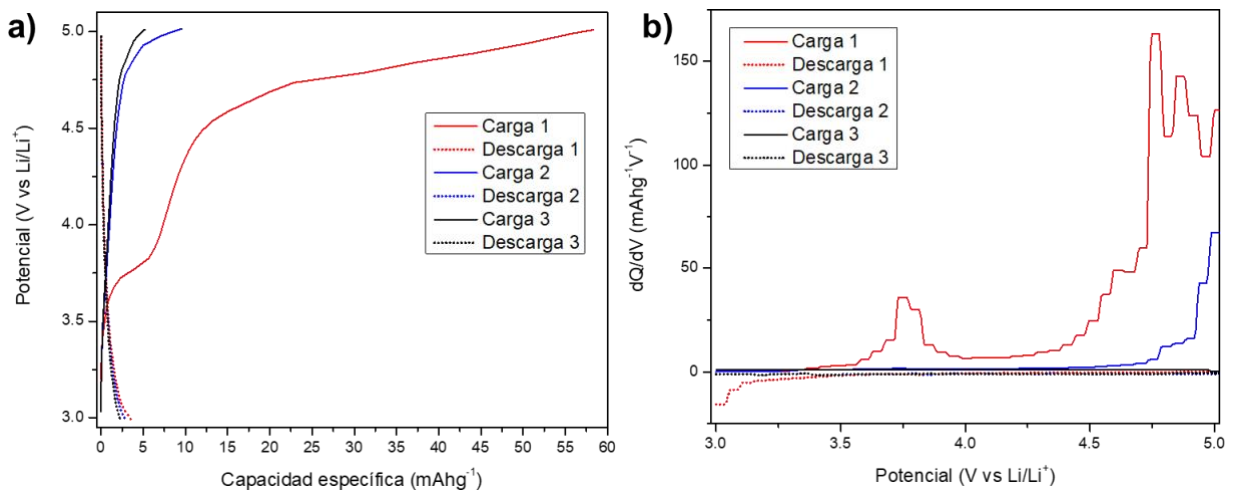


Figura 3. (a) Ciclado galvanostático con una tasa de C/60 para $\text{Li}_2\text{CuP}_{0.9}\text{V}_{0.1}\text{O}_4$ (b) Gráfica de capacidad diferencial con una tasa de C/30 para $\text{Li}_2\text{CuP}_{0.9}\text{V}_{0.1}\text{O}_4$

En la **Figura 3b** se muestra el análisis de capacidad diferencial obtenido a partir de los datos de ciclado galvanostático para $\text{Li}_2\text{CuP}_{0.9}\text{V}_{0.1}\text{O}_4$. Se observa que durante la primera carga hay un

evento a 3.75 V atribuible a la primera desintercalación de litio acompañado de la oxidación de Cu (I) a Cu (II), esto concuerda con el rango reportado de 3.75-4.00 V [3]. El segundo evento a 4.75 V durante la primera carga concuerda con el rango reportado de 4.65-4.80 V [3]. Durante la primera descarga se observa un único evento a 3.0 V atribuible a la reinsertión parcial de iones litio en el material activo, el alto desplazamiento de potencial entre los eventos de carga y descarga indica la baja reversibilidad del sistema. Esta característica referente a la baja reversibilidad también se ve reflejada en la ausencia de eventos de desintercalación de ion litio en los datos graficados para los ciclos 2 y 3.

Las baterías ensambladas con Li_2CuPO_4 y $\text{Li}_2\text{CuP}_{0.8}\text{V}_{0.2}\text{O}_4$ no lograron cargarse a más de 3.6 V y por lo tanto no fue posible observar la desintercalación de litio del material. Este problema también se presentó con el Li_2CuPO_4 sintetizado por Vincent R. *et al.* en el 2021 y atribuyen el problema a una pobre difusión del ion litio [4]. Los resultados obtenidos en el presente trabajo sugieren que el contenido de vanadio de $x=0.1$ mejora la conductividad de la muestra y permite desintercalarse litio del material. No obstante, la capacidad de carga obtenida sigue estando muy por debajo de los valores teóricos para el sistema estudiado.

CONCLUSIONES

Se lograron sintetizar los compuestos Li_2CuPO_4 , $\text{Li}_2\text{CuP}_{0.9}\text{V}_{0.1}\text{O}_4$ y $\text{Li}_2\text{CuP}_{0.8}\text{V}_{0.2}\text{O}_4$ mediante la técnica cerámica. En las condiciones evaluadas se encontró que la inclusión de vanadio extrae cobre de la estructura para formar la impureza Cu_3VO_4 . La sustitución de fósforo por vanadio demostró un efecto positivo durante la síntesis al suprimir la reacción de desproporción del Cu (I). No fue posible extraer litio del cátodo preparado con Li_2CuPO_4 , pero la incorporación de vanadio en $\text{Li}_2\text{CuP}_{0.9}\text{V}_{0.1}\text{O}_4$ permitió observar la desintercalación de Li^+ a un potencial de 3.75 V vs Li/Li^+ y se infiere que el vanadio mejora la conductividad del material. A pesar de la mejora con respecto al material puro, la batería ensamblada con $\text{Li}_2\text{CuP}_{0.9}\text{V}_{0.1}\text{O}_4$ demostró una capacidad de carga aprovechable muy por debajo del máximo teórico y se observó una reversibilidad pobre.

REFERENCIAS

- [1] Ling J, Karuppiah C, Krishnan SG, Reddy M V., Misnon II, Ab Rahim MH, Yang CC, Jose R. Phosphate Polyanion Materials as High-Voltage Lithium-Ion Battery Cathode: A Review. *Energy & Fuels* 2021; 35:10428-10450.
- [2] Hautier G, Jain A, Ong SP, Kang B, Moore C, Doe R, Ceder G. Phosphates as lithium-ion battery cathodes: An evaluation based on high-throughput ab initio calculations. *Chemistry of Materials* 2011; 23:3495–3508.
- [3] Snyder K, Raguž B, Hoffbauer W, Glaum R, Ehrenberg H, Herklotz M. Lithium Copper(I) Orthophosphates $\text{Li}_3-x\text{Cu}_x\text{PO}_4$: Synthesis, Crystal Structures, and Electrochemical Properties. *Z Anorg Allg Chem* 2014; 640:944–951.
- [4] Vincent RC, Shen JX, Preefer MB, Lin J, Seeler F, Schierle-Arndt K, Persson KA, Seshadri R. Prospects for Employing Lithium Copper Phosphates as High-Voltage Li-Ion Cathodes. *Journal of Physical Chemistry C* 2021; 125:13123–13130.

[5] Muy S, Bachman JC, Chang HH, Giordano L, Maglia F, Lupart S, Lamp P, Zeier WG, Shao-Horn Y. Lithium Conductivity and Meyer-Neldel Rule in Li_3PO_4 - Li_3VO_4 - Li_4GeO_4 Lithium Superionic Conductors. *Chemistry of Materials* 2018; 30:5573–5582.

[6] Ben Yahia H, Shikano M, Yamaguchi Y Li_2CuVO_4 : A high capacity positive electrode material for Li-ion batteries. *J Power Sources* 2016; 320:43–48.

[7] Xiao H, Lei L, Wang Z, Chen Y. Facile synthesis of mesoporous cuprous oxide nanoparticles for enhanced visible-light-driven photodegradation. *Journal Wuhan University of Technology, Materials Science Edition* 2018; 33:91–96.

[8] Bamberger CE, Specht ED, Anovitz LM. Crystalline Copper Phosphates: Synthesis and Thermal Stability. *Journal of the American Ceramic Society* 1997; 80:3133–3138

SÍNTESIS VERDE DEL SULFURO DE BISMUTO PARA SU POTENCIAL APLICACIÓN EN DISPOSITIVOS DE ALMACENAMIENTO DE ENERGÍA.

GREEN SYBTHESIS OF BISMUTH SULFIDE FOR POTENTIAL APPLICATION IN ENERGY STORAGA DEVICE.

Javier Morales Rodríguez¹, Idalia Gómez De la Fuente¹, Boris Ildusovich Kharissov¹, Yolanda Peña Méndez¹ y Sergio Alberto Gamboa Sánchez²

¹Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Pedro de Alba S/N, Cd. Universitaria, C.P 66455, San Nicolás de los Garza, Nuevo León, México.

²Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Energías Renovables, Priv. Xochicalco S/N, Azteca, C.P. 62580, Temixco, Morelos, México.

javier.moralesro@uanl.edu.mx

RESUMEN. En la actualidad se ha prestado mucha atención al desarrollo de sistemas de almacenamiento de alta potencia y densidad energética, debido al uso excesivo de dispositivos electrónicos y por ende a la quema continua de combustibles fósiles teniendo como consecuencia una crisis ambiental casi irreversible, debido a esto el desarrollo de tecnologías de almacenamiento es tan importante como el desarrollo de fuentes de energía alternas. De lo anterior se ha llevado a cabo la investigación de materiales semiconductores como el sulfuro de bismuto. Este material es un semiconductor tipo A^VB^{VI} con estructura cristalina ortorrómbica; este material ha tenido gran interés debido a su bajo costo y su gran abundancia natural y sus propiedades ópticas, eléctricas y electroquímicas. El objetivo de este trabajo es obtener una nueva ruta de síntesis del Bi₂S₃ que requiera de menor energía y que cumpla con las características reportadas del material, se llevó a cabo la preparación del Bi₂S₃ por la ruta de síntesis co-precipitación, utilizando el Bi(NO₃)₃, Na₂S₂O₃, C₆H₅Na₃O₇•2H₂O y H₂O en la composición del material.

Por medio de la difracción de rayos X se obtuvieron las señales características de la bismutinita con respecto a la ficha cristalográfica PDF#17-0320, las señales intensas corresponden al plano (310), (211), (221). Se obtuvieron los valores de porcentaje de reflectancia por medio de UV-Vis-NIR y con los datos obtenidos se calculó la Eg. El espectro de infrarrojo con transformada de Fourier presento las señales a 740, 1,365, 1,733, 2,327, 3,016 cm⁻¹ correspondientes a los enlaces Bi-S, O-H, C=O, C-O-C y C-H. Los resultados anteriores muestran que el sulfuro de bismuto es candidato para la aplicación en dispositivos de almacenamiento de energía.

Palabras clave: baterías, sulfuro de bismuto, método coprecipitación.

ABSTRACT. At present, much attention has been paid to the development of high power and energy density storage systems, due to the excessive use of electronic devices and therefore to the continuous burning of fossil fuels resulting in an almost irreversible environmental crisis, due to this, the development of storage technologies is as important as the development of alternative energy sources. From the above, research has been carried out on semiconductor materials such as bismuth sulfide. This material is an A^VB^{VI} type semiconductor with orthorhombic crystalline structure; this material has been of great interest due to its low cost and great natural abundance and its optical, electrical and electrochemical properties. The aim of this work is to obtain a new bismuth sulfide synthesis route that requires lower energy and meets the reported characteristics, the preparation of Bi₂S₃ by a green synthesis route was carried out, using Bi(NO₃)₃, Na₂S₂O₃, C₆H₅Na₃O₇•2H₂O and H₂O in the composition of the material.

By means of X-ray diffraction, the characteristic signals of bismuthinite were obtained with respect to the crystallographic record PDF#17-0320, the intense signals correspond to the (310), (211), (221) plane. The reflectance percentage values were obtained by UV-Vis-NIR and with the obtained data the E_g was calculated. The Fourier transform infrared spectrum presented the signals at 740, 1,365, 1,733, 2,327, 3,016 cm⁻¹ corresponding to the Bi-S, O-H, C=O, C-O-C and C-H bonds. The above results show that bismuth sulfide is a candidate for application in energy storage devices.

Keywords: batteries, bismuth sulfide, coprecipitation method.

INTRODUCCIÓN

Hoy en día debido al crecimiento exponencial de la población se tiene un uso exhaustivo de los dispositivos de almacenamiento de energía como lo son las baterías de iones de litio [1] [2]. Las investigaciones actuales se centran en los calcogenuros de metales de transición para aplicaciones de dispositivos de almacenamiento de energía, principalmente por su elevada capacidad teórica y su mayor estabilidad de ciclo y han demostrado ser candidatos prometedores para materiales electroquímicamente activos en baterías de iones de litio (LIB) [3] [4]. El sulfuro de bismuto, es un semiconductor tipo A^VB^{VI}, que cristaliza en un sistema ortorrómbico, presenta un valor de brecha de energía de 1.3 – 1.7 eV, una capacidad teórica de 625 mA h/g, este material ha tenido gran interés debido a su bajo costo, su gran abundancia natural y su baja toxicidad [5] [6]. En la actualidad, el principal problema que limita la aplicación del Bi₂S₃ en las LIB es su gran expansión volumétrica durante los procesos de litación – deslitación [7].

Por lo anterior, diversos investigadores han estudiado el sulfuro de bismuto para su potencial aplicación en dispositivos de almacenamiento de energía, es así que Kumari y colaboradores prepararon Bi₂S₃ por el método hidrotermal utilizando CH₄N₂S como fuente de S²⁻, tuvieron como resultado de la síntesis, nanoestructuras de Bi₂S₃ en forma de flor formada por nanovarillas con una longitud y un diámetro de 150 – 400 nm y 10 – 150 nm respectivamente [8]. Moyseowicz desarrolló un método de síntesis escalable en un solo paso de Bi₂S₃ con un rango de trabajo de 0 – 75 °C, utilizó (NH₄)₂S como fuente precursora de S²⁻. Obteniendo como resultado una estructura cristalina ortorrómbica, con morfología en forma de nanovarillas, presentando lijeros imperfectos al aumentar la temperatura de síntesis [9].

Yue y su equipo de trabajo sintetizaron Bi_2S_3 mediante un proceso solvotermal, seguido de una posterior calcinación, trabajaron con $\text{CH}_4\text{N}_2\text{S}$ como fuente precursora de S^{2-} . Obtuvieron como resultado una estructura cristalina ortorrómbica, se presentaron señales intensas en los planos (130) y (211) del Bi_2S_3 , lo que indica que los productos son altamente cristalinos. La morfología del material resultó en estructuras con forma de limoncillo, compuestas por nanovarillas de ~ 100 nm de diámetro [10]. En el presente trabajo, se realizó la preparación del Bi_2S_3 por una ruta de síntesis sustentable en un solo paso, utilizando el $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ como fuente precursora de S^{2-} y un agente acomplejante ($\text{C}_6\text{H}_5\text{Na}_3\text{O}_7 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) para controlar la velocidad de reacción entre los iones presentes. Se llevó a cabo la síntesis del material sin citrato de sodio así como con citrato de sodio en la composición del material. El Bi_2S_3 se caracterizó mediante técnicas ópticas y espectroscópicas.

METODOLOGÍA

El sulfuro de bismuto se sintetizó por el método de co-precipitación, utilizando las soluciones de $\text{Bi}(\text{NO}_3)_3$ 0.1 M, $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ 0.4 M, $\text{C}_6\text{H}_5\text{Na}_3\text{O}_7 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ 0.2 M para obtener el material Bi_2S_3 . Se preparó el Bi_2S_3 a 45°C durante 2 h, posteriormente, se almacenó el material para obtener el precipitado de color café oscuro de Bi_2S_3 , después se filtró de forma convencional y se lavó con H_2O destilada y EtOH. El filtrado resultante se secó a 60°C para obtener el polvo de Bi_2S_3 y por último se aplicó un tratamiento térmico a 220°C durante 1 h.

El Bi_2S_3 sin citrato de sodio y con citrato de sodio se caracterizó por medio de XRD para analizar la estructura cristalina y tamaño de grano utilizando el difractor PANalytical modelo X'Pert Pro; se llevó a cabo el análisis óptico por medio del espectrómetro UV-Vis-NIR Jasco modelo V-770, se evaluó la presencia de los enlaces correspondientes con el espectrómetro FT-IR Perkin Elmer modelo Spectrum Two y se analizó la morfología con un FE-SEM JEOL modelo JSM-6701F.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Difracción de rayos X

En la **Figura 1** se presenta el patrón de difracción de Bi_2S_3 sin citrato de sodio y del Bi_2S_3 con citrato de sodio, las señales de ambos materiales coinciden con la ficha cristalográfica PDF#17-0320 que corresponde al mineral bismutinita, por lo que el material calcogenuro presenta una estructura cristalina ortorrómbica, se observa que las señales de estos materiales son de la misma intensidad. El patrón de difracción de los materiales antes mencionados presentan tres señales intensas correspondientes al plano (310), (211) y (221) a valores de $2\theta = 25.08$, 28.69 y 31.88 ; utilizando la ecuación de Debye Scherrer se obtuvieron tamaños de grano calculados de 15.35, 18.87 y 20.31 nm correspondientemente. Las señales intensas demuestran que el Bi_2S_3 es de alta cristalinidad, además, las fases cristalinas secundarias, como el bismuto cristalino, el azufre o el óxido de bismuto, no están presentes, lo que indica la alta pureza de los productos resultantes.

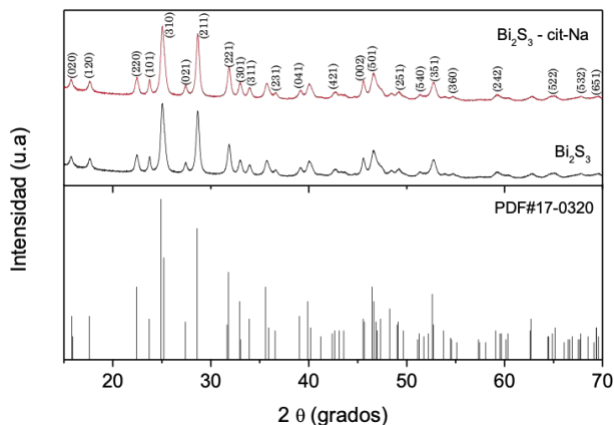


Figura 1. Patrón de difracción de rayos X del a) Bi_2S_3 sin citrato de sodio y b) Bi_2S_3 con citrato de sodio.

Espectroscopía InfraRojo con Transformada de Fourier

El análisis FT - IR de los compuestos obtenidos de Bi_2S_3 presentaron una señal intensa a 740 cm^{-1} característica del enlace Bi - S y señales de menor intensidad correspondientes a los enlaces O - H, C = O, C - O - C y C - H a valores de $1,365$, $1,733$, $2,327$ y $3,016\text{ cm}^{-1}$ como se observa en la **Figura 2**. La presencia de los enlaces O - H, C = O, C - O - C y C - H se debe a los lavados realizados con H_2O destilada y EtOH y de la temperatura aplicada en el secado de dichos materiales.

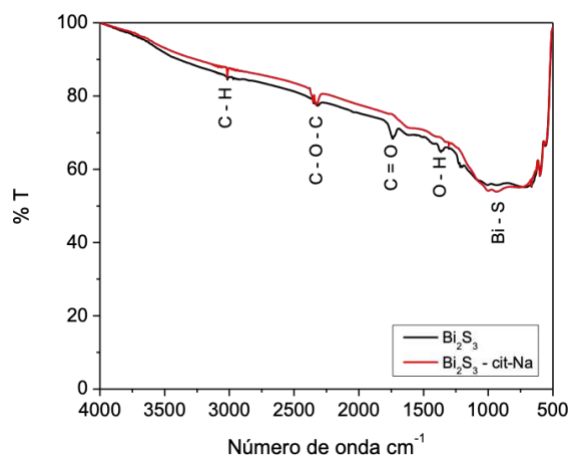


Figura 2. Espectro de infrarojo con transformada de Fourier del a) Bi_2S_3 sin citrato de sodio y b) Bi_2S_3 con citrato de sodio.

Espectroscopía UltraVioleta Visible

En la **Figura 3** se presenta el análisis de UV-Vis-NIR del Bi_2S_3 sin y con citrato de sodio. Dichos compuestos exhiben un porcentaje de reflectancia difusa del 12 – 15 % en el rango visible. Se utilizó la metodología Kubelka-Munk, para calcular la brecha de energía, teniendo como resultado un valor de $E_g = 1.18$ y 1.26 eV como se observa en la **Figura 4** que corresponden al Bi_2S_3 sin citrato de sodio y Bi_2S_3 con citrato de sodio, respectivamente.

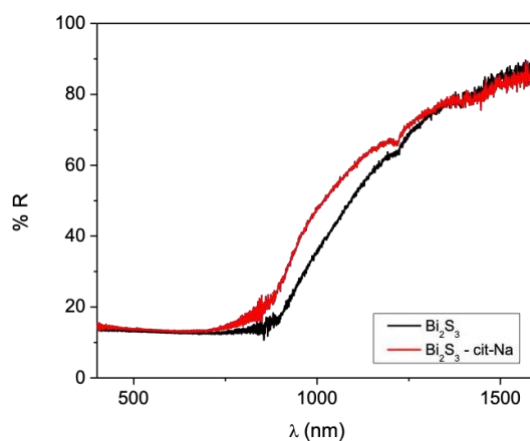


Figura 3. Espectro óptico de reflectancia difusa del a) Bi_2S_3 sin citrato de sodio y b) Bi_2S_3 con citrato de sodio.

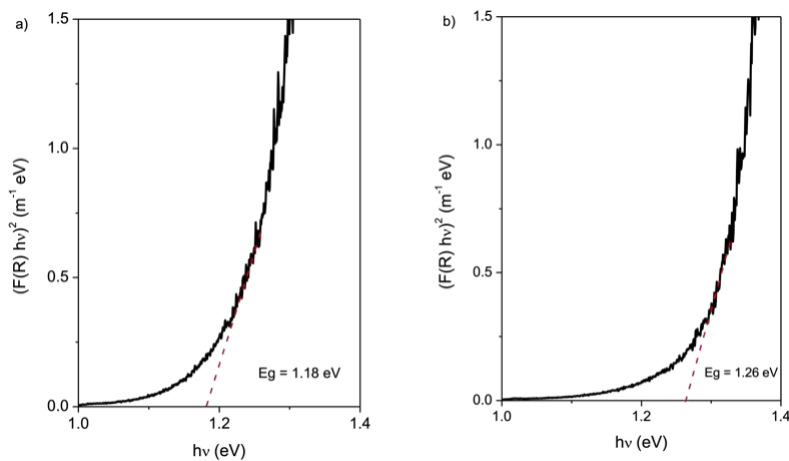


Figura 4. Brecha de energía de a) Bi_2S_3 sin citrato de sodio y b) Bi_2S_3 con citrato de sodio.

Microscopía Electrónica de Barrido

En la **Figura 5 a** y **Figura 5 b** se presenta la morfología del Bi_2S_3 sin citrato de sodio, en el inciso a se observa la micrografía del material a 9,500 aumentos, exhibiendo un patrón tipo fractal en forma de flor. En el inciso b se tiene la micrografía a 20,000 aumentos, se distingue la morfología tipo flor constituida por nanovarillas de Bi_2S_3 .

En la **Figura 6 a** y **Figura 6 b** se presenta la morfología del Bi_2S_3 con citrato de sodio, en el inciso a se tiene la micrografía del material con 9,500 aumentos, se aprecia un patrón continuo de conchas de mar formada por nanocumulos de Bi_2S_3 , se presenta una aglomeración del mismo. En el inciso b se observa la micrografía a 20,000 aumentos, se exhibe una mayor definición de la aglomeración del material antes mencionado, el citrato de sodio provoca que no se formen las nanovarillas de Bi_2S_3 , debido a la cinética de reacción y formación del mismo.

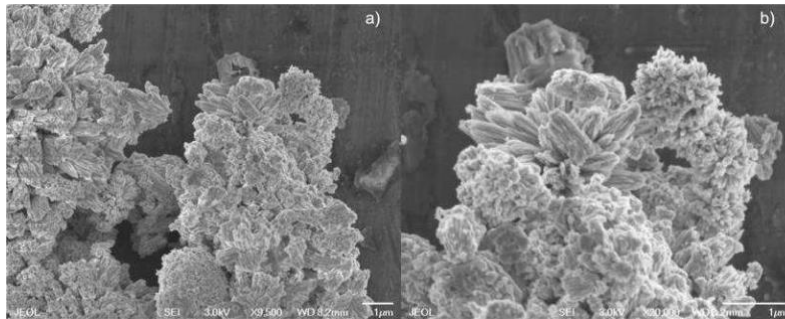


Figura 5. Imágenes FE-SEM de a) Bi_2S_3 sin citrato de sodio a 9,500 x y de b) Bi_2S_3 sin citrato de sodio a 20,000 x.

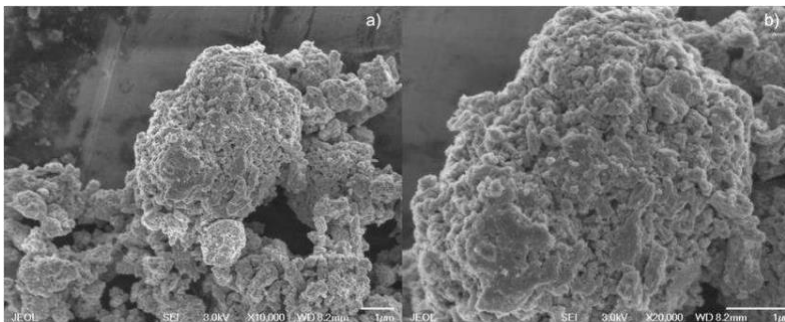


Figura 6. Imágenes FE-SEM de a) Bi_2S_3 con citrato de sodio a 9,500 x y b) Bi_2S_3 con citrato de sodio a 20,000 x.

CONCLUSIONES

Se llevó a cabo la preparación del Bi_2S_3 sin citrato de sodio y con citrato de sodio por una ruta de síntesis sustentable y económica, el análisis por difracción de rayos X confirma la policristalinidad del material, los materiales obtenidos presentan una estructura cristalina ortorrómbica y no se presentan indicios de impurezas de Bi_2O_3 . El análisis de FT – IR confirma la formación del enlace Bi – S con una señal intensa a 740 cm^{-1} . El Bi_2S_3 sin y con citrato de sodio exhiben un porcentaje de reflectancia difusa de 12 – 15 % y una brecha de energía calculada de 1.18 y 1.26 eV respectivamente. Las imágenes de FE – SEM muestran la morfología del Bi_2S_3 sin citrato de sodio en forma de flor construida de nanovarillas y de la morfología del Bi_2S_3 con citrato de sodio en forma de conchas de mar formada por aglomerados del material. Con estos resultados preliminares del Bi_2S_3 se concluye que el Bi_2S_3 sin citrato de sodio es más apto para el desarrollo de sistemas de almacenamiento de energía debido a que presenta una menor energía de banda prohibida y una menor área de contacto para incorporar otros compuestos en su composición como se observó en las micrografías de FE-SEM correspondientes.

REFERENCIAS

- [1] Fei D., Liyi S., Guorong C., Dengsong Z. Silicon/Carbon Composite Anode Materials for Lithium-Ion Batteries. *J. Electrochemical Energy Reviews* 2019; 2: 149 – 198.
- [2] Simon P., Gogotsi Y. Materials for electrochemical capacitors. *J. Nature Materials* 2008; 7: 845-854.
- [3] Mensah-Darkwa K., Nframah Ampong D., Agyekum E., de Souza F. M., Gupta R. K. Recent Advancements in Chalcogenides for Electrochemical Energy Storage Applications. *J. Energys* 2022; 15 (11): 4052.
- [4] Xia Q, Yang H, Wang M., Yang M., Guo Q., Wan L., Xia H., Yu Y.. High Energy and High Power Lithium-Ion Capacitors Based on Boron and Nitrogen Dual-Doped 3D Carbon Nanofibers as Both Cathode and Anode. *J. Energy Chemistry* 2017; 22 (7): 260-268.
- [5] Ajiboye O. T., Onwudiwe C. D. Bismuth sulfide based compounds: Properties, synthesis and applications. *J. Results in Chemistry* 2021; 3 (3): 100151.
- [6] Kumar R., Sahoo S., Joanni E., Kumar-Singh R., Kian-Tan W., Krishna-Kar K., Matsuda A. Recent progress in the synthesis of graphene and derived materials for next generation electrodes of high performance lithium ion batteries *Pecs* 2019; 75: 100786.
- [7] Jin B., Xiao C., Olsson E., Huimin W., Shiquan W., Qiong C., Chuanqi F. Synthesis of Bi_2S_3 /carbon nanocomposites as anode materials for lithium-ion batteries. *J Materials Science and Technology* 2020; 50: 92 – 102.
- [8] Kumari P., Awasthi K., Agarwal S., Ichikawa T., Kumar M., Jain A. Flower-like Bi_2S_3 nanostructures as highly efficient anodes for all-solid-state lithium-ion batteries. *J. Royal Society of Chemistry Advance* 2019; 9: 29549 – 29555.
- [9] Moyseowicz A. Scalable one-pot synthesis of bismuth sulfide nanorods as an electrode active material for energy storage applications. *J. Solid State Electrochemistry* 2019; 23: 1191 – 1199.
- [10] Hongwei Y., Shujun C., Pinjiang L., Congxu Z., Xiaogang Y., Tingting L., Yuanhao G. Lemongrass-like Bi_2S_3 as a high-performance anode material for lithium-ion batteries. *J. Ionics* 2019; 25: 3587 – 3592.

BAMBÚ, MATERIAL DEL FUTURO: MADERA ECOLÓGICA PARA REALIZACIÓN DE CONSTRUCCIONES “VERDES”, DISEÑOS ELEGANTES, CONFORTABLES Y SOSTENIBLES.

BAMBOO, FUTURE´S MATERIAL: ECOLOGICAL WOOD REALIZATION "GREEN" CONSTRUCTIONS, ELEGANT, COMFORTABLE AND SUSTAINABLE DESIGNS.

Emma Gema García González^{1*}, Elizabeth Chacón Baca²

^{1,2} *Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias de la Tierra, Carr. a Cerro Prieto Km. 8. Ex – Hacienda de Guadalupe. Linares, N.L. México, C.P. 67700.*

² *cienciafct@gmail.com*

*e-mail: emma.garciag@uanl.mx

RESUMEN. El bambú es una planta ecológica y multifuncional, uno de los materiales más renovables, un recurso sostenible y rentable, siendo una alternativa cada vez más utilizada en diversos campos. Se ha empleado a través de la historia por ser un elemento muy respetuoso con el medioambiente. Su aplicación en construcción es excelente, ya que posee unas propiedades inmejorables: 1) Elástico, ligero, resistente estructuralmente, con una relación fuerza-peso mayor que el acero, y más flexible que los plásticos reforzados con fibra de vidrio. 2) Gran resistencia a la compresión y a la tracción, comparable a la del concreto. 3) Atractivo, económico y natural. 4) Renovable, de rápida regeneración. 5) Material térmico y aislante acústico. 6) Se adapta a varios estilos decorativos. 7) Huella ecológica inferior a la de la mayoría de los materiales usados en construcción. Dependiendo de la parte de la planta empleada, se pueden construir cubiertas, andamios, pilares, invernaderos, tablonés, columnas delgadas, vigas, vallas, muebles, accesorios del hogar y adquirir fines ornamentales, medicinales y elaborar artesanías. El objetivo del presente trabajo, es conocer el uso del bambú como componente importante en construcción debido a sus óptimas cualidades y mostrar características de ejemplos admirables existentes actualmente a nivel internacional. La metodología utilizada ha sido el apoyo en una búsqueda de documentos digitales, artículos publicados y páginas Web (sitios confiables), mostrando estudios sólidos en relación al tema analizado en esta investigación, proporcionando al mismo tiempo evidencias y ayudando a validar la información. Los resultados obtenidos se muestran a través de imágenes referidas a muestras espectaculares que se encuentran distribuidas a través del mundo. Como conclusión, afirmar que debido a los buenos beneficios logrados en su utilización, el bambú sigue siendo una tecnología tradicional, que atrae la atención de diseñadores, arquitectos e ingenieros para integrarlo en las construcciones más modernas.

Palabras clave: *Bambú, usos, construcción, sostenible.*

ABSTRACT. Bamboo is ecological and multifunctional plant, one of most renewable material, sustainable and profitable resource, increasingly alternative use in various study fields. It has been used through history being very careful element with environment. Its application is excellent in construction, due suitable properties: 1) It's elastic, light, structurally resistant material, with greater force-weight ratio than

steel, and more flexible than fiberglass-reinforced plastics. 2) It has high compressive and tensile strength, comparable concrete. 3) It's attractive, economical and natural material. 4) Renewable resource, fast regeneration plant. 5) It's thermal and acoustic insulation material. 6) It's appropriate in many decorative styles. 7) It has ecological footprint, lower than most materials used in construction. Depending part's plant used, can be built roofs, scaffolding, pillars, greenhouses, planks, thin columns, beams, fences, furniture, home accessories, and it acquires ornamental, medicinal purposes, and craft elaboration. Present work's objective, is know bamboo's use as important construction component due its optimal qualities, and show characteristics of internationally admirable examples. Used methodology was search in digital documents, published articles and Web pages (reliable sites), offering solid studies related to topic analyzed in this report, evidence providing and helping to validate information. Obtained results are expressed with images referring spectacular samples distributed around the world. Concluding, bamboo has achieved good benefits in its use, hence continues being traditional technology; attracts designers, architects and engineers attention, to integrate it into the most modern constructions.

Keywords: Bamboo, applications, structures, sustainable.

INTRODUCCIÓN

La palabra bambú proviene del malayo «Mambu», idioma de un pueblo que habitaba la península de Malaca (compuesta actualmente, por territorio perteneciente a Birmania, Malasia, Singapur y Tailandia). Los portugueses introdujeron esta planta en España, en el siglo XVI, con el nombre de “bambu”. Científicamente, no es árbol (así se consideró durante años) sino que es una planta; gramínea como el maíz, y pertenece a la subfamilia de las *bambusoideas*. Comprende alrededor de 118 géneros y 1,600 especies, es perenne en casi todas sus especies, y tiene un rápido crecimiento. El tallo gramíneo es conocido como “culmo”, es leñoso y está dividido en anillos (nodos o nudos) y partes huecas (entrenudos o entrenudos) y crecen en grupos ramificados que surgen de un tallo subterráneo (rizoma) (**Figura 1**). De los nodos de culmos jóvenes nacen las hojas, y las ramas con hojas crecen en los culmos más maduros. Las regiones donde más abunda son las zonas tropicales y subtropicales (**Figura 2**), aunque algunas especies se desarrollan en climas de temperaturas inferiores a -20° C, caso de la cordillera de los Andes o del Himalaya. El 64% de las especies son nativas del sureste de Asia, pero su distribución abarca India, Himalaya, Pacífico Sur y Norte de Australia; en América, se localiza desde EEUU a Argentina, Chile, Colombia y Ecuador. Crece, de forma natural, en todos los continentes excepto en Europa (aunque se han encontrado fósiles de más de 2.000 años) y la Antártida. Los bambúes leñosos son los más interesantes como material estructural debido a sus características, llegando a aparecer hasta los 4000 m de altitud; puede resistir una amplia variación de temperaturas, desde 28°C hasta 50°C, en áreas húmedas. La mayor parte crece en suelos arcillosos húmedos, arenosos o francoarenosos y con un contenido de humedad relativa del 80%. Rebrotta tantas veces como se corte, garantizando una continuidad en la producción que es una ventaja para llevar a cabo su explotación y aprovechamiento.

El objetivo del presente trabajo, es conocer el uso del bambú como componente importante en construcción debido a sus óptimas cualidades.

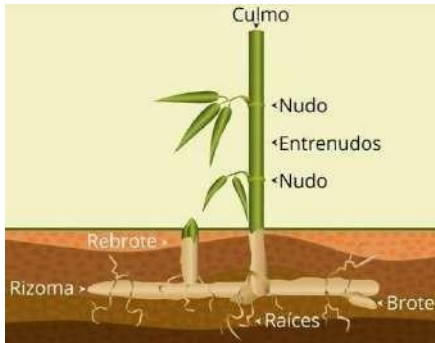


Figura 1. Morfología del bambú.

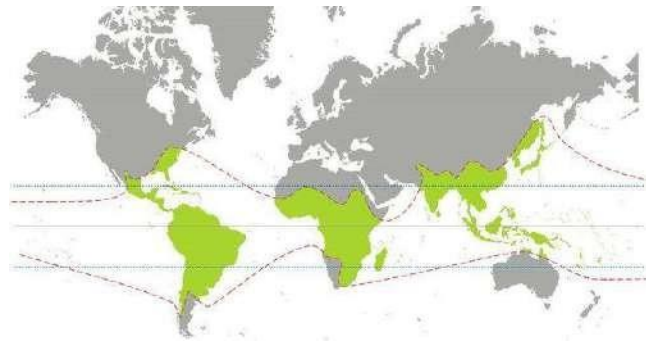


Figura 2. Distribución geográfica mundial.

METODOLOGÍA

El bambú ha sido desde hace siglos una planta muy importante; se tiene referencia sobre su uso principal en territorios menos desarrollados y zonas rurales, asociándose este material a cabañas en la selva o a casas muy humildes de gente con pocos recursos y ha llevado el sobrenombre de “madera de los pobres” (Figura 3). En las últimas décadas, gracias a la experimentación y diseño realizados por arquitectos e ingenieros, este material se considera como insumo de construcción y diseño de gran valor estético y arquitectónico (Figura 4). Por ello, esta planta con características especiales, puede ser usada como material en edificación, no solo desde el campo del diseño arquitectónico, sino en construcciones de bajo costo que prioricen el cuidado del medio ambiente. Hoy en día, representa una gran alternativa frente a los materiales de construcción costosos, como el concreto y el acero, tanto desde el punto de vista mecánico, como frente a requerimientos energéticos, constructivos, de resistencia, rigidez por unidad de área, facilidad y seguridad de uso, siendo conocido como el “acero orgánico” (Tabla I). La gran versatilidad del bambú se debe en gran parte a su estructura anatómica y morfológica; la sección circular ahuecada presenta algunas ventajas estructurales en comparación con secciones macizas o rectangulares de otros materiales. Gracias a las propiedades mencionadas, las construcciones son resistentes estructuralmente y tienen un óptimo comportamiento ante sismos. Las mejores especies de bambú para la construcción (Tabla II) se encuentran en los trópicos, dentro de los géneros: *Guadua*, *Dendrocalamus* y *Bambusa*. En México, existen al menos 52 especies nativas de bambú, de las cuales 34 son endémicas, siendo las especies nativas más comunes la *Guadua aculeata*, *Guadua amplexifolia*, *Guadua velutina*, *Guadua angustifolia* y *Bambusa oldhamii*.



Figura 3. Casa humilde, en la selva.



Figura 4. Ulaman Eco Resort (Tailandia).

Tabla I. Comparaciones estructurales.

MATERIAL	RESISTENCIA DE DISEÑO (Kg/cm ²)	MASA POR VOLUMEN (Kg/m ³)	RELACIÓN DE RESISTENCIA (R/M)	MÓDULO DE ELASTICIDAD (Kg/cm ²)	RELACIÓN DE RIGIDEZ (E/M)
CONCRETO	82	2400	0.032	127400	53
ACERO	1630	7800	0.209	2140000	274
MADERA	76	600	0.127	112000	187
BAMBU	102	600	0.17	203900	340

Tabla II. Géneros y características.

GENERO	ALTURA (m)	DIÁMETRO (cm)	ORIGEN
<i>Bambusa</i>	6 a 30	3 a 18	China, India, Birmania, Taiwán
<i>Chusquea</i>	4 a 6	2 a 4	Chile, Argentina
<i>Dendrocalamus</i>	20 a 35	20 a 30	India, Birmania, Taiwán
<i>Gigantochia</i>	10 a 16	8 a 15	Malasia, Indonesia, Filipinas
<i>Guadua</i>	10 a 30	5 a 15	Colombia, Ecuador, México, Bolivia
<i>Phyllostachys</i>	5 a 22	2 a 17	China, Japón

Las propiedades físico-mecánicas del bambú dependen de muchos factores [1], como la humedad, clima, topografía, terreno en el que crece, edad, parte de la planta a utilizar, corte y tratamiento. Por ello, se describen las condiciones más favorables para su crecimiento: 1) Factores climáticos: Se desarrolla bien en altitudes comprendidas entre los 40 y los 2.340 metros sobre el nivel del mar; humedad relativa entre el 75 % y 80 %, ambiente caluroso y húmedo; brillo solar comprendido entre las 1,800 y las 2,200 horas/año; pluviometría promedio comprendida entre 1,000 mm hasta más de 4,050 mm y el rango de precipitación pluvial debe oscilar entre los 2,000 y 2,500 mm/año; temperaturas varían entre los 9° C y 36° C. 2) Factores edáficos: Desarrollo en suelos areno-limosos, francos y franco-arenosos, suelos aluviales, a mediana profundidad, y pendientes empinadas; acidez promedio del suelo debe ser de pH 5,8 pero no resiste suelos salinos; textura del suelo puede ser cualquiera, siempre que exista suficiente humedad. 3) Edad: Cuando el crecimiento está entre 3 y 5 años, puede ser utilizado para uso en construcción, ya que es cuando alcanza su mayor capacidad resistente. 4) Parte de la planta: Las ramas de la parte superior se utilizan para realizar listones estructurales en la cubierta; el tronco para hacer cubiertas, andamios, pilares, tabloncillos, columnas delgadas y vigas; la parte inferior del tronco para construir pilares y vallas. 5) Corte: Debe hacerse en menguante lunar, preferiblemente en las tres noches de mayor oscuridad, en época seca y/o fría es más favorable. 6) Tratamiento: Es vulnerable a la humedad, escarabajos, termitas, hongos, por lo que es necesario aplicar tratamientos para proteger contra las plagas.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Las propiedades mecánicas del bambú se estudian en dirección paralela y perpendicular a las fibras. En el primer caso se estudian, la resistencia a compresión, tensión, cortante, flexión. Los trabajos llevados a cabo por [2], en relación a las propiedades físicas y mecánicas de dos especies de bambú (*Guadua angustifolia kunth* y *Bambusa oldhamii*) que crecen en México, se muestran resumidas en la siguientes tablas (**Tabla III**, **Tabla IV**).

Tabla III. Valores promedio de propiedades físicas.

ESPECIE/ORIGEN	HUMEDAD (%)	DENSIDAD
<i>Bambusa oldhamii</i> /México	9.5	0.66
<i>Guadua angustifolia kunth</i> /México	7.8	0.55

σ (MPa); E (GPa)

Tabla IV. Valores promedio de propiedades mecánicas.

ESPECIE/ORIGEN	Compresión		
	σ	E	ϵ
<i>Bambusa oldhamii</i> /México	56.1	24.6	0.0055
<i>Guadua angustifolia kunth</i> /México	12.7	0.59	0.0057

Desde el punto de vista de sustentabilidad, hay que tener en cuenta la cantidad de energía requerida para producir cada uno de sus componentes: ladrillos, vigas, cemento, tejas, etc. Mediante la identificación y cuantificación de los materiales de construcción consumidos por superficie construida, se puede conocer el impacto medioambiental que produce una tipología definida, a través de uno de los indicadores de impacto ambiental asociados al peso por m² de construcción, como las emisiones de CO₂ derivadas del proceso de fabricación de los materiales de construcción empleados en su ejecución.

Tabla V. Comparativa para construcción convencional y Bambú Guadua como material de construcción.

Emisión de CO ₂ para vivienda de 100 m ² y 50 años de vida útil	Emisión Construcción Ton. CO ₂	Emisiones uso vida útil Ton. CO ₂	Emisión Total Ton. CO ₂
Construcción convencional	83.9	134.5	218.4
Construcción con B. Guadua	26.3	127.9	154.2
Ahorro emisión Ton. CO ₂	57.6	6.6	64.2
Ahorro emisión CO ₂	69%	5%	29%

De la tabla anterior, se deduce que al utilizar Bambú Guadua como material de construcción en una vivienda unifamiliar estaremos dejando de emitir aproximadamente 1,3 toneladas de CO₂ al año.

Los estudios realizados por [3] para las propiedades mecánicas, en culmos de la especie *Guadua amplexifolia*, en Tantima (Veracruz) se expresan en la **Tabla VI**; en la **Figura 5** se muestra la relación que guardan entre sí los diferentes esfuerzos estudiados. Se tomó como referencia el resultado de los valores promedio obtenidos para la misma especie que crece en Monte Blanco (Veracruz), del estudio de [4], (**Tabla VII**) bajo la misma normatividad para el protocolo de ensayo. Al realizar la comparación, se vio que los resultados obtenidos eran similares, observándose una muy pequeña variación, posiblemente, debido a la anisotropía del material, y ubicación geográfica. Igualmente, estos resultados se compararon con los de [5] de la Universidad Nacional de Colombia pero utilizando *Guadua angustifolia kunth*, especie muy utilizada en construcción en Sudamérica. En la **Tabla VIII** se presentan otros resultados para esa misma especie, en otras investigaciones efectuadas por diversos autores. Este resultado es de los más representativos y justifica el nombre de acero vegetal para el material. La especie *Guadua amplexifolia* presenta tener propiedades similares a otras especies estudiadas en Sudamérica y que actualmente se utilizan como material de construcción, por lo que puede concluirse que resulta factible utilizar como material alternativo en construcción. Por todo lo anterior, se puede afirmar que las propiedades mecánicas estudiadas de la especie *Guadua amplexifolia* se encuentran dentro del rango de valores encontrados en estudios de otros investigadores, pero siempre hay que tener en cuenta las variables ubicación geográfica, edad del corte, curado, método de protección ante insectos y condiciones de crecimiento ya que inciden en las propiedades mecánicas de la *Guadua amplexifolia* y, en general, de todos los bambúes.

Tabla VI. Propiedades mecánicas de la *G. amplexifolia*.

PROPIEDAD	C	B	SB
Compresión paralela a la fibra	25.94	28.81	33.51
Cortante paralela a la fibra	3.85	3.98	5.01
Tensión paralela a la fibra	154.84	183.95	198.57
Flexión	22.82	82.74	249.19

Valores promedio de esfuerzos últimos en Mpa.

C: Cepa (Parte basal del culmo); B: Basa (Partemedia); SB: Sobrebasa (parte superior).

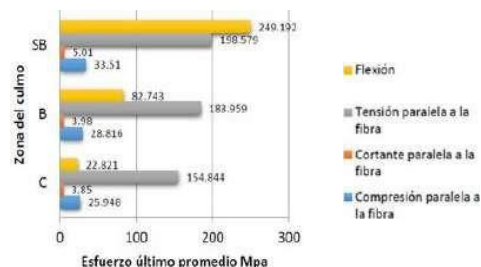


Figura 5. Relación de resultados entre las propiedades mecánicas de la *G. amplexifolia*.

Tabla VII. Baremo para las propiedades mecánicas de *G. amplexifolia*. Monte Blanco,

(Veracruz).

PROPIEDADES	C (Mpa)	B (Mpa)	SB (Mpa)
Compresión	24.20	29.12	34.64
Cortante	3.97	5.08	5.63
Flexión	73.3	92.63	103.82

Tabla VIII. Esfuerzo último a tensión *G. angustifolia kunt* en diferentes ensayos.

INVESTIGADOR	Mpa
[5]	190.7
[6]	91.8
[1]	148.4
Esta investigación	169.35

CONCLUSIONES

Se han realizado muchos estudios que demuestran sus extraordinarias cualidades para utilizarse en construcción: 1) Ecológico, purificador de la atmósfera, protege a los suelos de la erosión y rápido crecimiento. 2) Ayuda a reducir las emisiones de CO₂ a la atmósfera. 3) Resistente a ataques de insectos sometiéndolo a un adecuado tratamiento (vida útil hasta

tres décadas). 4) Costo relativamente bajo. 5) Atractivo, natural y encaje en varios estilos decorativos. 6) Material liviano, fácil de transportar y almacenar. 7) Alto grado de rigidez y elasticidad evitan su ruptura y resiste sismos; alta resistencia a tracción y a compresión. 8) Aislante térmico y acústico. En el mundo de la arquitectura de vanguardia, y en el resto de ámbitos, tiene cada vez más importancia y más valor debido a su estética, facilidad de trabajo y valor medioambiental. Alrededor del mundo se han registrado 1,048 usos diferentes del bambú en procesos industriales; por ello, se le conoce como “la planta de los mil usos” ya que de él se obtiene alimento, ropa, cosmética, material para construcción, muebles, productos farmacéuticos, papel, jardinería, etc. Finalmente, se muestran algunos de los ejemplos de arquitectura y proyectos de decoración con bambú.



Figura 6. Sala de exposiciones. Taiwan.



Figura 7. Arquitectura e interiores. Indonesia.



Figura 8. Cafeteria. Vietnam



Figura 9. Hotel. Indonesia.



Figura 10. Escuela. Indonesia.



Figura 11. Oficina de una fábrica de ropa. Vietnam.

REFERENCIAS

- [1] Luna P, Lozano J, Takeuchi C. Determinación experimental de valores característicos de resistencia para *Guadua angustifolia*. Maderas. Ciencia y tecnología 2014; 16(1): 77-92.
- [2] Tizapa SS, Jiménez RV, Sandoval AC. Curvas esfuerzo-deformación axial calculadas para las especies de bambú *Guadua angustifolia kunth* y *Bambusa oldhamii*. Espacio I+ D, Innovación más desarrollo 2019; 8(21): 97-117.
- [3] Medrano MTS, Mújica JAE, Gutierrez RSR. El bambú como elemento estructural: la especie *Guadua amplexifolia*. Nova Scientia 2016; 8(17): 657-677.
- [4] Ordóñez-Candelaria VR. Perspectivas del bambú para la construcción en México. Madera y Bosques 1999; 5(1): 3-12.
- [5] Ciro Velásquez HJ, Osorio Saraz JA, Vélez Restrepo, JM. Determinación de la resistencia mecánica a tensión y cizalladura de la *Guadua angustifolia* Kunth. Revista Facultad Nacional de Agronomía Medellín 2005; 58 (1): 2709-2715.
- [6] Castrillón Valdez BM, Malaver DM. Procedimientos de ensayo para la determinación de las propiedades físico-mecánicas de la *Guadua*. Universidad Nacional de Colombia, Tesis de Grado 2004.

CONVERSIÓN CATALÍTICA DE CO₂ A CO UTILIZANDO CATALIZADORES DE COBRE SOPORTADOS EN NANOTUBOS DE TITANATOS

CATALYST CONVERSION OF CO₂ TO CO BY USING TITANATE NANOTUBES-SUPPORTED COPPER CATALYST

Gerardo Antonio Flores Escamilla¹, Jesús Guadalupe Robles Leal¹, Valeria Ibarra Chávez¹, Nahomi Elizabeth Rojas Oyervides¹, Arturo Tadeo Reyes Díaz¹, Rodolfo Emanuel Pérez López¹

¹Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Subdirección de Ingeniería Química y Ambiental, Ave. Universidad S/N, Cd. Universitaria, San Nicolás de Los Garza N.L. México, C.P. 66455

*gerardo.florescm@uanl.edu.mx

RESUMEN. La valorización de CO₂ para producir compuestos de interés a través de procesos catalíticos ha tomado relevancia los últimos años. El uso de metales de transición (e.g., Cu, Rh y Ni) soportados en óxidos metálicos (e.g., Al₂O₃, TiO₂ y ZrO₂) ha sido destacado. Se sugiere que una de las etapas críticas en las reacciones es la conversión de CO₂ a CO conocida como la reacción inversa de desplazamiento agua-gas (RWGS). Por ello, existe la motivación de desarrollar catalizadores novedosos que promuevan la activación del CO₂ y su posterior conversión a otros productos. Los nanotubos de titanatos (TiNT) han sido utilizados con éxito en varias reacciones, debido a sus adecuadas propiedades texturales y de acidez-basicidad. Por ello, en este trabajo se les propuso como soporte en la deposición de nanopartículas de Cu por los métodos de deposición-precipitación (Cu/TiNT-D) e impregnación (Cu/TiNT-I). Los catalizadores fueron probados en la reacción RWGS a presión atmosférica y en un intervalo de 60 a 400 °C. Los resultados de las pruebas catalíticas muestran que tanto los TiNT como los Cu/TiNT son activos para la formación de CO y H₂O como únicos productos en todos los casos. Los catalizadores Cu/TiNT-I mostraron mayor actividad catalítica. Los estudios de fisisorción de N₂ mostraron que los TiNT tienen propiedades texturales adecuadas, con un área superficial específica de ~180 m²/g y un volumen total de poro de 0.67 cm³/g. A través de difracción de rayos-X (XRD) y espectroscopia Raman, se determinó que la fase cristalina de los TiNT corresponde a trititanatos de sodio (Na₂Ti₃O₇). Los resultados de los estudios de espectroscopia infrarroja (IR) en modo reflectancia difusa (DRIFTS) realizados en condiciones de reacción permitieron identificar especies superficiales en los catalizadores, las cuales pueden participar de forma activa durante la catálisis.

Palabras clave: Dióxido de carbono, nanotubos de titanatos, espectroscopia infrarroja, catalizadores de cobre soportado.

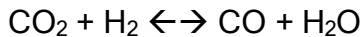
ABSTRACT. The valorization of CO₂ to produce important chemicals through catalytic processes has become a relevant topic in recent years. The use of transition metals (e.g., Cu, Rh and Ni) supported on metal oxides (e.g., Al₂O₃, TiO₂ and ZrO₂) has been highlighted. It is suggested that one of the critical steps in the reactions is the conversion of CO₂ to CO known as the reverse water-gas shift reaction (RWGS). Therefore, there is a motivation to develop novel catalysts that promote the activation of CO₂ and its subsequent conversion to other products. Titanate nanotubes (TiNT) have been used successfully in several reactions, due to their suitable textural, and acidity-base properties. For this reason, in this work they were proposed as a support in the deposition of Cu nanoparticles by the deposition-precipitation (Cu/TiNT-D) and impregnation (Cu/TiNT-I) methods. The catalysts were tested in the RWGS reaction at atmospheric pressure and in a range from 60 to 400 °C. The results of the catalytic tests show that both TiNT and Cu/TiNT are active for the formation of CO and H₂O as the only products in all cases. Cu/TiNT-I catalysts showed higher catalytic activity. N₂ physisorption studies showed that TiNTs have

adequate textural properties, with a specific surface area of $\sim 180 \text{ m}^2/\text{g}$ and a total pore volume of $0.67 \text{ cm}^3/\text{g}$. Through X-ray diffraction (XRD) and Raman spectroscopy, it was determined that the crystalline phase of the TiNT corresponds to sodium trititanates ($\text{Na}_2\text{Ti}_3\text{O}_7$). The results of diffuse reflectance mode infrared (IR) spectroscopy (DRIFTS) studies carried out under reaction conditions allowed the identification of surface species on the catalysts, which can actively participate during catalysis.

Keywords: Carbon dioxide, titanate nanotubes, infrared spectroscopy, supported copper catalysts

INTRODUCCIÓN

Los procesos de captura y secuestro de CO_2 representan una opción factible para contribuir a disminuir su presencia en el ambiente. No obstante, debido al bajo precio del CO_2 en el mercado y la alta demanda energética de estos procesos, se necesitan acoplar tales sistemas con otras etapas para obtener productos de interés [1]. Una alternativa prometedora es utilizar al CO_2 como molécula de partida y a través de reacciones catalíticas obtener compuestos químicos valiosos como CO, ácido acético, alcoholes, aldehídos, entre otros compuestos [2,3]. En estas reacciones resalta el uso de algunos metales de transición (e.g., Cu, Rh y Ni) soportados en óxidos metálicos (e.g., Al_2O_3 , TiO_2 y ZrO_2) y zeolitas [1,2]. De acuerdo con diversos estudios, una de las etapas críticas en las reacciones es la activación del CO_2 en CO en presencia de hidrógeno sobre la superficie de los catalizadores [4] mediante la reacción inversa de desplazamiento de agua-gas (RWGS, Ec. 1):



Ec. 1

Por lo que existe un fuerte interés en la síntesis de materiales novedosos que promuevan la activación del CO_2 a especies más reactivas como el CO y continuar la ruta de reacción efectiva para obtener los productos deseados. Uno de los nanomateriales que se ha utilizado con éxito en algunas reacciones son los nanotubos de titanatos (TiNT) [5] debido a su potencial para adsorber CO_2 , su alta área superficial y su capacidad para dispersar partículas de metales de transición [6]. Bajo ciertas condiciones de reacción y dependiendo de la naturaleza de los catalizadores pueden ocurrir otras reacciones en competencia. Por ejemplo, la hidrogenación para formar metano. A pesar de que el metano es también considerado como producto de interés, una alta formación de metano podría reducir el rendimiento y selectividad hacia el CO. Estudios reportados en la literatura indican que el Cu es el metal de transición más selectivo para formar CO [3]. En este trabajo evalúa el desempeño de catalizadores Cu soportados en TiNT en la reacción RWGS para generar CO y H_2O , así como la identificación de especies superficiales mediante espectroscopia IR en condiciones de reacción.

METODOLOGÍA

Los TiNT fueron sintetizados a través de un proceso hidrotermal a partir de TiO_2 (anatasa, Sigma-Aldrich), siguiendo las condiciones mencionadas en [6]. Se sintetizaron muestras de Cu (2% en masa) soportado en los TiNT utilizando dos métodos: un método de impregnación modificado descrito en [7] (Cu/TiNT-I) y por deposición-precipitación (Cu/TiNT-D) mediante la descomposición de urea según [8]; en ambos casos, se empleó $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ como precursor. Después, las muestras fueron calcinadas a $400 \text{ }^\circ\text{C}$ en flujo de aire y sometidas a un tratamiento reductor en una mezcla de H_2/He (20 % mol de H_2) a 250 y $400 \text{ }^\circ\text{C}$, respectivamente. Las propiedades texturales de los TiNT y Cu/TiNT-I se analizaron mediante fisisorción de N_2 a 77 K utilizando un equipo Micromeritics Tri-Star II plus. Se empleó el método BET para calcular el área superficial específica y el método BJH para determinar la distribución de tamaños de poro. Además, información sobre las fases cristalinas presentes fue obtenida por difracción de rayos X (XRD) en un equipo Bruker AXS D2 Phaser con radiación $\text{Cu K}\alpha$ ($\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$) y por un

espectrofotómetro Raman marca Thermo Fisher Scientific™ modelo DXR con láser a 780 nm. Se realizaron estudios de microscopía electrónica de barrido (SEM), así como un estudio EDS en un microscopio FEI-Helios Nanolab 600 con un voltaje de aceleración de 5 kV. Las pruebas de reacción se realizaron en un intervalo de temperatura de 60 a 400 °C utilizando una celda de un espectrofotómetro IR (FTIR Nicolet 6700) que funciona como un reactor continuo operado en forma diferencial. La alimentación a la celda/reactor consistió de una mezcla CO₂:H₂:He (80 mL/min) con una relación molar de 1:3:5. Al mismo tiempo de realizar la reacción en la celda, espectros IR se midieron en modo reflectancia difusa (DRIFTS) con una resolución de 4 cm⁻¹ y 128 barridos. Para una mejor presentación, a los espectros obtenidos se les restó el espectro de la muestra en flujo de He a 25°C. La línea del gas de salida de la celda se conectó a un espectrómetro de masas (MS) Omnistar Pfeiffer. Las señales de los principales fragmentos (m/e) de los componentes se reportan como valores relativos a la señal de He (m/e = 4), esto se hace para eliminar las influencias de fluctuaciones de presión.

RESULTADOS

La Figura 1a presenta los patrones de difracción de los TiNT calcinados a 400°C y de la muestra Cu/TiNT-I. Para los TiNT, se observan picos en el ángulo 2θ centrados a 10.40°, 24.4°, 28.6°, 48.2° y 61.0° los cuales corresponden a reflexiones en los planos (200), (110), (211), (020) y (422) que son característicos de trititanatos de sodio (Na₂Ti₃O₇, JCPDS 31-1329) en forma de nanotubos. La baja intensidad de las señales es consistente con la formación de cristales pequeños. La señal del plano (200) se ha asignado a la formación de multicapas en la estructura de los nanotubos. Con esta señal se calculó la distancia interlaminar obteniendo 0.85 nm. Cuando se incorporaron nanopartículas de Cu en los TiNT se observaron cambios en las reflexiones de los planos (200), (110) y (211), consistente con la contracción de las capas de los TiNT (d_{200} = 0.78 nm) por el intercambio de cationes Na⁺ por átomos de Cu. Sin embargo, se mantiene la fase cristalina de los TiNT. En los espectros Raman de la Figura 1b de los TiNT se observa la aparición de bandas a 190 cm⁻¹ (vibración del enlace Na-O-Ti)[9], 277 cm⁻¹ ($\nu_{\text{Ti-O}}$, $\nu_{\text{Na-O-Ti}}$)[10], 445 cm⁻¹ ($\nu_{\text{Ti-O-Ti}}$)[10], 665 cm⁻¹ ($\nu_{\text{Ti-O-Na}}$), 695 cm⁻¹ ($\nu_{\text{Ti-O-H}}$ por la presencia de agua)[10] y 910 cm⁻¹ ($\nu_{\text{Ti-O-Na}}$ en las intercapas)[10] cuya asignación corresponde a la estructura Na₂Ti₃O₇ de nanotubos multicapa, confirmando que en los nanotubos sólo se encuentra presente una sola fase cristalina. En el caso de la muestra Cu/TiNT-I se observó la formación de bandas casi a la misma frecuencia que los TiNT. No se observó la presencia de vibraciones Cu-O lo que podría indicar que las nanopartículas de Cu se encuentran altamente dispersas.

Los análisis de microscopía electrónica de barrido (SEM) revelaron la morfología nanotubular de los TiNT (Figura 1c), los cuales están orientados de forma aleatoria. Las dimensiones aproximadas de los TiNT son: diámetros externos de alrededor de 12 nm y el largo excede los 100 nm. Con el análisis elemental realizado por el microscopio (EDS) se encontró la presencia de sodio en los TiNT (aproximadamente 13 %masa). Los cationes Na⁺ pueden incrementar la basicidad del nanomaterial lo cual puede contribuir a mejorar la capacidad de adsorción del CO₂ y en consecuencia en el desempeño de los catalizadores durante la reacción RWGS. En la Figura 1d se presentan las isotermas de adsorción-desorción de N₂ para los TiNT y Cu/TiNT-I. En ambos casos la forma de la curva es característica de una isoterma tipo IV con un ciclo de histéresis tipo H. El área superficial específica calculada fue de 180 y 144 m²/g, respectivamente; mientras que el volumen total de poro fue 0.67 y 0.64 cm³/g. Los resultados indican que las partículas de Cu bloquearon algunos poros de los TiNT ocasionando la disminución del área específica.

Por otro lado, los resultados de las pruebas catalíticas se muestran en la Figura 2a. Para una mejor visualización, en la Figura 2a sólo presenta la señal del fragmento correspondiente al CO (m/e = 28) durante la reacción. Se puede observar que para los tres catalizadores de prueba se comienza a formar CO a partir de 300°C, lo que confirma que son activos en la reacción

(incluyendo los TiNT puros). No se observó la formación de otros productos (por brevedad no se incluyeron los fragmentos de los otros compuestos), lo que indica una selectividad del 100%. El catalizador más activo fue el Cu/TiNT-I; por ello, los estudios infrarrojo in-situ solo incluyen los resultados de este catalizador. En varios estudios se ha demostrado que en catalizadores sintetizados por el método de impregnación se logran obtener pequeñas partículas de metal altamente dispersas, esta podría ser la causa de la diferencia en la actividad catalítica; sin embargo, aún faltan pruebas experimentales para confirmar esto.

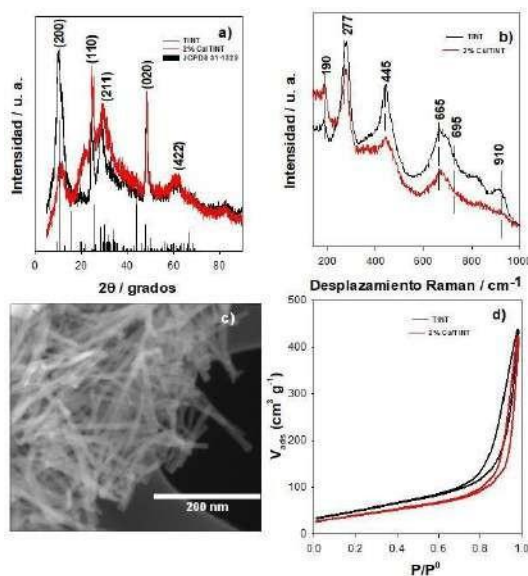


Figura 1. Resultados de caracterización para los TiNT y Cu/TiNT-I a) Patrón de difracción de rayos-X, b) Espectros Raman, c) Micrografía de SEM de TiNT y d) Isothermas de adsorción de N_2 a 77 K.

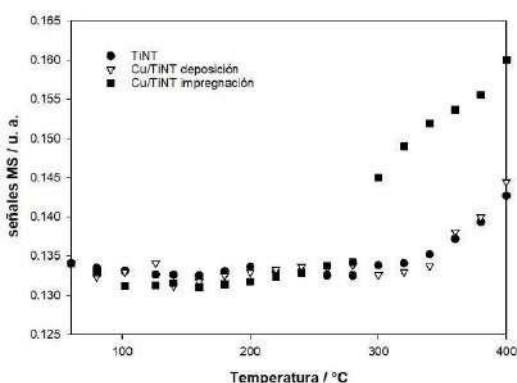


Figura 2a. Intensidad de las señales $m/e = 28$ de los gases de salida de la celda en función de la temperatura.

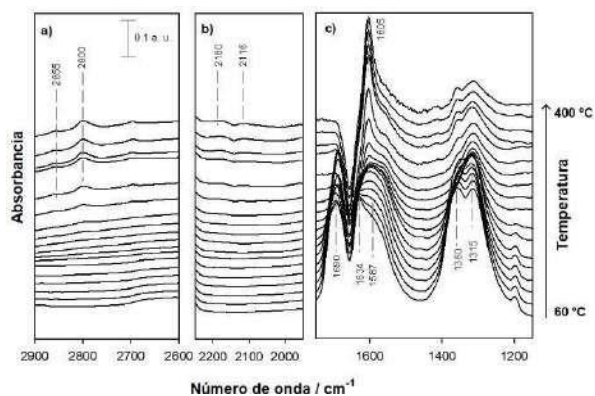


Figura 2b. Evolución de los espectros IR de la muestra Cu/TiNT-I durante la hidrogenación de CO_2 , de 60 a 400 °C.

En la Figura 2b, se muestran los espectros IR para el catalizador Cu/TiNT-I durante la reacción RWGS realizada a presión atmosférica y desde 60 a 400°C. En el espectro inicial (60°C) se observan bandas a 1315, 1360, 1587 y 1690 cm^{-1} . Las bandas a 1315 y 1587 cm^{-1} se han asignado al ν_{SCO} y ν_{asCO} de carbonatos bidentados [6,11], la banda a 1360 cm^{-1} se corresponde al ν_{CO} de carbonatos monodentados [12], mientras que la banda a 1690 cm^{-1} se asigna a especies carboxilato [12]. La aparición de estas bandas demuestra la formación de diferentes tipos de carbonatos en la superficie. La banda a 1634 cm^{-1} se ha asignado al δ_{OH} de agua fisosorbida [12]. Con el aumento de la temperatura, la intensidad de las bandas asignadas a carbonatos y carboxilatos disminuye, esto podría deberse a la desorción de estas especies o a su transformación en otras especies superficiales. Se puede observar que a 300 °C aparecen dos bandas a 1605 cm^{-1} y 2855 cm^{-1} , las cuales se han atribuido a especies de formiato adsorbidas [13]. La aparición de estas bandas sucede al de forma casi simultánea con la aparición de las bandas a 2180 y 2116 cm^{-1} asignadas al modo ν_{CO} del CO en fase gaseosa, lo que demuestra la formación del producto de reacción (lo que complementa los resultados de MS). Para la reacción RWGS se han reportado de manera general dos tipos de mecanismos: un mecanismo tipo redox y otro asociativo [3]. En el mecanismo tipo redox, el CO_2 se reduce por la acción de un donador de electrones (átomos de metal o vacancias de oxígeno de un soporte reducible), el cual se oxida para formar el CO. La función del hidrógeno es volver a reducir las especies oxidadas para completar el ciclo. En el caso del mecanismo asociativo, se propone que el CO_2 forma especies adsorbidas en la superficie del catalizador (e.g., carbonatos, bicarbonatos, carboxilatos) y éstas reaccionan con hidrógeno para generar formiatos, los cuales se proponen como intermediarios de reacción en la formación de CO. Rutas similares se han propuesto para otras reacciones de hidrogenación de CO_2 [6]. Nuestros resultados sugieren que, con el catalizador que contiene Cu y las condiciones de reacción utilizadas la ruta preferencial para la formación de CO es el mecanismo asociativo.

CONCLUSIONES

Los catalizadores TiNT, Cu/TNT-D y Cu/TNT-I resultaron activos en la reacción RWGS a presión atmosférica produciendo CO y H_2O como únicos productos en un intervalo de temperatura de 300 a 400 °C. El catalizador Cu/TNT-I resultó el más activo. Los resultados de caracterización revelaron la formación de nanotubos multicapa orientados de forma aleatoria, la formación de una sola fase de trititanatos de sodio ($\text{Na}_2\text{Ti}_3\text{O}_7$) cuya estructura cristalina se mantiene aún con la incorporación de nanopartículas de Cu. La evidencia de DRIFTS para Cu/TNT-I reveló la formación de diferentes especies de carbonatos superficiales sobre los TiNT durante la reacción, los cuales en presencia de hidrógeno se transforman en especies formiato. Estas especies formiato se proponen como intermediarias para la formación de CO, sugiriendo un mecanismo de reacción asociativo.

REFERENCIAS

- [1] Álvarez A, Bansode A, Urakawa A, Bavykina AV, Wezendonk TA, Makkee M, Gascon J, Kapteijn F. Challenges in greener production of formates/formic acid, methanol, and DME by heterogeneously catalyzed CO_2 hydrogenation processes. *Chem. Rev.* 2017; 117:9804-9838.
- [2] Wang W, Wang S, Ma X, Gong J. Recent advances in catalytic hydrogenation of carbon dioxide. *Chem. Soc. Rev.* 2011; 40:3703-3727.
- [3] González-Castaño M, Dorneanu B, Arellano-García H. The reverse water gas shift reaction: a process systems engineering perspective. *React. Chem. Eng.* 2021; 6:954-976.

- [4] Westermann A, Azambre B, Bacariza MC, Graca I, Ribeiro MF, Lopes JM, Henriques C. Insight into CO₂ methanation mechanism over NiUSY zeolites: An operando IR study Appl. Catal. B 2015; 174:120-125.
- [5] Yu K, Yu W, Kuo M, Liou Y, Chien S. Pt/titania-nanotube: A potential catalyst for CO₂ adsorption and hydrogenation. Appl. Catal. B 2008; 84:112-118.
- [6] Ruiz-García JR, Fierro-González JC, Handy BE, Hinojosa-Reyes L, De Haro DA, Lucio-Ortiz JC, Valle-Cervantes S, Flores-Escamilla GA. An In Situ Infrared Study of CO₂ Hydrogenation to Formic Acid by Using Rhodium Supported on Titanate Nanotubes as Catalysts. ChemistrySelect 2019; 4:4206-4216.
- [7] Bavykin DV, Walsh FC. Elongated Titanate Nanostructures and Their Applications. Eur. J. Inorg. Chem. 2009; 977-997.
- [8] Delannoy L, Thrimurthulu G, Reddy PS, Methivier C, Nelayah J, Reddy BM, Ricolleaud C, Louis C. Selective hydrogenation of butadiene over TiO₂ supported copper, gold and gold-copper catalysts prepared by deposition-precipitation. Phys. Chem. Chem. Phys 2014; 16:26514-26527.
- [9] Viana BC, Ferreira OP, Souza-Filho AG, Hidalgo AA, Mendes-Filho J, Alves OL. Alkali metal intercalated titanate nanotubes: A vibrational spectroscopy study. Vib. Spectrosc 2011; 55:183-187.
- [10] Gajovic A, Friscic I, Plodinec M, Ivekovic D. High temperature Raman spectroscopy of titanate nanotubes. J. Mol. Struct. 2009; 924-926, 183-191.
- [11] Bhattacharyya K, Danon A, Vijayan BK, Gray KA, Stair PC, Weitz E. Role of the Surface Lewis Acid and Base Sites in the Adsorption of CO₂ on Titania Nanotubes and Platinized Titania Nanotubes: An in Situ FT-IR Study. J. Phys. Chem. 2013; 117:12661-12678.
- [12] Chavez-Mulsa A, Fierro-González JC, Handy BE, Santos-López IA, Jiménez-Lam SA, De Haro del Río DA, Rivera de la Rosa J, Flores-Escamilla GA. Ethylene Hydroformylation with Carbon Dioxide Catalyzed by Ruthenium Supported on Titanate Nanotubes: Infrared Spectroscopic Evidence of Surface Species. ChemistrySelect 2021; 6:10758-10766.
- [13] Fujita SI, Usui M, Takezawa N. Mechanism of the Reverse Water Gas Shift Reaction over Cu/ZnO Catalyst. J. Catal. 1992; 134:220-225.

ESTUDIO DE PROPIEDADES FISICOQUÍMICAS Y ANTIOXIDANTES DE NANOPARTÍCULAS DE SiO_2 COMO ACARREADORES DE FLAVONOIDES DE *CITRUS SINENSIS*.

STUDY OF THE PHYSICOCHEMICAL AND ANTIOXIDANT PROPERTIES OF SiO_2 NANOPARTICLES AS CARRIERS OF *CITRUS SINENSIS* FLAVONOIDS

Hernández López Mario Alberto¹, Sánchez Calixto Dulce Guadalupe¹, García Fajardo Jorge Alberto², Ponce Hernández Juana Suhey^{2*}

¹Instituto Tecnológico Superior de Poza Rica, Luis Donaldo Colosio s/n, Ejido Arroyo del Maíz, 93230 Poza Rica de Hidalgo, Veracruz, México.

²Subsede Noreste. Centro de Investigación y Asistencia en Tecnología y Diseño del Estado de Jalisco A. C. Vía de la Innovación 404. Autopista Mty-Aeropuerto Km 10, Parque PIIT. C.P. 66629. Apodaca, Nuevo León, México.

*sponce@ciatej.mx

Resumen. Los flavonoides son compuestos bioactivos abundantes en frutas y vegetales con propiedades interesantes para el tratamiento de enfermedades y cuidado de la piel. En los cítricos abundan este tipo de metabolitos y son de fácil disponibilidad en el estado de Nuevo Leon, por lo cual el objetivo este trabajo fue caracterizar las propiedades fisicoquímicas y antioxidantes de un sistema nanoparticulado base silicio y flavonoides de Naranja (*Citrus Sinensis*). Se obtuvieron bioactivos de cáscara de naranja (EN) por maceración con etanol al 80% los cuales fueron concentrados por evaporación. El extracto presento 5.4866 +/-0.1323 mgEAG/ml (miligramos equivalentes a ácido gálico por mililitro) de fenoles totales y 0.640 +/-0.00055 mgEQ/ml (miligramos equivalentes de Quercetina por mililitros) de flavonoides de acuerdo con Folin Ciocalteu y la metodología de Changet al., respectivamente. La mayor capacidad antioxidante (AOX) por ABTS la presentó el EN a 100 $\mu\text{g}/\text{mL}$ con un 77 % de inhibición (267.62 μMET (micromolar equivalentes a Trolox(ET))). Por otra parte, se sintetizaron np's de SiO_2 mediante sol-gel, utilizando Tetraetilortosilicato como precursor, y posterior funcionalización con 3-Aminopropyl triethoxysilano (APTES), y conjugación con 0.125, 0.25, 0.50, 0.75 $\mu\text{L}/\text{ml}$ de EN. El sistema SiO_2 -APTES/EN mostró por FTIR banda en 1180 nm de enlaces Si-C y 1640 nm puede asignarse a grupos C=O y C=C de posibles flavonoides. Por medio de DRX se determinó la estructura amorfa del sistema dado $2\theta \sim 10^\circ$ correspondiente al SiO_2 y $2\theta \sim 5^\circ$ a EN. En cuanto AOX de los sistemas SiO_2 -APTES conjugados con diferentes cantidades de EN fue más alta que el extracto crudo, evidenciado la potencialización de esta actividad en forma nanométrica, por lo que podrían incluirse en formulaciones para cuidar la piel.

Palabras clave: Nanopartículas, SiO_2 , Flavonoides, Antioxidante, Cuidado de la piel.

Abstract. Flavonoids are abundant bioactive compounds in fruits and vegetables with interesting properties for the treatment of diseases and skin care. In citrus fruits, this type of metabolites abound and they are easily available in the state of Nuevo Leon, for which the objective of this work was to characterize the physicochemical and antioxidant properties of a nanoparticle system based on silicon and Orange flavonoids (*Citrus Sinensis*). Orange peel (EN) bioactives were obtained by maceration with 80% ethanol, which were concentrated by evaporation. The extract presented 5.4866 +/-0.1323 mgEAG/ml (equivalent milligrams of gallic acid per milliliter) of total phenols and 0.640 +/-0.00055 mgEQ/ml (equivalent milligrams of Quercetin per milliliter) of flavonoids according to Folin Ciocalteu and the methodology from Chang et al., respectively. The

highest antioxidant capacity (AOX) by ABTS was presented by EN at 100 µg/mL with 77% inhibition (267.62 µMET (micromolar equivalents to Trolox(ET))). On the other hand, SiO₂ np's were synthesized by sol-gel, using Tetraethylorthosilicate as precursor, and subsequent functionalization with 3-Aminopropyl triethoxysilane (APTES), and conjugation with 0.125, 0.25, 0.50, 0.75 µL/ml of EN. The SiO₂-APTES/EN system showed by FTIR a band at 1180 nm of Si-C bonds and 1640 nm can be assigned to C=O and C=C groups of possible flavonoids. By means of XRD the amorphous structure of the given system was determined $2\theta \sim 10^\circ$ corresponding to SiO₂ and $2\theta \sim 5^\circ$ to EN. The AOX of the SIO₂-APTES systems conjugated with different amounts of EN was higher than the crude extract, evidencing the potentiation of this activity in nanometric form, so they could be included in formulations to care for the skin.

Keywords: *Nanoparticles, SiO₂, Flavonoids, Antioxidant, Skin care.*

INTRODUCCIÓN.

Los flavonoides (FL) son metabolitos abundantes en frutas y vegetales y se usan como alternativa para tratamiento de enfermedades por actividades antioxidantes, anticancerígenas, etc. La mayoría de FL se administran vía oral, pero se pueden aplicar vía tópica por las propiedades ya mencionadas y acción antiinflamatoria y de protección solar. En los cítricos abundan FL como la quercetina, hesperidina y rutina que poseen actividades benéficas para formulaciones para el cuidado de la piel [1]. Los cítricos son de gran importancia a nivel nacional, Nuevo León ocuparía 4to lugar en producción de toronja y naranja por lo que la disponibilidad de materia prima para extracción de flavonoides de fuente cítrica podría dar mayor valor a esa agroindustria en el estado. Por otra parte, las nanopartículas(np's) de silicio (Si) son prometedoras como sistemas acarreadores capaces de preservar la sustancia transportadora, tener acción de liberación controlada y aportar beneficios a la piel como disminución de flacidez. Algunas de sus características como biocompatibilidad, baja toxicidad, estabilidad y superficie funcionalizable [2] les permite conjugarse con compuestos fenólicos presentes en cítricos como la naranja. Existen estudios en los cuales se han conjugado sistemas de np's con extractos naturales con el fin de utilizarlas como vehículos y transporte de diversos compuestos bioactivos, la importancia de estas conjugaciones radica en los beneficios que conforman al sistema nanométrico en conjunto, como es la preservación de los extractos cargados, extendiéndoles el tiempo de vida en comparación a la que tienen los extractos sin tratamiento [3]. Al conjugar compuestos fenólicos y/o antioxidantes como los flavonoides en sistemas de np's mesoporosas de Si, se busca protección frente a la descomposición provocada por altas temperaturas y la liberación controlada en un lapso para favorecer la biodisponibilidad de los activos donde se apliquen. Por lo anterior, en el presente trabajo se estudió un sistema nanoparticulado conjugado con Flavonoides de naranja para contribuir en la valoración de desechos cítricos y encaminar las investigaciones hacia aplicaciones cosméticas.

METODOLOGÍA.

Extracción y caracterización de compuestos bioactivos de cáscara de naranja: Las cáscaras se recolectaron de un mercado local de la Ciudad de Apocada, Nuevo León, se lavaron y cortaron en trozos, para su posterior secado a 55°C en horno San-Son modelo EN-PPP-003 y obtención de una harina en licuadora Heavy Duty Blender marca Waring modelo CB15 y posterior caracterización bromatológica. Mediante maceración se obtuvo un extracto de la harina cítrica en et, el cual se concentró en rotavapor Buchi, Modelo R215. Posteriormente se determinó el contenido de fenoles totales por el método de Folin Ciocalteu propuesto por Singleton y Rossi (1965), en donde se utilizó una curva de calibración de ácido gálico obtenida en espectrofotómetro marca Thermo Scientific modelo Genesys 10S UV-VIS a 765 nm. Para analizar el contenido de

flavonoides empleó la metodología de (Chang et al., 2002) elaborando una curva de calibración con quercetina en espectrofotómetro mencionado a 415 nm. La capacidad antioxidante del extracto se obtuvo por el método ABTS (Re et al., 1999), con trolox como estándar a 734 nm.

Síntesis de nanopartículas SiO₂-APTES/EN: Para la síntesis por Sol-Gel de np's de SiO₂ se utilizó como precursor TEOS (Tetra-Ethyl-Ortho-Silicate) en etanol y adición de hidróxido de amonio y agua, para posterior secado a 100°C. Se realizó la funcionalización de las np's de SiO₂ con APTES(3-Aminopropil) Trietoxisilano disuelto en agua desionizada por 1 h. Después se separan las partículas en centrifuga Thermo Fisher modelo Megafuge 16R y se lavaron por triplicado para secar nuevamente. Una vez secas las np's de SiO₂, se pulverizaron en un mortero de ágata y almacenaron. La conjugación de las np's de SiO₂-APTES con EN fue agregando 0.125, 0.25, 0.50, 0.75 mL con agitación por 24 h a 40°C, posteriormente se centrifugaron y lavaron tres veces y por último se liofilizaron utilizando el equipo marca Labconco modelo FreeZone 4.5 y se molieron y almacenaron en frascos herméticos.

Propiedades Físicoquímicas y Antioxidantes: Con espectrofotómetro FTIR Thermo Fisher Nicolet modelo IS10, software OMNIC 9 y accesorio ATR se analizó de manera cualitativa el EN, SiO₂, SiO₂-APTES y los sistemas SiO₂-APTES/EN con una resolución de 2 cm⁻¹ en el medio infrarrojo (4000 a 600 cm⁻¹). Para conocer la estructura de las nanopartículas se utilizó un difractor de rayos X Bruker D2 donde se obtuvieron patrones de difracción en intervalo 2θ de 5° a 90° por un tiempo de 5 s utilizando radiación Kα de Cu.

RESULTADOS Y DISCUSION.

El rendimiento de producción de harina de naranja fue del 12 %, con valores bromatológicos (Tabla I) interesantes para futuras investigaciones. Por otra parte, el extracto de naranja tuvo el 5% de rendimiento, con 5.4866±0.1323 mgEAG/ml de compuestos fenólicos determinado por $y = 8.995x + 0.0431$ R=0.9989. En cuanto al contenido de flavonoides fue de 0.0640±0.00055 mgEQ/ml empleado la ecuación $y = 63.185x - 0.1842$ R= 0.9932. Eso valores están de acuerdo con lo reportado en [2] para el caso de fenoles y para flavonoides [se asemejan a los resultados mostrados en [4]. En la figura 1 se ven resultados de capacidad antioxidante del extracto a diferentes concentraciones con % de inhibición del 56 al 77% correspondiente a 135.56 y 267.62 μM ET respectivamente determinados por $y = 138865x + 137.47$ y R= 0.9998 y concuerdan con lo que se discute en [5].

Tabla I. Composición de la harina y extracto de cáscara de naranja

Harina de Naranja	
Componente	Valor (g)
Humedad	9,07
Cenizas	3,96
Grasas (extracto etéreo)	0,95
Proteínas (N x 6,25)	5,19
Fibra cruda	15,13
Carbohidratos totales	80,83
Fibra dietética total	79,95
Fibra dietética soluble	48,79
Fibra dietética insoluble	31,16
Extracto de Naranja	
Fenoles	5.4866±0.1323 mgEAG/ml
Flavonoides	0.0640±0.00055 mgEQ/ml

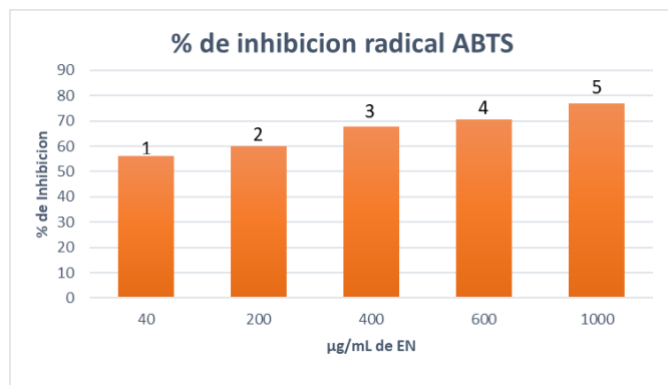


Figura 1. Valores de inhibición de radical ABTS del EN a diferentes concentraciones y sus equivalentes Trolox (μM) : 1)135.56, 2)159.27,3)208.41, 4)227.53, 5)267.62.

El tamaño, la forma y la regularidad de las nanopartículas sintetizadas por el método sol-gel obtenidas fueron <100 nm. Por otro lado, para conocer la pureza y las interacciones químicas de la síntesis de las nanopartículas, la funcionalización y conjugación se realizaron análisis mediante espectroscopia FTIR (Figura 2). Para el caso del extracto de Naranja se observó una banda intensa en la región de los 3300 nm asociado a grupos OH, se presentaron pequeñas bandas a 2900 y 1400 cm que están relacionadas a vibraciones C-H de cadenas alifáticas presentes en materiales lignocelulósicos, además se presentaron vibraciones 1036 nm que corresponde a C-OH y C-OR y la señal ancha de 1640 nm puede asignarse a grupos C=O y C=C y en conjunto pueden asociarse a flavonoides. El espectro infrarrojo de las np's de SiO₂ se identificaron bandas de la siguiente manera 812 nm flexiones de vibración del enlace Si-O, a los 972 nm flexión (Si-O-H... H₂O), la banda más pronunciada estuvo a los 1076 nm que corresponde a la vibración asimétrica estrecha Si-O-Si. Para el caso de la funcionalización de la np's SiO₂ con APTES se aprecia a un desplazamiento y ensanchamiento hacia los 1180 nm representativo de Si-C que confirma la presencia de APTES en SiO₂. Los Sistemas np's SiO₂-APTES/EN a diferentes concentraciones mostraron ensanchamiento en 3300 nm y crecimiento de pico 1640 nm proporcional a la cantidad de extracto conjugado, por lo que las nanopartículas mostraron selectividad a compuestos con OH y C=O y C=C posiblemente flavonoides.

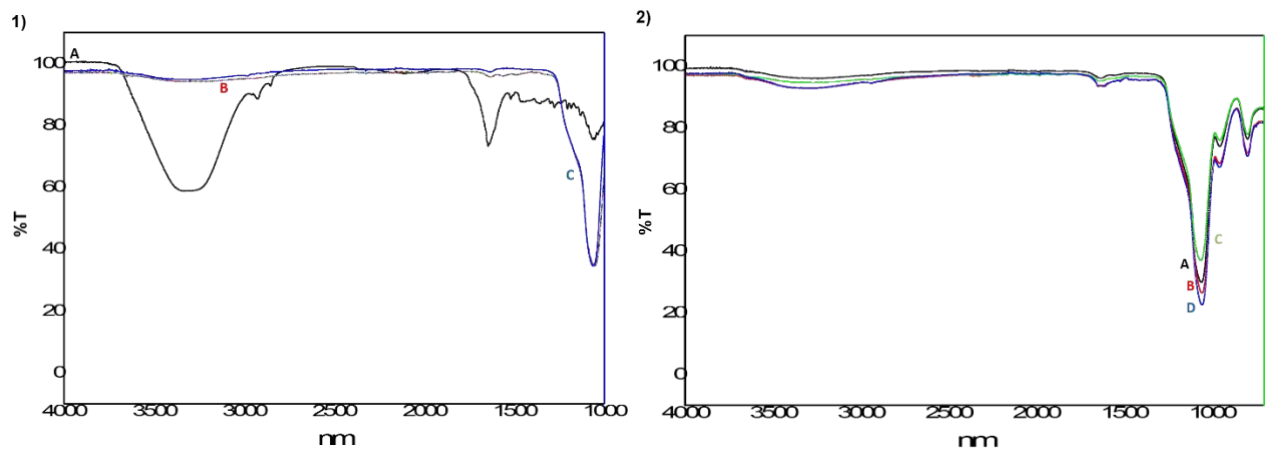


Figura 2. 1) Espectros FTIR del extracto de naranja [color negro(A)], np's SiO₂ [color negro(B)], np's SiO₂-APTES [Color azul(C)]. 2) Espectros FTIR de np's SiO₂-APTES conjugados con diferentes cantidades de EN: (negro) 0.125 mL, (rojo) 0.25 mL, (verde) 0.50

En relación con la estructura de las np's SiO₂ determinada por DRX, muestra una ancha reflexión en $2\theta \sim 25^\circ$ lo cual permite confirmar que se trata de un material amorfo. El patrón de difracción no se ve afectado en el caso de SiO₂-APTES como aprecia en la Figura 3A, lo que sugiere que la naturaleza amorfa de los np's permanecieron incluso después de funcionalizar con APTES. En los difractogramas (figura 3B) de los sistemas SiO₂-APTES conjugados a diferentes concentraciones de extracto de naranja no presentaron alteraciones morfológicas en la estructura ($2\theta \sim 25^\circ$), solo se observa que se intensifica la señal $2\theta \sim 10^\circ$ como respuesta de los rayos X a componentes diferentes en la estructura principal (SiO₂) en este caso EN. De la capacidad antioxidante de los sistemas SiO₂-APTES conjugados con EN los valores de inhibición del radical ABTS estuvieron del 88 al 95%

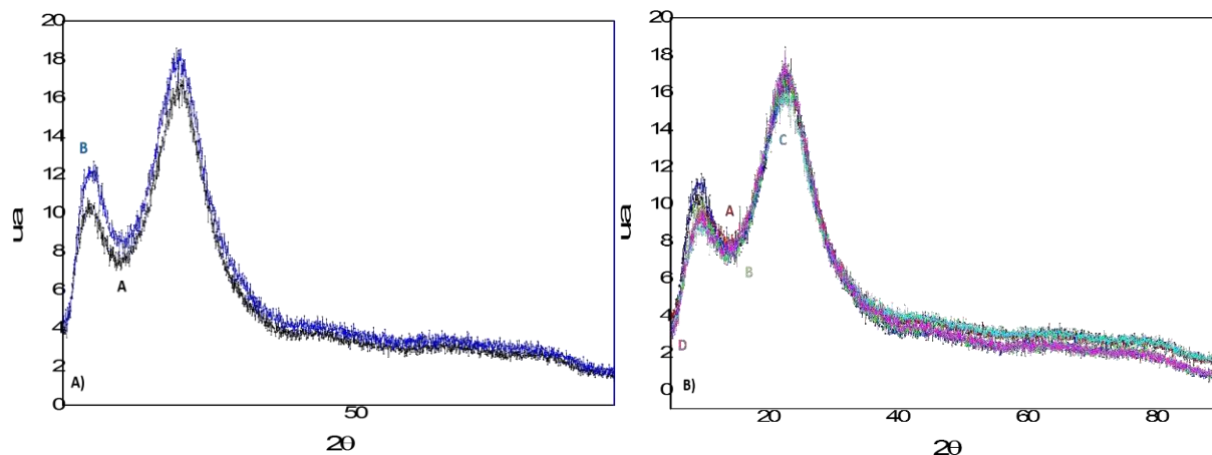


Figura 3. A) Difractograma np's SiO₂ (negro) y SiO₂-APTES (azul). **B)** Sistemas SiO₂-APTES con 0.125 (rojo), 0.25 (azul), 0.50 (celeste) y 0.75 (lila)mL de EN.

Conclusiones

Del residuo de naranja fue posible obtener compuestos fenólicos de alto valor, los cuales se conjugaron con np's SiO₂-APTES sin aportar modificación estructural(amorfa)al contrario de los cambios mostrados en los espectros infrarrojos donde se evidenciaron interacciones propias de flavonoides, lo que pudo originar el aumento de la capacidad antioxidante de los sistemas nanoparticulados SiO₂-APTES/EN en comparación a los valores obtenidos con el extracto de naranja crudo y las nanopartículas sin tratamiento. Con las aportaciones de este trabajo se evidencia la valorización de agro-residuos cítricos y encaminara la investigación para aplicaciones en alimentos y cosméticos.

REFERENCIAS.

- [1] Mejía-Giraldo JC, Atehortúa L, Puertas-Mejía MA. Foto-protección: mecanismos bioquímicos, punto de partida hacia mejores filtros solares. *Dermatología CMQ* 2014;12(4):272-281
- [2] Rincon AM, Vasquez A, Padilla M. Composición química y compuestos bioactivos de las harinas de cascara de naranja (*Citrus Sinensis*), mandarina (*Citrus Reticulata*) y toronja (*Citrus Paradisi*) cultivadas en Venezuela. *ALAN* [online]. 2005, vol.55, n.3, pp.305-310.
- [3] Llinàs MC, Sánchez-García* D. Nanopartículas de sílice: preparación y aplicaciones en biomedicina. *Afinidad LXXI*, Enero - Marzo 2014, 565.
- [4] Ramirez-Delgadillo CJ. Evaluación de la extracción de flavonoides a partir de la cáscara de naranja. Fundación Universidad De América Facultad De Ingenierías Programa De Ingeniería Química, tesis de ingeniería, 2020.
- [5] Ordoñez-Gómez ES, Reátegui-Díaz, Villanueva-Tiburcio JE. Polifenoles totales y capacidad antioxidante en cáscara y hojas de doce cítricos. *Scientia Agropecuaria* vol.9 no.1. ene./mar. 2018.
- [6] P. Saravanan1 · D. Duraibabu2 · K. Jayamoorthy1 · S. Suresh3 · S. Ananda Kumar2. Twin Applications of Tetra-Functional Epoxy Monomers for Anticorrosion and Antifouling Studies. 2016.
- [7] Quesada-González, Omaidá; Torres-García, E.; Alfonso-Martínez, F. E. Estudio de la degradación térmica del residuo de la naranja, revista Cubana de Química, vol. XXIII, núm. 1, 2011, pp. 25-33.



VII CONGRESO INTERNACIONAL DE
QUÍMICA E INGENIERÍA VERDE

EJE TEMÁTICO 6

PROCESOS SUSTENTABLES Y QUÍMICA VERDE



ESTUDIO PARAMÉTRICO DE UN NOVEDOSO SISTEMA AVANZADO DE ABSORCIÓN EMPLEANDO FUENTES DE ENERGÍAS ALTERNATIVAS

PARAMETRIC STUDY OF A NEW ADVANCED ABSORPTION SYSTEM USING ALTERNATIVE ENERGY SOURCES

J. A. Hernández Magallanes^{1*}, R. Gómez Zamora¹, S. Kozhiparambil Chandran¹, S. Lugo Loredó¹

¹Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Av. Universidad s/n, Cd. Universitaria, San Nicolás de los Garza, N. L., México, C.P. 66455.

*e-mail del autor de correspondencia/ e-mail correspondence autor:

javier.hernandezmq@uanl.edu.mx

RESUMEN. En la presente investigación se llevó a cabo un estudio paramétrico de un sistema de cogeneración que emplea bombas de calor (AHPTP). Este sistema tiene la capacidad de generar simultáneamente energía eléctrica y calor revalorizado. La simulación del sistema propuesto se realizó utilizando el programa computacional EES, con H₂O-LiBr como fluido de trabajo. Se analizaron diversas condiciones de operación para determinar los mejores coeficientes de desempeño global. Al operar el AHPTP a temperaturas de condensación y evaporación de 30 y 70°C, respectivamente, sus límites de operación se ven influenciados por el valor de la ganancia bruta de temperatura (GTL por sus siglas en inglés), con un máximo de 45 y un mínimo de 5. En estas condiciones, se alcanzó una eficiencia exergética máxima de 0.86 (relación de presiones (RP) de 1.1, relación de flujos másicos (RM) de 20, temperatura fuente (TGH) de 120°C, y GTL de 44). Es importante destacar que el sistema mostró una mayor producción de energía en forma de calor que de electricidad, siendo la primera responsable del 48% de la energía total suministrada, mientras que la segunda contribuyó únicamente con el 3%. El AHPTP es capaz de producir hasta 10 MW en su punto máximo de producción eléctrica, lo que permite evitar la emisión de cerca de 39 kton de CO₂ si se utilizara una fuente de calor alternativa.

Palabras clave: Exergía, cogeneración, energías renovables, emisiones antropogénicas, bomba de calor.

ABSTRACT. In the present investigation, a parametric study of a cogeneration system that uses heat pumps (AHPTP) was carried out. This system can generate electricity and revalue heat simultaneously. The proposed method was simulated using the EES computer program, with H₂O-LiBr as the working fluid. Various operating conditions were analyzed to determine the best overall performance coefficients. When operating the AHPTP at condensing and evaporating temperatures of 30 and 70°C, respectively, its operating limits are influenced by the gross temperature lift (GTL) value, with a maximum of 45 and a minimum of 5. Under these conditions, a maximum exergetic efficiency of 0.86 was reached (pressure ratio (RP) of 1.1, mass flow ratio (RM) of 20, source temperature (TGH) of 120°C, and GTL of 44). It is essential to highlight that the system showed a more excellent energy production in heat than electricity, the former being responsible for 48% of the total energy supplied. In comparison, the latter contributed only 3%. The AHPTP could produce up to 10 MW at its maximum electrical production point, which makes it possible to avoid the emission of about 39 kton of CO₂ if an alternative heat source were used.

Keywords: Exergy, cogeneration, renewable energies, anthropogenic emissions, heat pump.

INTRODUCCIÓN

En las últimas décadas, ha aumentado significativamente la emisión antropogénica de CO₂, principal gas responsable del efecto invernadero, generando cambios climáticos y problemas ambientales [1]. Esto ha llevado a una mayor atención hacia las tecnologías de generación de energía eléctrica renovable, como la eólica, solar e hidroeléctrica. Sin embargo, sigue habiendo

una brecha significativa en la producción de energía eléctrica según el tipo de tecnología, con un 78% proveniente de combustibles fósiles [2]. Ante esta situación, el uso de energías renovables y el aprovechamiento del calor residual de plantas industriales, como la siderúrgica o la cementera, se han vuelto relevantes para reducir las emisiones de CO₂ y promover procesos sustentables. Los sistemas de cogeneración y poligeneración son alternativas atractivas, capaces de producir múltiples servicios simultáneamente a partir de una sola fuente energética [3]. Estos sistemas mejoran la eficiencia global en comparación con sistemas que operan de forma independiente. Por ejemplo, L. Gao et al. [4] desarrollaron un sistema de poligeneración que utiliza gas de síntesis a partir del carbón y aire para obtener metanol y electricidad, logrando importantes mejoras de eficiencia. Asimismo, M. Haghani-Manesh et al. [5] propusieron un sistema que recupera energía térmica de residuos de escorias siderúrgicas y biogás para producir electricidad, refrigeración y agua caliente, logrando una producción eléctrica de 700 kW, capacidad de enfriamiento de 40 toneladas y agua caliente a un flujo de 29.4 t/h. Otros sistemas, como el desarrollado por Xin T. y sus colaboradores [6] utilizando el ciclo Allam con carbón, han mostrado reducciones significativas en el consumo energético para la captura de CO₂ y aumentos en la generación de electricidad. En la revisión bibliográfica, se destaca que los sistemas térmicos de cogeneración presentan amplias oportunidades de estudio para el aprovechamiento de energías alternativas y la optimización de procesos existentes. En este estudio, se realiza un análisis paramétrico de un sistema térmico de cogeneración (AHPTP) con el objetivo de investigar las tendencias de tres variables clave del proceso: la ganancia bruta de temperatura (GTL), la relación de presiones (RP) y la relación de flujos másicos (RM) del sistema. El AHPTP es capaz de producir simultáneamente energía eléctrica y calor revalorizado, lo que es relevante para mejorar las eficiencias de los procesos térmicos, aunado a la reducción de emisiones de CO₂ al ambiente [8].

METODOLOGÍA

El sistema AHPTP se presenta en la **Figura 1**, y consta de 4 niveles de temperatura y 3 de presión. El proceso comienza en el generador de alta presión (GH), donde se suministra energía térmica para la desorción del refrigerante (corriente 17 que ingresa a la turbina). En esta etapa, el AHPTP genera energía eléctrica a través del vapor sobrecalentado que entra a alta temperatura y presión. La turbina se conecta al punto de menor presión del sistema, aprovechando el máximo gradiente de expansión para generar trabajo mecánico. El condensador transfiere calor del refrigerante al entorno, siendo el punto de menor temperatura del proceso. Aquí también ingresa la corriente 7, proveniente del generador de baja presión, mientras que la corriente 8 se dirige al evaporador mediante una bomba. El refrigerante saliente entra al absorbedor, donde se combinan las soluciones de trabajo 16 y 4, provenientes de los generadores de alta y baja presión, respectivamente. En esta etapa ocurre el fenómeno de absorción, generando calor revalorizado, que es energía útil para un proceso secundario. Para mejorar la eficiencia del sistema, se implementan equipos de intercambio de calor entre el absorbedor y ambos generadores (SHE), lo que permite precalentar las corrientes y aumentar la eficiencia global. Al desarrollar la simulación y resolución matemática del sistema, se consideraron las siguientes condiciones: a) se desprecian las caídas de presión en tuberías y componentes, b) el sistema opera en estado estacionario y equilibrio termodinámico, c) el agua se encuentra en condiciones de saturación en la salida del evaporador y condensador, d) no hay intercambio de calor con el entorno, y e) las eficiencias isentrópicas de las bombas, la turbina y los economizadores son 0.80, 0.85 y 0.70, respectivamente. En la **Tabla 1** se muestran los parámetros principales de estudio del AHPTP. Las ecuaciones de los balances de materia y energía, así como de las cargas térmicas y eléctricas fueron reportadas por Hernández-Magallanes [7]. Para la estimación de emisiones de dióxido de carbono evitadas, se utilizó la metodología de cálculo presentada por la Comisión Reguladora de Energía [8].

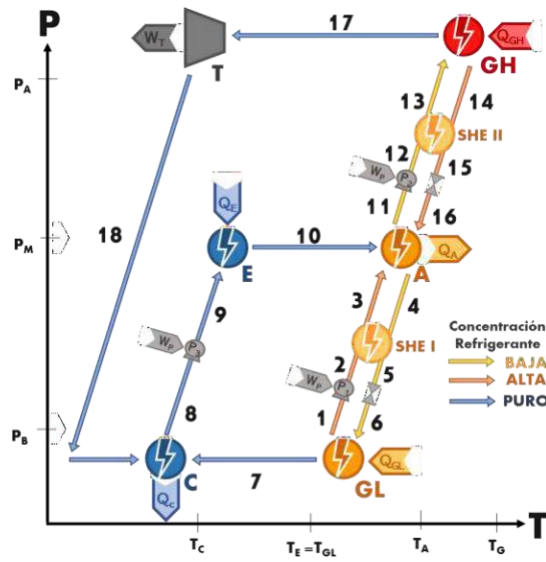


Figura 1. Diagrama termodinámico del sistema AHPTP para la producción simultánea de energía eléctrica y calor revalorizado [7].

Tabla 1. Parámetros de estudio.

Parámetro	Ecuación
Relación de presiones	$RP = \frac{P_H}{P_M}$ EEE. 11
Relación de flujos másicos	$RM = \frac{m_{GH}}{m_{GL}}$ EEE. 22
Gross Temperature Lift	$GTL = T_A - T_E$ EEE. 33
Eficiencia exergetica	$\eta_{ex} = \frac{W_{net} + Q_A \left(1 - \frac{T_0}{T_A}\right)}{\sum_i Q_i \left(1 - \frac{T_0}{T_i}\right)}$ EEE. 44
Gradientes de concentración	$\delta x_1 = x_4 - x_1$ EEE. 55
	$\delta x_2 = x_{11} - x_{14}$ EEE. 66

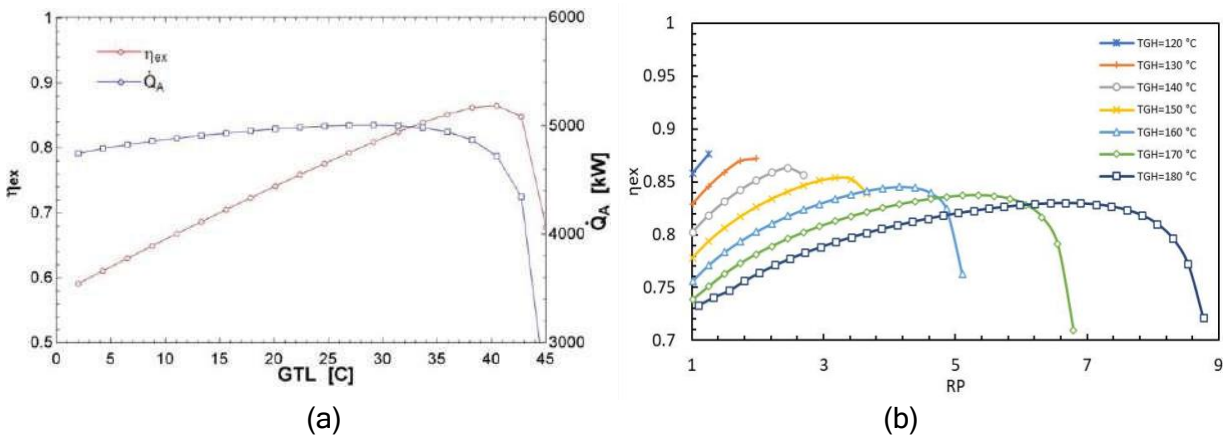
RESULTADOS Y DISCUSIÓN

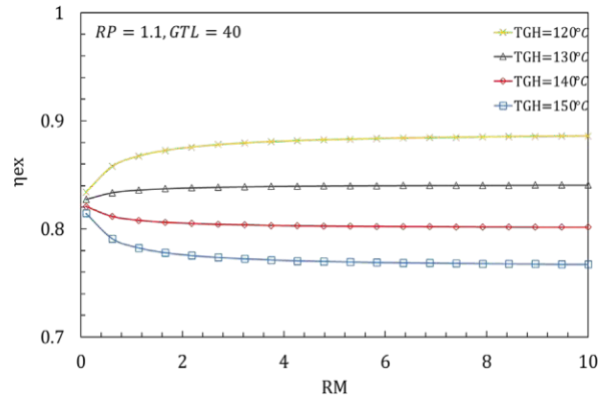
Para llevar a cabo la simulación termodinámica del sistema AHPTP se realizó una validación con las condiciones de operación reportadas en la bibliografía [7], la cual se muestra en la **Tabla 2**. Con las condiciones establecidas en la **Tabla 2**, el AHPTP genera una producción de trabajo neto y calor revalorizado de 265 y 4,762 kW, respectivamente, alcanzando una eficiencia exergetica de 0.86. Con estas condiciones de operación se podrían evitar 982 ton de CO₂ eq/año si se operara con una fuente de calor renovable.

Tabla 2. Resultados de la simulación termodinámica. (Caso: RP=1.1, RM=1, T_{GH}=120°C, GTL=40).

Corriente	T (°C)	P (kPa)	X	h (kJ/kg)	m (kg/s)
1	70	4.246	0.583	167.4	19.92
2	70	31.18	0.583	167.4	19.92
3	104.2	31.18	0.583	236.3	19.92
4	110	31.18	0.556	248.1	20.92
5	82	31.18	0.556	182.6	20.92
6	82	4.246	0.556	182.6	20.92
7	70	4.246	0	2631	1
8	30	4.246	0	125.7	2
9	30	31.18	0	125.7	2
10	70	31.18	0	2626	2
11	110	31.18	0.556	241.7	17.87
12	110	34.29	0.556	241.7	17.87
13	116.3	34.29	0.556	255.2	17.87
14	120	34.29	0.589	270	16.87
15	113	34.29	0.589	255.7	16.87
16	117.4	31.18	0.589	255.7	16.87
17	120	34.29	0	2723	1
18	30	4.246	0	2457	1

En la **Figura 2** se muestra la variación del grado de energía revalorizada GTL, RM y RP respecto al calor revalorizado y los rendimientos exergéticos globales del sistema.





(c)

Figura 2. Comportamientos de eficiencia exergética y calor revalorizado variando: (a) el nivel energético GTL, (b) Relación de flujos másicos (RM), y (c) relación de presiones (RP).

En la **Figura 2a**, se destaca el grado de revalorización de energía (GTL) como una variable crítica en el proceso del AHPTP. El absorbedor juega un papel clave al conectar los dos subciclos termodinámicos: la producción de energía eléctrica y la revalorización de calor. Observamos que no se puede exigir una revalorización de energía infinita, ya que existe un límite termodinámico en torno a 45 °C (zona en la que Q_A y η_{ex} disminuyen abruptamente). Asimismo, se nota un punto máximo alrededor de 40°C (región donde se obtiene la mejor relación de energía obtenida respecto a la energía suministrada), alcanzando una eficiencia exergética de 0.86. En la **Figura 2b**, se muestra el efecto de la relación de presiones (RP) y la temperatura del generador de alta presión (TGH) en el AHPTP. Mayores valores de RP se traducen en mayores presiones altas en el proceso global, lo que conduce a una mejor producción de energía eléctrica. Además, a mayores valores de TGH, se obtiene una mayor entalpía del proceso, lo que aumenta la cantidad de energía útil producida. Sin embargo, es importante destacar que un incremento en la RP también amplía el rango de operación del AHPTP con respecto a las temperaturas fuente. Por ejemplo, si se emplean temperaturas fuente de 120°C, el proceso logra elevadas eficiencias exergéticas (0.86) pero solo puede operar con RP cercanas a 1. En contraste, si se incrementan las temperaturas fuente a 180°C, el sistema puede operar con RP cercanas a 9, ampliando su rango de operación, aunque ligeramente reduciendo la eficiencia exergética a 0.82. Finalmente, en la **Figura 2c**, se observa la variación de la relación de masas (RM) en el sistema, la cual muestra un comportamiento lineal con respecto a la temperatura de la fuente de suministro. A mayores temperaturas de operación, el AHPTP presenta un menor rendimiento debido a la degradación de la energía hacia el medio ambiente, lo cual es un comportamiento esperado. Además, se puede apreciar que los cambios significativos se obtienen cuanto RM varía entre 0 y 1, y arriba de un valor de 4 no se observó algún cambio significativo en la eficiencia exergética del AHPTP. La **Figura 3** presenta gráficos de contorno que mapean las regiones o condiciones que ofrecen los mejores desempeños del AHPTP. En este análisis, se exploran diversos parámetros, como la eficiencia exergética (η_{ex}), calor revalorizado (Q_A) y potencia eléctrica (W_{net}), al modificar diferentes variables, como GTL, RP y TGH. En las **Figuras 3a** y **3b**, se representan los productos principales obtenidos por el AHPTP. Como era de esperar, en la **Figura 3a**, se observa que se obtienen mayores valores de W_{net} a medida que aumentan tanto la RP como la TGH del sistema. Por otro lado, en la **Figura 3b**, se aprecia que las mejores cargas térmicas revalorizadas (Q_A) se logran con mayores GTL, pero en rangos de TGH entre 120 y 170 °C. El efecto combinado de ambos productos se visualiza en la **Figura 3c**, donde se destacan elevados gradientes de revalorización de energía (GTL máximo de 45°C) y bajas TGH en el rango de 120 a 130 °C.

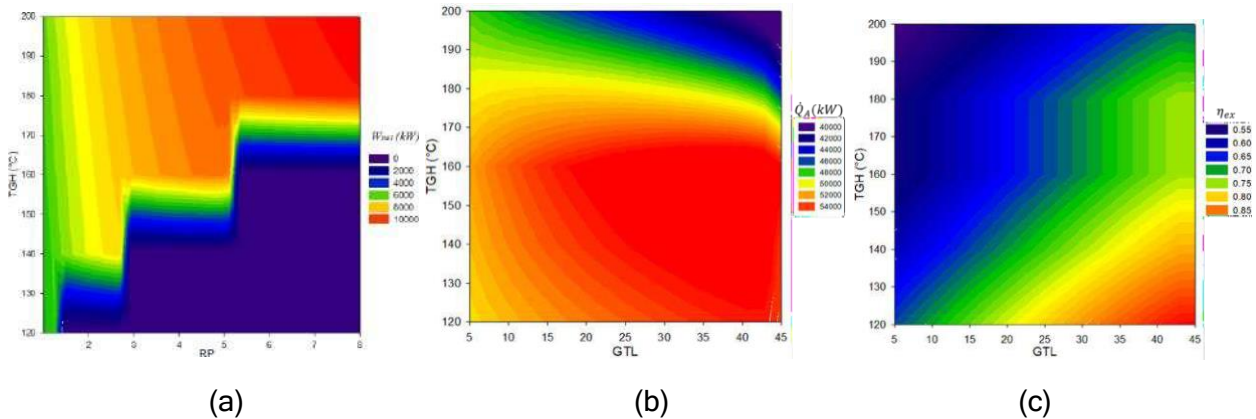


Figura 3. Tendencias de (a) potencia eléctrica neta (W_{net}), (b) calor revalorizado (Q_A) y (c) eficiencia exergética (η_{ex}), variando el nivel energético GTL, y la relación de presiones (RP).

CONCLUSIONES

En el presente estudio se llevó a cabo un estudio paramétrico de un sistema de cogeneración que emplea bombas de calor anidadas (AHPTP). El sistema propuesto tiene la versatilidad de producir energía eléctrica y calor revalorizado, simultáneamente. Se analizaron diversas condiciones de operación para determinar los mejores coeficientes de desempeño global. Los límites de operación dependen de los valores de GTL (máximo de 45) y RP (máximo de 8) cuando se opera a $TC=30^{\circ}C$ y $TE=70^{\circ}C$ y una T_{GH} máxima de $180^{\circ}C$. En estas condiciones, se alcanzó una eficiencia exergética máxima de 0.86 ($RP=1.1$, $RM=20$, $TGH=120^{\circ}C$ y $GTL=44$). Además, se ofrece una representación gráfica de las condiciones óptimas que maximizan tanto la potencia eléctrica (W_{net}) como la carga térmica revalorizada (Q_A) en el AHPTP. Se evidencia la importancia de las variables GTL, RP y TGH en la mejora del desempeño del sistema, proporcionando información valiosa para su optimización y diseño eficiente. Finalmente, es importante destacar que el sistema es capaz de producir hasta 10 MW en su punto máximo de producción eléctrica, lo que permite evitar la emisión de cerca de 39 kton de CO_2 si se utilizara una fuente de calor alternativa.

REFERENCIAS

- [1] M. Z. Jacobson and D. G. Streets. Influence of future anthropogenic emissions on climate, natural emissions, and air quality. *Journal of Geophysical Research* 2009, 114, D08118.
- [2] P. Friedlingstein, ... J. Zeng. Global Carbon Budget 2021. *Earth System Science Data* 2022, 14(4), 1917-2005.
- [3] L. Serra, J. Ramos-Saravia, M. Lozano, y A. Ensinas. Poligeneración: hacia una utilización sostenible de los recursos naturales. Congreso Internacional Desarrollo, Medio Ambiente, 2007.
- [4] L. GAO. Exergy analysis of coal-based polygeneration system for power and chemical production. *Energy*, 2004, 29, 2359-2371.
- [5] M. Haghani-maneh, E. Baniasad, J. Karimi Kerdabadi, y X. Yu. Exergoeconomic analysis of a novel trigeneration cycle based on steel slag heat recovery and biogas production in steelmaking plants. *Energy Convers Manag* 2022, 263, 115688, jul. 2022.
- [6] T. Xin, C. Xu, Y. Liu, y Y. Yang. Thermodynamic analysis of a novel zero carbon emission coal-based polygeneration system incorporating methanol synthesis and Allam power cycle. *Energy Convers Manag*, 2021, 244, 114441.
- [7] J. A. Hernández-Magallanes, C. Heard, R. Best, & W. Rivera. Modeling of a new absorption heat pump-transformer used to produce heat and power simultaneously. *Energy*, 29018, 165, 112-133.
- [8] Comisión Reguladora de Energía. (2021). Factor de Emisión del Sistema Eléctrico Nacional. Obtenido de: https://www.gob.mx/cms/uploads/attachment/file/706482/1.-Aviso_FE_CRE_2021.pdf

USO DE RESIDUOS ORGÁNICOS CÍTRICOS PARA LA SÍNTESIS DE NANOPARTÍCULA DE PLATA DISPERSADAS EN CAOLÍN

USE OF CITRUS ORGANIC WASTE FOR SYNTHESIS OF SILVER NANOPARTICLES DISPERSED IN KAOLIN

Javier Emanuel Castañeda-Aude^{1,2}, Carlos Enrique Escárcega-González^{1,2*}, José Rubén Morones-Ramírez^{1,2}, David Alejandro De Haro-Del Río¹, Héctor Javier Amézquita García¹, Enrique Díaz Barriga-Castro³

¹ Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Pedro de alba, s/n, San Nicolás de los Garza 66455, Nuevo León, México

² Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Centro de Investigación en Biotecnología y Nanotecnología, Parque de Investigación e Innovación Tecnológica, Apodaca 66629, Nuevo León, México

³ Centro de Investigación de Química Aplicada, Enrique Reyna H. No. 140, San José de los Cerritos, Saltillo 25294, Coahuila, México

*e-mail del autor de correspondencia/ e-mail correspondence author carlos.escarcegazz@uanl.edu.mx

RESUMEN. La síntesis verde y sustentable para la obtención de nanopartículas metálicas utilizando extractos naturales ha crecido considerablemente, debido a que no se tienen efectos nocivos y se pueden obtener nanomateriales útiles en varios campos de estudio al usar residuos agroindustriales de frutas, verduras y plantas. En este contexto, la utilización de caolín como vehículo dispersor de estas nanopartículas metálicas puede ser una opción viable ya que esta tiene una estructura que posee una alta estabilidad química y bajo coeficiente de expansión, haciéndolo un gran candidato para la dispersión de nanopartículas de plata. Por lo anterior, el presente estudio se centra en la síntesis de nanopartículas de plata (AgNPs) dispersadas en caolín utilizando una mezcla de residuos de cáscara de cítricos como agentes reductores y estabilizantes. Se realizó una extracción de polifenoles y flavonoides de la mezcla de cítricos con agua a temperatura ambiente durante 24 horas, una vez filtrado el extracto se mezcló con 340 mg de AgNO₃ y el caolín previamente hidratado. Un indicador de la formación de las AgNPs es el cambio de coloración en la solución pasando de un color blanco a un color marrón. Las AgNPs sintetizadas y dispersas en caolín se analizaron mediante técnicas analíticas y microestructurales como UV-Vis, TEM y HRTEM. Los resultados demuestran la formación de AgNPs cuasi esféricas con un tamaño de partícula entre 20-180 nm. La dispersión de estas AgNPs en caolín abre una posibilidad a su potencial uso en distintas aplicaciones tales como agentes antimicrobianos, sistemas de filtración de agua, embalajes resistentes a la contaminación bacteriana, aplicación en la agricultura como protección de cultivos, entre muchas otras aplicaciones. Lo anterior, además permite contribuir en problemáticas ambientales relacionadas con la generación y acumulación de desechos orgánicos, mediante la utilización, reducción y revalorización de residuos agroindustriales.

Palabras clave: nanopartículas de plata, caolín, residuos cítricos, síntesis sustentable, residuos orgánicos.

ABSTRACT. Green and sustainable synthesis to obtain metallic nanoparticles using natural extracts has grown considerably due to their non-toxic effects and the potential to obtain useful nanomaterials in various research fields by utilizing agro-industrial waste from fruits, vegetables, and plants. In this context, the utilization of kaolin as a dispersing vehicle for these metallic nanoparticles can be a viable option, given its structure with high chemical stability and low

coefficient of expansion, making it a promising candidate for dispersion of silver nanoparticles. Therefore, this study focuses on the synthesis of silver nanoparticles (AgNPs) dispersed in kaolin using a mixture of citrus peel waste (orange, lemon, and grapefruit) as a reducing and stabilizing agent. Polyphenols and flavonoids were extracted from the citrus mixture with water at room temperature for 24 hours. After filtering the extract, it was mixed with 340 mg of AgNO₃ and pre-hydrated kaolin. A change in coloration from white to brown in the solution served as an indicator of AgNPs formation. The synthesized AgNPs dispersed in kaolin were analyzed using analytical and microstructural techniques such as UV-Vis, TEM, and HRTEM. The results demonstrate the formation of quasi-spherical AgNPs with particle sizes ranging from 20 to 180 nm. The dispersion of these AgNPs in kaolin opens up potential applications, including antimicrobial agents, water filtration systems, packaging materials resistant to bacterial contamination, and their use in agriculture for crop protection, among many others. Furthermore, it allows for addressing environmental issues related to the generation and accumulation of organic waste by utilizing, reducing, and revalorizing agro-industrial waste.

Keywords: silver nanoparticles, kaolin, citrus waste, sustainable synthesis, organic waste.

INTRODUCCIÓN

La síntesis de nanopartículas metálicas a través de métodos sostenibles y respetuosos con el medio ambiente ha emergido como un campo de investigación en constante crecimiento en la nanotecnología moderna. Estos enfoques "sustentables" y "verdes" se han convertido en una prioridad debido a su capacidad para evitar efectos nocivos y su potencial para generar nanomateriales de alto valor en una amplia variedad de campos de aplicación [1].

En particular, la utilización de extractos naturales derivados de residuos agroindustriales de frutas, verduras y plantas ha demostrado ser una vía prometedora para la obtención de nanopartículas metálicas [2]. Estos extractos, ricos en compuestos bioactivos como polifenoles y flavonoides, actúan como agentes reductores y estabilizantes capaces de realizar la síntesis de nanopartículas metálicas como plata, cobre, oro, platino, paladio, entre muchos otros metales [3-6].

En este contexto, el caolín, un mineral arcilloso ampliamente disponible, ha atraído un interés significativo como un vehículo de dispersión para nanopartículas metálicas, en particular las de plata (AgNPs). La estructura única del caolín, caracterizada por una alta estabilidad química y un bajo coeficiente de expansión, lo convierte en un candidato atractivo para facilitar la dispersión y estabilización de las AgNPs [7].

La dispersión de AgNPs en caolín no solo abre una amplia gama de posibilidades para su aplicación en diversos campos, como agentes antimicrobianos, sistemas de filtración de agua, embalajes resistentes a la contaminación bacteriana y protección de cultivos en la agricultura, sino que también cumple con los principios fundamentales de la química verde [8]. En este contexto, al aprovechar el potencial reductor de los extractos naturales y emplear un material disponible en abundancia, esta investigación contribuye a la minimización de residuos, la disminución de productos químicos tóxicos y la promoción de procesos más ecoeficientes [9-11]. Además, esta estrategia se alinea con la necesidad de abordar problemáticas ambientales relacionadas con la generación y acumulación de desechos orgánicos, al revalorizar y reducir residuos agroindustriales.

La síntesis de AgNPs utilizando extractos de cáscara de cítricos ha sido ampliamente estudiada anteriormente debido a su amplia aplicación en múltiples campos. Sin embargo, la síntesis y dispersión de las AgNPs en un material como el caolín no ha tenido gran interés por parte de los

científicos. Por lo cual en este estudio se llevó a cabo una estrategia de síntesis sustentable utilizando residuos de cáscaras de naranja, toronja y limón para la obtención de polifenoles y flavonoides útiles durante la síntesis y dispersión de las AgNPs en caolín.

METODOLOGÍA

La síntesis sustentable de AgNPs utilizando extractos de cáscara de cítricos ha sido ampliamente estudiada anteriormente debido a su amplia aplicación en múltiples campos. Además, se han realizado dispersiones de las AgNPs en distintos materiales como alúmina, zeolitas, entre otros [12-13]. Por lo tanto, la metodología aplicada para todo el proceso se redacta a continuación:

1. Recolección de cáscara de cítricos y extracción de polifenoles

Las cáscaras de naranja valencia (*citrus sinensis*), limón mexicano (*citrus aurantifolia*) y toronja sangría (*citrus paradisi*) se recolectaron en el primer trimestre del año (enero a marzo) en Nuevo León, México. Una vez recolectadas estas cáscaras se lavaron con abundante agua destilada, se cortaron uniformemente (1 cm²). Se pesaron 20 g de la mezcla de cáscaras (6.67 g de cada una de las cáscaras). Para la realización del extracto acuoso se tomaron 20 g de la mezcla de cáscaras y se añadieron a 100 mL de agua destilada en un vaso de precipitado. La mezcla se aisló de la luz solar durante 24 h a condiciones ambientales. Esta mezcla se filtró con papel filtro (Whatman grade 40) y se almacenó en refrigeración a 4°C.

2. Síntesis de AgNPs y dispersión en caolín

Se adicionaron 2 g de caolín en 200 mL de agua destilada y se llevó a cabo la dispersión del caolín en un baño de ultrasonido durante 1 h. Una vez pasado este tiempo se añadieron 20 mL del extracto junto con 340 mg de AgNO₃, donde nuevamente se sometió al baño de ultrasonido por 1 h. La formación de AgNPs se observó debido a que la mezcla pasó de un color blanco a un color marrón-negro. Pasadas 24 h las AgNPs dispersas en caolín se purificaron mediante una centrifugadora (Thermo Scientific Sorvall Legend XFR), que se configuró a 9000 rpm durante 15 minutos. Luego, se eliminó el sobrenadante y el material restante se lavó dos veces con etanol al 96 % para eliminar las impurezas y la materia orgánica. Finalmente, este proceso dio como resultado AgNPs dispersas en caolín.

3. Caracterización de AgNPs dispersadas en caolín

Las AgNPs dispersadas en caolín se sometieron a varios tipos de análisis para determinar sus características. Para comprobar la síntesis de AgNPs se utilizó espectrofotometría UV-visible en un equipo Thermo Scientific Multiskan GO. Para evaluar los rasgos microestructurales y estructurales de las AgNPs, éstas fueron examinados con microscopía electrónica de transmisión (TEM) y de alta resolución (HRTEM) utilizando el microscopio FEI-TITAN. Adicional a esto, se llevó a cabo en el mismo equipo de MET la difracción de electrones de área (SAED). Además, se utilizó la espectrometría de dispersión de energía (EDS) para verificar la presencia de plata metálica. Mientras que para los análisis de difracción de rayos X (XRD) se utilizó el equipo PANalytical X'Pert Pro.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En este estudio, se utilizó el espectro UV-vis como primer método de confirmación de las AgNPs dispersadas y sintetizadas con el extracto de cáscaras de cítricos. La **Figura 1A** muestra el espectro UV-Vis de las AgNPs dispersas en caolín que fueron sintetizadas con el extracto de cáscaras cítricas, en la cual no se logra observar la típica resonancia de plasmón de superficie de las

AgNPs que va de 400 a 450 nm [14]. Esto puede deberse a que el caolín se encuentra presente en mayor cantidad y obstaculiza la absorbancia de las AgNPs dispersas.

En el análisis XRD, se buscan los picos característicos de las AgNPs [15]. Los cuales se muestran etiquetados en la **Figura 1B**, estos picos de difracción característicos de las AgNPs se dieron en 37.73, 43.85, 63.75 y 76.51. Estos picos corresponden a los planos (111), (200), (220) y (311) de la plata metálica cúbica centrada en la cara. Los demás picos corresponden solamente al caolín. Con esto se puede dar la primera confirmación de la síntesis de las AgNPs por medio del extracto de cáscaras de cítricos. Además, el análisis EDS confirma la presencia de AgNPs obtenidas (**Figura 1C**) donde este material está compuesto por plata metálica, los elementos como el cobre y carbono corresponden a la rejilla TEM de cobre y los elementos restantes (aluminio, silicio, oxígeno) correspondientes al caolín. Además, se han reportado resultados similares de análisis EDS de AgNPs cuando se han utilizado extractos de cáscara de naranja [16], cáscara de limón [17] y *toronja* [18].

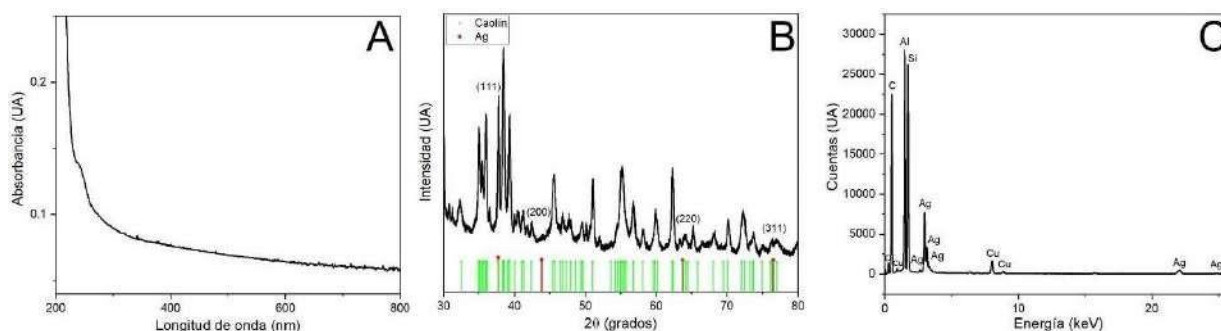


Figura 1. Caracterización de las AgNPs dispersas en caolín, sintetizadas con una mezcla de extracto de cáscaras cítricas. **(A)** Espectro de absorbancia UV-vis de las AgNPs. **(B)** Patrón XRD de los AgNPs con picos de difracción marcados. **(C)** Espectro EDS de las AgNPs con los picos etiquetados.

La morfología de los AgNPs fue determinada por imágenes TEM y HRTEM (**Figura 2**). Estos se obtuvieron para analizar el tamaño y la forma de las partículas, y los datos del histograma se analizaron para determinar la distribución del tamaño. Las AgNPs dispersas en el caolín mostraron una forma esférica con un tamaño promedio de las partículas de 43.19 nm y desviación estándar de 3.11 nm. Las AgNPs menores a 20 nm, se difundían dentro de los poros de caolín siendo inaccesibles para su medición y determinación morfológica.

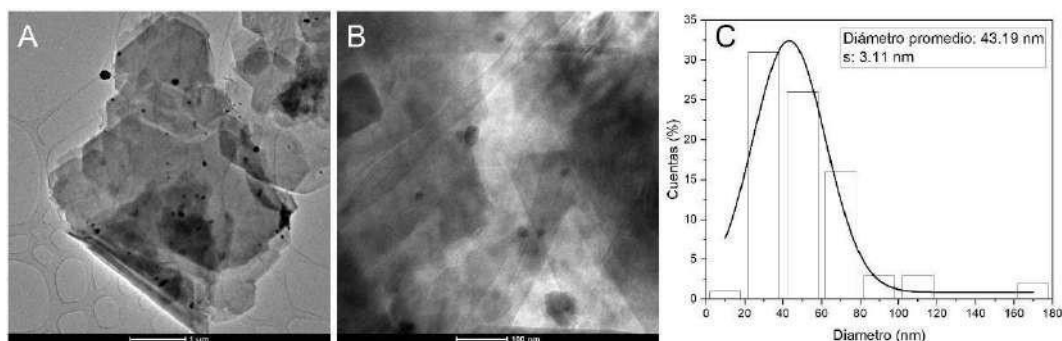


Figura 2. Caracterización de los AgNPs dispersas en caolín, sintetizadas con una mezcla de extracto de cáscaras cítricas. **(A)** Micrografía TEM de las AgNPs dispersas en caolín. **(B)** Micrografía HRTEM de las AgNPs dispersas en caolín. **(C)** Histograma que muestra la distribución del tamaño de partícula.

CONCLUSIONES

En conclusión, el presente estudio ha demostrado la viabilidad y efectividad de la síntesis de AgNPs dispersadas en caolín utilizando extractos de cáscaras de cítricos como agentes reductores y estabilizantes. Las AgNPs obtenidas mostraron una morfología cuasi esférica y un tamaño promedio de partícula de 43.19 nm, lo que indica una adecuada dispersión y estabilidad en el caolín.

La utilización de extractos naturales de cáscaras de cítricos como reductores y estabilizantes de AgNPs representa un enfoque prometedor en la síntesis verde de nanomateriales, además de un avance significativo en la utilización de recursos naturales y en la reducción de la generación de desechos. La dispersión de AgNPs en caolín abre un abanico de posibilidades para su aplicación en diversos campos, incluyendo la medicina, la electrónica, el tratamiento de aguas, la agricultura y la protección de cultivos, entre otros.

Este estudio contribuye al conocimiento científico sobre la síntesis y aplicación de nanomateriales basados en la síntesis verde y sustentable. Las AgNPs dispersadas en caolín presentan un gran potencial para aplicaciones prácticas en diversos campos, lo que puede conducir a soluciones innovadoras y sostenibles para enfrentar desafíos en sectores clave de la sociedad.

AGRADECIMIENTOS

CONAHCYT por el Programa Nacional de Becas de Posgrado para JECA, Proyecto apoyado por el CONAHCYT en el año 2023 de Ciencia de Frontera, y Programa PAICYT 2023 de la UANL.

REFERENCIAS

- [1] Burduşel, A. C., Gherasim, O., Grumezescu, A. M., Mogoantă, L., Ficai, A., & Andronescu, E. (2018). Biomedical applications of silver nanoparticles: An up-to-date overview. *Nanomaterials*, 8(9), 1-25. <https://doi.org/10.3390/nano8090681>
- [2] Ghosh, P. R., Fawcett, D., Sharma, S. B., & Poinern, G. E. J. (2017). Production of high-value nanoparticles via biogenic processes using aquacultural and horticultural food waste. *Materials*, 10(8). <https://doi.org/10.3390/ma10080852>
- [3] Annu, Ahmed, S., Kaur, G., Sharma, P., Singh, S., & Ikram, S. (2018). Fruit waste (peel) as bio-reductant to synthesize silver nanoparticles with antimicrobial, antioxidant and cytotoxic activities. *Journal of Applied Biomedicine*, 16(3), 221-231. <https://doi.org/10.1016/j.jab.2018.02.002>
- [4] Shende, S., Ingle, A. P., Gade, A., & Rai, M. (2015). Green synthesis of copper nanoparticles by *Citrus medica* Linn. (Idilimbu) juice and its antimicrobial activity. *World Journal of Microbiology and Biotechnology*, 31(6), 865-873. <https://doi.org/10.1007/s11274-015-1840-3>
- [5] Poinern, G. E. J., Chapman, P., Le, X., & Fawcett, D. (2013). Green biosynthesis of gold nanometre scale plates using the leaf extracts from an indigenous Australian plant *Eucalyptus macrocarpa*. *Gold Bulletin*, 46(3), 165-173. <https://doi.org/10.1007/s13404-013-0096-7>
- [6] Siddiqi, K. S., & Husen, A. (2016). Green Synthesis, Characterization and Uses of Palladium/Platinum Nanoparticles. *Nanoscale Research Letters*, 11(1). <https://doi.org/10.1186/s11671-016-1695-z>
- [7] Hariram, M., Ganesan, V., Muthuramkumar, & S., & Vivekanandhan, & S. (n.d.). Functionalization of kaolin clay with silver nanoparticles by *Murraya koenigii* fruit extract-mediated bioreduction process for antimicrobial applications. <https://doi.org/10.1007/s41779-020-00545-2>/Published
- [8] Soltys, L., Olkhovyy, O., Tatarchuk, T., & Naushad, M. (2021). Green synthesis of metal and metal oxide nanoparticles: Principles of green chemistry and raw materials. In *Magnetochemistry* (Vol. 7, Issue 11). MDPI. <https://doi.org/10.3390/magnetochemistry7110145>

- [9] Rodriguez-Garraus, A., Azqueta, A., Laborda, F., Gimenez-Ingalaturre, A. C., Ezquerro, A., Lostao, L., & de Cerain, A. L. (2022). In Vitro Genotoxicity Evaluation of an Antiseptic Formulation Containing Kaolin and Silver Nanoparticles. *Nanomaterials*, 12(6), 1-17. <https://doi.org/10.3390/nano12060914>
- [10] Asmare, Z. G., Aragaw, B. A., Atlabachew, M., & Wubieneh, T. A. (2022). Kaolin-Supported Silver Nanoparticles as an Effective Catalyst for the Removal of Methylene Blue Dye from Aqueous Solutions. *ACS Omega*. <https://doi.org/10.1021/acsomega.2c05265>
- [11] Shoultz-Wilson, W. A., Reinsch, B. C., Tsyusko, O. V., Bertsch, P. M., Lowry, G. V., & Unrine, J. M. (2011). Effect of silver nanoparticle surface coating on bioaccumulation and reproductive toxicity in earthworms (*Eisenia fetida*). *Nanotoxicology*, 5(3), 432-444. <https://doi.org/10.3109/17435390.2010.537382>
- [12] Torres-Flores, E. I., Flores-López, N. S., Martínez-Núñez, C. E., Tánori-Córdova, J. C., Flores-Acosta, M., & Cortez-Valadez, M. (2021). Silver nanoparticles in natural zeolites incorporated into commercial coating: antibacterial study. *Applied Physics A: Materials Science and Processing*, 127(1). <https://doi.org/10.1007/s00339-020-04227-5>
- [13] Patakfalvi, R., & Dékány, I. (2004). Synthesis and intercalation of silver nanoparticles in kaolinite/DMSO complexes. *Applied Clay Science*, 25(3-4), 149-159. <https://doi.org/10.1016/j.clay.2003.08.007>
- [14] Rafique, M., Sadaf, I., Rafique, M. S., & Tahir, M. B. (2017). A review on green synthesis of silver nanoparticles and their applications. *Artificial Cells, Nanomedicine and Biotechnology*, 45(7), 1272-1291. <https://doi.org/10.1080/21691401.2016.1241792>
- [15] Kaviya, S., Santhanalakshmi, J., Viswanathan, B., Muthumary, J., & Srinivasan, K. (2011). Biosynthesis of silver nanoparticles using citrus sinensis peel extract and its antibacterial activity. *Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 79(3), 594-598. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2011.03.040>
- [16] Manal, A. A., Awatif, A. H., Khalid, M. O. O., Dalia, F. A. E., Nada, E. E., Lamia, A. A., Shorog, M. A. O., Nada, M. M., & Abdelelah, A. G. A. (2014). Silver nanoparticles biogenic synthesized using an orange peel extract and their use as an anti-bacterial agent. *International Journal of Physical Sciences*, 9(3), 34-40. <https://doi.org/10.5897/ijps2013.4080>
- [17] Najimu Nisha, S., Aysha, O. S., Syed Nasar Rahaman, J., Vinoth Kumar, P., Valli, S., Nirmala, P., & Reena, A. (2014). Lemon peels mediated synthesis of silver nanoparticles and its antidermatophytic activity. *Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 124, 194-198. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2013.12.019>
- [18] Ali, K. A., Yao, R., Wu, W., Masum, M. M. I., Luo, J., Wang, Y., Zhang, Y., An, Q., Sun, G., & Li, B. (2020). Biosynthesis of silver nanoparticle from pomelo (*Citrus Maxima*) and their antibacterial activity against *acidovorax oryzae* RS-2. *Materials Research Express*, 7(1), 15097. <https://doi.org/10.1088/2053-1591/ab6c5e>

EVALUACIÓN DE TÉCNICAS DE EXTRACCIÓN DE HIDROCARBUROS POLICÍCLICOS AROMÁTICOS PARA EL ANÁLISIS DE COMBUSTIBLE COQUE MEDIANTE CG-MS

EVALUATION OF EXTRACTION TECHNIQUES OF POLYCYCLIC AROMATIC HYDROCARBONS FOR THE ANALYSIS OF COKE FUEL BY CG-MS

Diana Itzel Solis Cruz¹, Octavio Gaspar Ramírez², Juana Suhey Ponce Hernandez², Edgar Arturo Salas Espinosa^{2*}

¹Universidad del Valle de México. Campus Cumbres. Av. De las Palmas #5500 Cumbres 4to sector Monterrey Nuevo León México CP 64610

²Centro de Investigación y Asistencia en Tecnología y Diseño del Estado de Jalisco. Subsele Noreste Autopista Mty-Aeropuerto Km 10. Parque PIIT. Vía de la Innovación 404. Apodaca, Nuevo León, México CP 66626

*esalas@ciatej.mx

RESUMEN. Los hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAH's) contienen carbón, hidrógeno y al menos dos anillos de benceno y son clasificados como carcinogénicos y mutagénicos. Son producidos por la combustión incompleta de carbón, combustibles fósiles y materia orgánica. La agencia estadounidense de protección al medio ambiente (EPA 2006) publicó una lista de importantes contaminantes siendo 15 PAH's: 1) Naftaleno, 2) Acenaftileno, 3) Fluoreno, 4) Antraceno, 5) Fenantreno, 6) Fluoranteno, 7) Pireno, 8) Benzo[a]antraceno, 9) Criseno, 10) Benzo[b]fluoranteno, 11) Benzo[k]fluoranteno, 12) Benzo[a]pireno, 13) Benzo[e]pireno, 14) Indeno[1,2,3-cd]pireno, 15) Dibenzo[a, h]antraceno. El coque es un combustible obtenido a través de la carbonización de fracciones pesadas del petróleo, útil en la fabricación de hierro, acero, etc. Es considerado como matriz de estudio para extracción de PAH's. Entre las técnicas de extracción se encuentran ultrasonido, microextracción en fase sólida, líquidos presurizados, sorción con barra agitadora, soxhlet y microondas. El objetivo de este trabajo fue evaluar la eficiencia de extracción de PAH's en coque por microondas y soxhlet, así como su identificación por cromatografía de gases masas (GC-MS). Para ello, se utilizó el microondas (Anton Paar, Multiwave 500), 0.2 g de coque y 5 mL de hexano/acetona 1:1, a 120°C por 25 min. La extracción por soxhlet se realizó con 250 mL de solvente y 10 g de muestra durante 6h. Posteriormente los extractos se analizaron en GC Agilent 7890A, detector (MS Agilent 5975C), columna DB-EUPAH (20 m x 180 µm x014), modo splitless a 320°C, utilizando 15 estándares de los PAH's anteriormente mencionados. Todo esto como parte del proyecto macro de Agentes Tóxicos F003/321080 del PRONACES CONAHCYT. En ambos extractos se identificó la misma cantidad de PAH's. La extracción PAH's mediante microondas parece ser la más eficiente ya que ofrece ventajas como el uso de menor cantidad de muestra, solventes y tiempo extracción en comparación con soxhlet. Esto logra prácticas analíticas ecoamigables para la extracción de PAH's.

Palabras clave: Extracción, Microondas, Soxhlet, Coque, Aromaticos. Policíclicos

ABSTRACT. Polycyclic aromatic hydrocarbons (PAH's) contain carbon, hydrogen and at least two benzene rings in their structure and are classified as carcinogenic and mutagenic. The incomplete combustion of coal, fossil fuels, and organic matter produces PAHs. The US Environmental Protection Agency (EPA 2006) published important pollutants as 15 PAH's: 1) Naphthalene, 2) Acenaphthylene, 3) Fluorene, 4) Anthracene, 5) Phenanthrene, 6)

Fluoranthene, 7) Pyrene, 8) Benzo [a]anthracene, 9) Chrysene, 10) Benzo[b]fluoranthene, 11) Benzo[k]fluoranthene, 12) Benzo[a]pyrene, 13) Benzo[e]pyrene, 14) Indeno[1,2,3-cd]pyrene, 15) Dibenzo[a,h]anthracene. Coke is a fuel obtained through the carbonization of heavy oil fractions, useful in the manufacture of iron, steel, etc., considered suitable for extraction of PAHs. Extraction techniques include ultrasound, solid phase microextraction, pressurized liquids, stir bar sorption, Soxhlet, and microwave. The objective of this work was to evaluate the efficiency of extraction of PAH's in coke by microwaves and Soxhlet and their identification by mass gas chromatography (GC-MS). For this, the microwave (Anton Paar, Multiwave 500), 0.2 g of coke and 5 mL of hexane/acetone 1:1 were used, at 120°C for 25 min. Soxhlet extraction was carried out with 250 mL of hexane/acetone 1:1 and 10 g of sample for 6h. Subsequently, the extracts were analyzed in Agilent 7890A GC, detector (MS Agilent 5975C), DB-EUPAH column (20 m x 180 µm x014), splitless mode, at 320°C, using the 15 PAHs published by EPA as standard. In both extracts, the same amount of PAH's were identified, microwave PAH's extraction seems to be the most efficient, because it offers advantages such as less amount of sample, solvents and extraction time compared to Soxhlet, achieving eco-friendly analytical practices for the extraction of PAH's extraction of PAH's.

Keywords: *Extraction, Microwave, Soxhlet, Coke, Aromatics, Polycyclic*

INTRODUCCIÓN

Los hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAH's) son un grupo de compuestos orgánicos formados por múltiples anillos aromáticos que van desde 2 hasta 10. Los PAH's son contaminantes atmosféricos prioritarios, reconocidos por la EPA como compuestos cancerígenos, teratogénicos y genotóxicos [1]. Como fuentes de PAH's se encuentran los derrames y la producción de petróleo, combustiones incompletas, incendios de bosques y pasto no intencionales, así como fuentes biogénicas como algas, bacterias y otros. Los PAH's tienden a ser bioacumulables, tienen una vida media y toxicidad de largo alcance por lo que son fuente de riesgo para adultos y niños a través de la ingestión y contacto dérmico [2]. Por lo que es indispensable encontrar metodologías confiables y rápidas para su análisis e identificación, con el fin de prevenir daños al ambiente y preservar la salud pública. La mayoría de los métodos analíticos constan de varias etapas, generalmente la primera consiste en alguna extracción con solvente, como el método soxhlet o la sonicación. Otras alternativas más rápidas y que requieren menos volumen de disolvente son líquido presurizado, microondas o extracción con fluido supercrítico. Como segunda etapa, las muestras pueden requerir limpieza para eliminar las interferencias que pueden sesgar la cuantificación e identificación de compuestos [3]. Los compuestos que interfieren se pueden eliminar usando columnas empacado con materiales de purificación, o combinando extracción y limpieza. El último paso es la separación y cuantificación. La determinación simultánea de PAH's es lograda mediante la cromatografía de gases, la cual es una herramienta esencial en la caracterización de contaminantes orgánicos presentes en muestras ambientales [4], la cual generalmente se acopla a espectrometría de masas (GC-MS o GC-MS/MS). Sin embargo, las metodologías desarrolladas para la extracción de PAH's en matrices sólidas de diferentes fuentes consumen solventes y son tediosas. Por lo tanto, comprender las características, ventajas y desventajas de cada una de ellas permitirá un análisis e identificación más eficiente, segura y ecoamigable de los PAH's, siendo versátil para aplicaciones en diferentes matrices lo que hace relevante la aportación de la presente investigación.

METODOLOGÍA

Se llevó a cabo un estudio para analizar e identificar los compuestos aromáticos policíclicos presentes en muestras de coque, para ello se diseñaron dos técnicas de extracción diferentes. Para la extracción mediante microonda, se empleó un equipo de la marca Anton Paar, Multiwave 500. Se utilizaron 0.2 g de muestra y de solvente se utilizó 5 mL de hexano/acetona en una proporción 1:1. El proceso se realizó a una temperatura de 120°C por 25 minutos. Por otro lado, para la extracción utilizando el equipo soxhlet, se utilizaron 250 mL del mismo solvente (hexano/acetona en una proporción 1:1) y se emplearon 10 g de muestra. Este proceso tuvo una duración de 6 horas. Posteriormente, se procedió a analizar ambos extractos mediante cromatografía de gases (GC) un equipo Agilent 7890^a, acoplado a espectrometría de masas (MS Agilent 5975C). Se utilizó una columna DB-EUPAH (20 m x 180 µm x014) en modo splitless, operando a una temperatura de 320°C. Se utilizaron 15 PAH's como estándares, de la marca Accustandard, a fin de establecer una referencia para la identificación de los compuestos presentes en las muestras. Estos compuestos estándar fueron los siguientes: 1) Naftaleno, 2) Acenaftileno, 3) Fluoreno, 4) Antraceno, 5) Fenantreno, 6) Fluoranteno, 7) Pireno, 8) Benzo[a]antraceno, 9) Criseno, 10) Benzo[b]fluoranteno, 11) Benzo[k]fluoranteno, 12) Benzo[a]pireno, 13) Benzo[e]pireno, 14) Indeno[1,2,3-cd]pireno, 15) Dibenzo[a, h]antraceno.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

El estudio presenta un análisis comparativo entre dos métodos de extracción: la extracción por microondas y la extracción Soxhlet. Para ambas muestras se obtuvieron cromatogramas identificando 15 PAH's, corroborando tiempos de retención con estándares analíticos (Tabla 1)

Tabla 1. Se muestran los tiempos de retención, los iones cualificadores de los 15 PAH's analizados en las muestras analizadas en GC-MS.

Compuesto	Tiempo de retención (min)	Iones cualificadores (m/z)			Compuesto	Tiempo de retención (min)	Iones cualificadores (m/z)		
		1	2	3			1	2	3
Naftaleno	3.261	127	128	129	Criseno	14.489	229	228	226
Acenaftileno	3.358	154	153	152	Benzo[b]Fluoranteno	18.127	253	252	250
Fluoreno	4.176	167	166	165	Benzo[k]Fluoranteno	18.325	253	252	250
Antraceno	5.624	178	176	-	Benzo[a]Pireno	19.23	253	252	250
Fenantreno	5.348	178	176	-	Benzo[e]Pireno	19.392	253	252	250
Fluoranteno	9.01	203	202	200	Indeno[1,2,3-cd]Pireno	23.57	277	276	274
Pireno	12.525	203	202	200	Dibenzo[a,h]antraceno	23.754	129	128	127
Benzo[a]Antraceno	13.958	229	228	226					

El cromatograma de la muestra extraída por microondas reveló picos no identificados en comparación con la muestra obtenida por Soxhlet (ver figura 1), lo que sugiere que para muestras extraídas por microondas es necesario la aplicación de alguna etapa de limpieza antes de analizar por cromatografía o atribuir este efecto a la capacidad del microondas para elevar la temperatura del disolvente por encima de su punto de ebullición, lo que facilito la penetración en la matriz de la muestra y que aumentara la solubilidad de los PAHs, como lo revelan López-Avila y colaboradores (1994) pioneros en aplicar la radiación microondas en la extracción de contaminantes orgánicos. Por el contrario, las muestras extraídas por soxhlet mostraron picos más intensos en el cromatograma (ver figura 1), a excepción de un pico más pronunciado en el minuto 19.39 en el cromatograma de extracción por microondas el cual corresponde a Benzo[e]Pireno, compuesto altamente cancerígeno que puede depositarse fácilmente en tejidos grasos y tracto digestivo lo que hace evidente la necesidad de calibración del método para cuantificación de los compuestos aromáticos policíclicos.

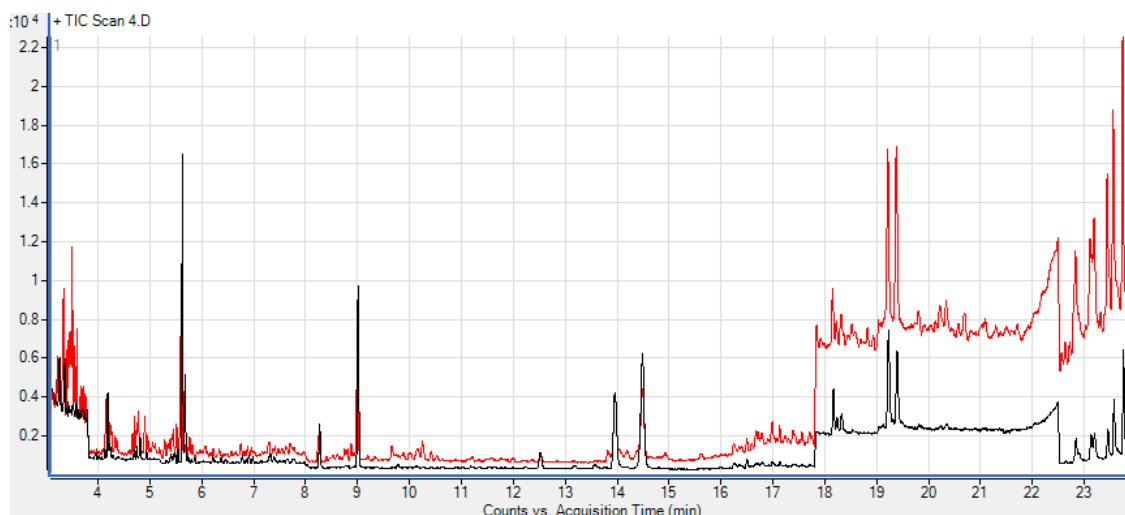


Figura 1. Los resultados en rojo representan los PAH's extraídos con microondas, Los resultados en negro representa los PAH's extraídos por soxhlet

Otros estudios para comparar la eficacia de la extracción de PAHs utilizando radiación microondas en contraste con la extracción Soxhlet indicaron que la radiación microondas es menos eficiente que el método Soxhlet en la extracción de fracciones más finas de partículas de sedimento, pero muestra una cierta mejora en las fracciones más gruesas [5]. Estos hallazgos concuerdan con los resultados de la presente investigación ya que la muestra de coque presentaba aspecto granulométrico grueso.

En el ámbito de la extracción de compuestos orgánicos a partir de muestras sólidas, la técnica Soxhlet ha sido ampliamente adoptada y considerada una opción estándar. Este método permite la extracción de una gran cantidad de matriz y no necesita etapa de filtrado. A pesar de las ventajas que ofrece la extracción Soxhlet, es importante considerar la cantidad de disolvente utilizada en relación con otras técnicas alternativas, como la extracción por microondas. En el contexto de nuestro estudio, se emplearon 250 ml de disolvente para llevar a cabo la extracción por Soxhlet. Esta cifra contrasta significativamente con los 5 ml de disolvente utilizados en la extracción por microondas, lo que implica un ahorro sustancial de aproximadamente un 98% en el consumo de solvente. Este dato revela una importante diferencia en términos de eficiencia en el uso de recursos, donde la técnica de extracción por microondas se destaca por su menor impacto ambiental.

CONCLUSIONES

La identificación de PAH's demostró ser eficiente en ambas metodologías de extracción. La técnica de extracción de PAHs mediante microondas emerge como una opción sumamente conveniente en términos de velocidad, eficiencia y reducción en el consumo de disolventes, logrando en este estudio un notorio ahorro del 98% en comparación con el método Soxhlet, el cual demanda más tiempo y un mayor uso de solventes. Estos resultados posicionan la extracción por microondas como una buena opción para la obtención de compuestos aromáticos policíclicos.

Se agradece al Pronaces Agentes tóxicos - Conahcyt Proyecto F003/321080.

REFERENCIAS

- [1] Badriah S. Al-Farhan, Tarek O. Said, Sara A. El-Ghamdi, Ali Y. Al-Alamie. Distribution and health risk assessment on dietary exposure of PAHs in vegetables and fruits of Asir, Saudi Arabia. Waste Management Bulletin Volume 1, Issue 3, December 2023, Pages 94-102
- [2] Huilin Zhang, Ranran Liu, Liu Yang, Hong Cheng, Shengchun Wang, Bin Zhang, Jiyuan Shao, Shengtao Ma, Dan Norback, Xin Zhang , Taicheng An. Exposure to polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) in outdoor air and respiratory health, inflammation and oxidative stress biomarkers: A panel study in healthy young adults. Science of The Total Environment Volume 899, 15 November 2023, 165582
- [3] Kevin Humbert, Maxime Debret, Christophe Morin, Julie Cosme, Florence Portet-Koltalo. Direct thermal desorption-gas chromatography-tandem mass spectrometry versus microwave assisted extraction and GC-MS for the simultaneous analysis of polyaromatic hydrocarbons (PAHs, PCBs) from sediments. Talanta Volume 250, 1 December 2022, 123735.
- [4] Soriano Sanz J.A. Evaluación y seguimiento del contenido en hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAH's) en mejillón silvestre de la costa de galicia y cantábrico, antes y después del vertido del b/t prestige. Instituto Español de Ocenografía, Tesis doctoral 2009.
- [5] Letellier, M, Budzinski, H. (1999). Microwave assisted extraction of organic compounds. Analisis, 27:259-271
- [6] Lopez-Avila, V., Young, R., Beckert, W.F. (1994). Microwave-assisted Extraction of Organic Compounds from Standard Reference Soils and Sediments. Analytical Chemistry, 66:1097-1106



VII CONGRESO INTERNACIONAL DE
QUÍMICA E INGENIERÍA VERDE

EJE TEMÁTICO 8

AMBIENTE, SALUD Y SEGURIDAD



MEDICIÓN DE LA ACTIVIDAD ELÉCTRICA CEREBRAL PARA LA CARACTERIZACIÓN DEL ESTRÉS LABORAL

BRAIN ELECTRICAL ACTIVITY MEASUREMENT FOR THE WORK STRESS CHARACTERIZATION

Alma Lilly Nava Sedano^{1*}, Tomas Emmanuel Higareda Pliego¹, Francisco Alfonso Coronel García¹, Lizzeth Quevedo Nava²

¹Tecnológico Nacional de México/ Instituto Tecnológico de Zacatepec, Calz. Tecnológico No. 27, Col. Plan de Ayala, C.p. 62780, Zacatepec, Morelos

²Tecnológico Nacional de México/ Instituto Tecnológico Superior de El Mante, K.m 6.7, México 85, C.p.89930, Quintero, Tamaulipas

**alma.ns@zacatepec.tecnm.mx*

RESUMEN. De acuerdo a la Organización Mundial de la Salud (OMS), en México, el 75% de la población económicamente activa padece de estrés laboral, ocupando el primer lugar a nivel mundial, de acuerdo la Revista Forbes, en el 2023. Los estudios acerca del estrés son relevantes por el impacto negativo que tienen sobre la salud.

El objetivo de este artículo es presentar resultados de una investigación documental sobre el estado del arte del registro de la actividad eléctrica del cerebro para determinar el nivel de estrés dentro de ambientes laborales, con el fin de conocer el comportamiento de los ritmos cerebrales que caracterizan al estrés. La metodología aplicada es la búsqueda retrospectiva de investigaciones científicas indexadas con las palabras claves: encefalografía, bioseñales, estrés laboral y riesgos psicosociales en la base de datos Scopus, para posteriormente evaluarlas cualitativamente en los resultados, logrando identificar 19 casos de estudio en los que se utilizaron dispositivos de registro encefalográfico para medir el estrés en determinadas profesiones o actividades. Los artículos se analizaron considerando su contexto, objetivos y aportaciones, para concluir cuales son los patrones que siguen los ritmos cerebrales cuando existe estrés laboral, las zonas del cerebro donde se generan y la influencia de factores individuales psicológicos del trabajador, contribuyendo así, al marco teórico del estudio neuroergonómico en desarrollo.

Palabras clave: actividad encefalográfica, estrés laboral, EEG

ABSTRACT. According to the World Health Organization (WHO), in Mexico, 75% of the economically active population experiences work-related stress, ranking first worldwide, according to Forbes Magazine, in 2023. Studies about work-related stress are crucial because of the negative impact they have on workers' health.

The article's aim is to present the results about a literary review of the current state of researches related to the recording of the electrical activity of the brain to measure the level of stress in work environments, with the goal of establishing the behavior of the brain rhythms that characterize stress at work. The methodology used is the retrospective search of scientific investigations indexed with the keywords: encephalography, biosignals, work-related stress and psychosocial risks, in the Scopus database and later, qualitatively evaluate them in the results, managing to identify 19 investigations that used the encephalographic records to measure stress at work in certain professions or activities. The articles were analyzed considering their context, objectives and contributions, to conclude which are the patterns that brain rhythms follow when there is work-

related stress, the areas of the brain where they were generated and the influence of individual psychological factors of the worker, contributing to the neuroergonomic study that is developing.

Keywords: *Encephalography activity, work stress, EEG*

INTRODUCCIÓN

El Instituto Mexicano del Seguro Social (IMSS) define al estrés laboral como un “tipo de estrés donde la creciente presión en el entorno laboral puede provocar la saturación física y/o mental del trabajador, generando consecuencias que no sólo afectan la salud, sino también su entorno más próximo ya que genera un desequilibrio entre lo laboral y lo personal”; y si bien, la Norma Oficial Mexicana NOM-035-STPS-2018, Factores de Riesgo Psicosocial en el Trabajo - Identificación, Análisis y Prevención, no define al estrés laboral como tal, si lo considera dentro de lo que especifica como un Factor de Riesgo Psicosocial que debe identificarse, medirse, eliminarse o prevenirse.

Por esto, las organizaciones recurren a la aplicación de entrevistas, cuestionarios y observaciones para obtener información y prevenir el sobreesfuerzo físico y/o mental del trabajador; sin embargo estas técnicas conllevan una influencia subjetiva, por lo que los resultados pudiesen presentar sesgo. También es posible evaluar el estrés mediante bioseñales, como: el pH, la sudoración y la oxigenación (bioseñales no eléctricas), o los encefalogramas que se clasifican, ya como señales eléctricas, pueden disminuir la influencia subjetiva y es una alternativa más confiable para identificar y evaluar el estrés laboral. El objetivo de este artículo es presentar los resultados de una investigación documental sobre el estado del arte del registro de la actividad eléctrica del cerebro para determinar el nivel de estrés dentro de ambientes laborales, con el propósito de conocer el comportamiento de los ritmos cerebrales que lo caracterizan y poder fortalecer futuras investigaciones.

METODOLOGÍA

Se organizó una búsqueda sistemática de publicaciones científicas en la base de datos Scopus relacionadas con los términos Estrés y Encefalograma (EEG); identificados los editores se procedió en la página web de cada uno de ellos a buscar los artículos asociados a las palabras claves: encefalografía, bioseñales, estrés laboral y riesgos psicosociales.

Al ser el estrés un fenómeno multifactorial, se aborda desde diversos enfoques y la presente revisión literaria forma parte del proyecto relacionado con la seguridad y salud industrial, considerando trabajos relacionados con seguridad y salud industrial o laboral, accidentes y riesgos, como criterio de inclusión para esta investigación.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Aplicando la metodología expuesta y aplicando el criterio de inclusión, a continuación, se resume los resultados por repositorio, especificando el total de artículos revisados y los que resultaron de interés.

Research in Occupational Stress and Well Being. Artículos revisados 451. Artículos de interés 7.

- Estudios con uso de realidad virtual en análisis de señales cerebrales mediante EEG para evaluar el nivel de fatiga mental y prevenir el riesgo de caídas en sector de construcción [1].
- La recapitulación del potencial uso del neuromejoramiento para el proceso de aprendizaje en tareas laborales [2].

- Registro de mediciones perceptivas, fisiológicas y ambientales en diversos momentos y actividades en entorno de trabajo relacionado con la construcción para determinar su impacto en el estrés [3].
- Resultados de evaluación de carga de trabajo de un grupo de controladores de tráfico aéreo para determinar umbrales de carga de trabajo más seguros [4].
- Conclusiones de estudio en estudiantes al realizar lectura de información en diseño de una o varias columnas, evaluando la carga cognitiva mediante encefalograma [5].
- Conclusión de que el estrés y la fatiga con principal causa de accidentes de drones derivada de la relación positiva entre la actividad cerebral (EEG), la actividad electrodérmica (EDA), temperatura de la piel (ST), electrocardiograma (ECG) y frecuencia cardíaca (FC), medida en contextos de vuelo real y en realidad virtual [6].
- Observación de cambios fisiológicos registrados por EEG para analizar diferencia entre estados de calma y ansiedad en la conducción mediante simuladores vs realidad de mujeres conductoras [7].

Stress. The International Journal on the Biology of Stress. Artículos revisados 11. Artículos de interés 2.

- Estudio seguimiento a 196 varones, examinados antes y después de trabajar en "Refugio (SO)" de la central nuclear de Chernobyl, con mapeo cerebral cuantitativo (qEEG) y otras baterías de pruebas [8].
- Estudio piloto que evalúa la mejoría del estrés postraumático con entrenamiento computarizado, realizando encefalogramas, antes y después [9].

Chronic Stress. Artículos revisados 472. Artículos de interés 3.

- Demostración y discusión sobre el uso del encefalograma (EEG) para propósito de evaluar y diseñar áreas de trabajo [10].
- Estudio en tele operadores mientras se registraba su electroencefalograma para diferencias las capacidades cognitivas espaciales entre dos grupos [11].
- Análisis de grupo de profesionales de la salud para reducir su estrés durante la pandemia de Covid-19 [12].

Journal of Thermal Stresses. Artículos revisados 18. Artículos de interés 3.

- Utilización de señales cerebrales para estudiar el estrés, aplicando técnicas de clasificación de los registros [13].
- Estudio concluyente que las actividades beta en las áreas frontal y temporal del Grupo Sin Estrés fueron significativamente mayores que Grupo Con estrés, usando electroencefalograma y electrocardiograma como instrumentos de medición [14].
- Estudio en voluntarios relacionados al trabajo en centrales nucleares referente a la aptitud para el trabajo con bioseñales respecto: consumo de alcohol, depresión, estrés, ansiedad y privación del sueño. Las bioseñales examinadas fueron: electroencefalograma (EEG), actividad eléctrica de los latidos del corazón medida por electrocardiograma (ECG), respuesta galvánica de la piel (GSR), pulso de volumen sanguíneo (BVP), cambios dinámicos en la presión arterial (BPHEG) y respiración [15].

Journal of Human Stress. Artículos revisados 195. Artículos de interés 4.

- Registro a 18 camioneros durante viaje de 500 km, concluyendo que el grupo nocturno mostró mayor somnolencia subjetiva, menor rendimiento subjetivo y mayor actividad de ráfagas alfa y theta durante las últimas tres horas del viaje [16].

- Incluyendo uso de simulador de conducción interactivo, los resultados que aporta son: existe mayor esfuerzo para percibir y procesar informaciones auditivas en rutas complejas, generando estrés y ansiedad [17].
- Cuasi-experimento a escala piloto de ocupantes de oficinas antes y después de ocupar sus nuevas oficinas, sugiriendo datos neurofisiológicos para describir los efectos de las características y posibilidades del diseño [18].
- Investigación a 10 pilotos para determinar variaciones encefalográficas relacionadas con privación de sueño, concluyen que la actividad theta y la delta aumentan, relacionando además el estado de ánimo con la fatiga por falta de sueño [19].

De un total de 10 repositorios revisados, 1,147 artículos identificados y 19 seleccionados por su relación con el tema. No se muestra detalle de 5 repositorios ya que no proporcionaron resultados relacionados con los términos de búsqueda o el enfoque no corresponde al tema de la investigación.

La **Tabla I**, contabiliza los registros por actividades laborales u oficios en lo que se realizó el estudio, de la misma forma, la Tabla II, contabiliza los estudios de acuerdo al objetivo y uso de los mismos.

Tabla I. Actividades laborales u oficios en los que se realizó el estudio.

Construcción	Controladores de tráfico aéreo	Controladores de drones	Conductores terrestres	Teleoperadores	Profesionales de la salud	Oficinistas	Pilotos de vuelo	Trabajadores de planta nuclear	Estudiantes	No específica	Ninguna
2	1	1	3	1	1	1	1	2	1	1	4

Tabla II. Objetivos o uso de los estudios.

Evaluar nivel de fatiga	Estudiar el nivel de estrés	Evaluar carga de trabajo cognitiva	Identificar disfunciones cognitivas por mapeo cerebral	Evaluar diseño del lugar de trabajo	Reducir el estrés	Evaluar la aptitud para el trabajo	Evaluar el rendimiento	Evaluar interpretación de indicaciones auditivas	Conocimiento sobre el tema
2	5	3	1	2	1	1	2	1	1

CONCLUSIONES

De la información presentada se concluye:

- Existe una amplia oportunidad de aplicar el registro de señales cerebrales por EEG para contextos laborales, particularmente seguridad y salud ocupacional, incluyendo a la ergonomía, ya que solo el 1.66% de los registros identificados en esta revisión literaria, poseen dicho enfoque; encontrando similitud en la conclusión derivada de la revisión literaria realizada por [10], donde señala que, en el 2019, identificó 28 estudios asociados al lugar de trabajo.
- Conducción de vehículos terrestres es la actividad sobre la que se ha realizado la mayoría de los estudios; mientras que el estrés es el factor de mayor interés a evaluar con el método de EEG.
- Además del equipo de EEG, algunos de los estudios hicieron uso de dispositivos de realidad virtual o simuladores durante el registro de bioseñales y sensores para registrar la actividad electrodérmica (EDA), la temperatura de la piel (ST), el electrocardiograma (ECG), la

frecuencia cardíaca (FC), el pulso de volumen sanguíneo (BVP), dispositivos para medir el cambio dinámico en la presión arterial BPHEG y la respiración.

- Las emociones humanas o el afecto como lo define [10], impactan el estrés en las personas según [3]; afirmación que coincide con [7], señalando la necesidad de que los estudios relacionados con el transporte apliquen enfoques con diversos estados emocionales.
- A partir de [10], se identifican cinco ritmos u ondas de frecuencia cerebrales distintas: Delta (~0-2 Hz), Theta (~3-7 Hz), Alpha (~8-12 Hz), Beta (~15-30 Hz) y Gamma (~30 Hz). -100 Hz) bandas, a estudiar para la evaluación del estrés.
- Al evaluar la carga mental [11], describe la ubicación de los electrodos en la cabeza de sujeto, utilizando 14 canales: región frontal (F3, Fz, F4), región frontal media (FC5, FC6), región central (C3, Cz, C4), región parietal (P3, Pz, P4) y región occipital (O1, Oz, O2).
- De las observaciones de [10]; [11]; [14]; [16] y [19], es posible resumir, en la **Tabla III**, algunos patrones de los ritmos cerebrales y su causa.

Tabla I. Compilación de diversos autores de patrones de registro y causas.

Patrón de registro	Causa
Cambio hacia Delta, Theta y Alfa	Fatiga con un mayor tiempo en la tarea.
Incremento en Beta	Fatiga con mayor tiempo en la tarea.
Incremento de potencia de Theta y Alpha	Fatiga mental y riesgo de error humano
Actividad en Theta de la línea media frontal	Asociada a tareas de control ejecutivo. Esfuerzo cognitivo
Actividad en las bandas Delta, Beta y Gamma	Sensibles a los cambios en la carga de trabajo mental
Incremento en Beta en las áreas frontal y temporal	Denotan resistencia al estrés, disminuyendo con el tiempo
Actividad en forma de ráfagas en Alfa y Theta	Menor rendimiento
Aumento en Theta y hasta cierto punto, en Delta	Como consecuencia de privación de sueño

La revisión literaria documentada parte de la búsqueda solo con los términos Estrés y Encefalograma (EEG), por lo que, de forma adicional, se ha también hecho la revisión bajo el termino salud laboral, no incluida en este artículo. Sin embargo, lo anteriormente expuesto, pone en evidencia que es viable y con expectativa de aportar valor, el diseñar un protocolo de medición de señales cerebrales utilizando el encefalograma como instrumento de registro de datos principal y a partir de la información obtenida, mejorar la seguridad, salud y eficiencia de los entornos de trabajo, agregando como diferenciador a lo ya hecho, la selección de una operación específica y la videograbación para identificar los momentos en la tarea que representan un factor estresante para el o los trabajadores, con el propósito de modificar o mejorar la tarea para comprobar que a partir de dicha mejora, los niveles de estrés se reducen.

REFERENCIAS

- [1] Tehrani, B. M., Wang, J., & Truax, D. (2022). Assessment of mental fatigue using electroencephalography (EEG) and virtual reality (VR) for construction fall hazard prevention. *Engineering, Construction and Architectural Management*, 29(9), 3593-3616.
- [2] Stikic, M., Berka, C., & Korszen, S. (2015). Neuroenhancement in Tasks, Roles, and Occupations. In *Organizational Neuroscience* (Vol. 7, pp. 169-186). Emerald Group Publishing Limited.
- [3] Newton, S. (2022). Measuring the perceptual, physiological and environmental factors that impact stress in the construction industry. *Construction Innovation, ahead-of-print*(ahead-of-print).

- [4] Zamarreño Suárez, M., Arnaldo Valdés, R. M., Pérez Moreno, F., Delgado-Aguilera Jurado, R., López de Frutos, P. M., & Gómez Comendador, V. F. (2022). How much workload is workload? A human neurophysiological and affective-cognitive performance measurement methodology for ATCOs. *Aircraft Engineering and Aerospace Technology*, 94(9), 1525-1536.
- [5] Al-Samarraie, H., Eldenfria, A., Zaqout, F., & Price, M. L. (2019). How reading in single- and multiple-column types influence our cognitive load: an EEG study. *The Electronic Library*, 37(4), 593-606.
- [6] Sakib, M. N., Chaspari, T., & Behzadan, A. H. (2022). A feedforward neural network for drone accident prediction from physiological signals. *Smart and Sustainable Built Environment*, 11(4), 1017-1041.
- [7] Wang, X., Guo, Y., Chen, C., Xia, Y., & Liu, Y. (2019). Analysis of female drivers' ECG characteristics within the context of connected vehicles. *Journal of Intelligent and Connected Vehicles*, 2(2), 55-66.
- [8] Loganovsky, K., Perchuk, I., & Marazziti, D. (2015). Workers on transformation of the shelter object of the Chernobyl nuclear power plant into an ecologically-safe system show qEEG abnormalities and cognitive dysfunctions: A follow-up study. *The World Journal of Biological Psychiatry*, 1-8.
- [9] Saunders, N., Downham, R., Turman, B., Kropotov, J., Clark, R., Yumash, R., & Szatmary, A. (2015). Working memory training with tDCS improves behavioral and neurophysiological symptoms in pilot group with post-traumatic stress disorder (PTSD) and with poor working memory. *Neurocase*, 21(3), 271-278.
- [10] Wascher, E., Reiser, J., Rinkeauer, G., Larrá, M., Dreger, F. A., Schneider, D., Karthaus, M., Getzmann, S., Gutberlet, M., & Arnau, S. (2023). Neuroergonomics on the Go: An Evaluation of the Potential of Mobile EEG for Workplace Assessment and Design. *Human Factors: The Journal of the Human Factors and Ergonomics Society*, 65(1), 86-106.
- [11] Shao, S., Zhou, Q., & Liu, Z. (2019). Mental workload characteristics of manipulator teleoperators with different spatial cognitive abilities. *International Journal of Advanced Robotic Systems*, 16(6), 172988141988804.
- [12] Ghosh, K., Nanda, S., Hurt, R. T., Schroeder, D. R., West, C. P., Fischer, K. M., Bauer, B. A., Fokken, S. C., Ganesh, R., Hanson, J. L., Lindeen, S. A., Pruthi, S., & Croghan, I. T. (2023). Mindfulness Using a Wearable Brain Sensing Device for Health Care Professionals During a Pandemic: A Pilot Program. *Journal of Primary Care & Community Health*, 14, 215013192311623.
- [13] Sharma, R., & Chopra, K. (2020). EEG signal analysis and detection of stress using classification techniques. *Journal of Information and Optimization Sciences*, 41(1), 229-238.
- [14] Hayashi, T., Okamoto, E., Nishimura, H., Mizuno-Matsumoto, Y., Ishii, R., & Ukai, S. (2009). Beta Activities in EEG Associated with Emotional Stress. *International Journal of Intelligent Computing in Medical Sciences & Image Processing*, 3(1), 57-68.
- [15] Suh, Y. A., & Yim, M.-S. (2020). A Worker's Fitness-for-Duty Status Identification Based on Biosignals to Reduce Human Error in Nuclear Power Plants. *Nuclear Technology*, 206(12), 1840-1860.
- [16] Kecklund, G., & Åkerstedt, T. (1993). Sleepiness in long distance truck driving: an ambulatory EEG study of night driving. *Ergonomics*, 36(9), 1007-1017.
- [17] Agrawal, S., Peeta, S., & Bedyk, I. (2022). Evaluating the cognitive and psychological effects of real-time auditory travel information on drivers using EEG. *Behaviour & Information Technology*, 1-23.
- [18] Bacevice, P. A., & Ducao, A. (2022). Use of biometric data and EEG to assess architectural quality of two office spaces: a pilot experiment. *Intelligent Buildings International*, 14(4), 433-454.
- [19] Caldwell, J. A., Hall, K. K., & Erickson, B. S. (2002). EEG Data Collected From Helicopter Pilots in Flight Are Sufficiently Sensitive to Detect Increased Fatigue From Sleep Deprivation. *The International Journal of Aviation Psychology*, 12(1), 19-32. https://doi.org/10.1207/S15327108IJAP1201_3

IMPLEMENTACIÓN DEL SISTEMA GLOBALMENTE ARMONIZADO PARA LA CLASIFICACIÓN Y ETIQUETADO DE PRODUCTOS QUÍMICOS EN UNA UNIVERSIDAD DEL NORESTE DE MÉXICO.

IMPLEMENTATION OF THE GLOBALLY HARMONIZED SYSTEM FOR THE CLASSIFICATION AND LABELLING OF CHEMICALS IN A HIGHER EDUCATION SCHOOL IN NORTHEASTERN MEXICO.

Guillermo Gibrán Pensado Montejo^{1*}, Aldo Isaac Ramírez Castillo¹, Carmen C. Carrillo Ibarra¹, Ricardo J. Lara Guerrero², Juan Manuel Hernández Ramos³, Ulrico J. López Chuken⁴

1 Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Medio Ambiente y Seguridad, San Nicolás de los Garza, N. L., México, C.P. 66455.

2 Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Almacén General de Reactivos, San Nicolás de los Garza, N. L., México, C.P. 66455.

3 Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Subdirección de Planeación y Operaciones, San Nicolás de los Garza, N. L., México, C.P. 66455.

4 Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Centro de Investigación en Biotecnología y Nanotecnología (CIByN), Apodaca, N. L., México, C.P. 66628.

*e-mail del autor de correspondencia: [gpsadom@uanl.edu.mx](mailto:gpensadom@uanl.edu.mx); guillermopensado21@gmail.com

RESUMEN. Se llevó a cabo un proyecto para la implementación de un sistema de clasificación y comunicación de peligros y riesgos por sustancias químicas (SQ) en la Facultad de Ciencias Químicas (FCQ) de la UANL, campus Cd. Universitaria, ubicada en San Nicolás de los Garza, N. L., México. Se tomó como base el Sistema Globalmente Armonizado de Clasificación y Etiquetado de Productos Químicos (SGA) de las Naciones Unidas (ONU), la Norma Oficial Mexicana NOM-018-STPS-2015 y la Norma Mexicana NMX-R-019-SCFI-2011. Este proyecto tuvo sus inicios en el año 2015 con la publicación de la NOM-018-STPS-2015 en el DOF, donde se requería el cumplimiento de esta norma para el mes de octubre de 2018. Se diseñó una estrategia para la implementación de dicho sistema, que incluyó una capacitación inicial para los encargados de las áreas que manejan productos químicos (laboratorios de servicio profesional, docencia e investigación, mantenimiento, intendencia, etc.); posteriormente se crearon formatos para los inventarios, etiquetas, hojas de datos de seguridad (HDS) y carteles informativos sobre los productos químicos, de acuerdo con los lineamientos del SGA y la NOM-018-STPS-2015. Se replicó la capacitación para todo el personal involucrado (jefes de laboratorio, personal técnico, administrativo, estudiantes auxiliares, etc.) en el manejo de SQ con el apoyo de la Dirección, el departamento de Medio Ambiente y Seguridad (DMAyS) y el Almacén General de Reactivos. Este proyecto presenta ventajas aportadas por el sistema en la clasificación y comunicación ágil y rápida de los peligros inherentes de cada SQ almacenada en la institución, como una herramienta para conservar la seguridad industrial del personal en el centro de trabajo.

Palabras clave: Sistema Globalmente Armonizado (SGA), sustancias químicas, etiquetado, clasificación, peligro.

ABSTRACT. A project was carried out for the implementation of a system of classification and communication of hazards and risks by chemicals (SQ) in the Faculty of Chemical Sciences (FCS) of the UANL, campus Cd. Universitaria, located in San Nicolás de los Garza, N. L., Mexico. The Global Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals (GHS) of the United Nations (UN), the Official Mexican Standard NOM-018-STPS-2015 and the Mexican Standard NMX-R-019-SCFI-2011 were based. This project began in 2015 with the publication of the NOM-018-STPS-2015 in the DOF, where compliance with this standard was required for the month of October 2018. A strategy was designed for the implementation of this system, which included

initial training for those in charge of the areas that handle chemicals (professional service laboratories, teaching and research, maintenance, administration, etc.); formats for inventories, labels, safety data sheets (HDS) and chemical information posters were subsequently developed in accordance with the guidelines of the SGA and the NOM-018-STPS-2015. The training was replicated for all the personnel involved (laboratory heads, technical, administrative, assistant students, etc.) in the management of SQ with the support of the Directorate, the Department of Environment and Safety (DMAyS) and the General Reactive Warehouse. This project presents advantages contributed by the system in the classification and agile and rapid communication of the inherent dangers of every SQ stored in the institution, like a tool to preserve the industrial safety of the personnel in the work center.

Keywords: *Globally Harmonized System (GHS), chemicals, labeling, classification, hazard.*

INTRODUCCIÓN

El empleo de productos químicos no se encuentra limitado a los procesos industriales, sino que forman parte esencial de nuestro día a día, mejoran la calidad de vida al tener beneficios claramente generalizados y reconocidos. Estos se requieren para la producción de alimentos, formulación de fármacos que curan y previenen enfermedades, fabricación de productos de limpieza y demás compuestos químicos indispensables para gozar de una vida saludable y cómoda en el mundo moderno en que nos encontramos [1]. Actualmente se cuenta con más de 274 millones de sustancias registradas en el CAS REGISTRYSM [2], el registro más importante a nivel mundial sobre productos químicos. Según reportes del año 2004 de la Organización Mundial de la Salud (OMS), el 8.3% (4.9 millones) de todas las muertes a nivel mundial fueron causadas por exposición directa o indirecta a sustancias químicas [3], para el 2015 se estimaron 13 millones de muertes por esta causa [4]. Con esto podemos entender la importancia del manejo de los productos químicos, y la necesidad de contar con sistemas de seguridad, control de riesgos, identificación y comunicación de peligros para la prevención de accidentes ocasionados por estos.

La primera revisión del SGA de Clasificación y Etiquetado de Productos Químicos fue adoptada en diciembre de 2002 y publicada en 2003 por las Naciones Unidas (ONU) [5], años durante los cuales la FCQ se encontraba en los inicios de la instauración del sistema de identificación de riesgos por SQP basado en los lineamientos de la NOM-018-STPS-2000, norma que tenía como modelo el Código NFPA 704, Sistema estándar para la identificación de peligros de materiales para respuesta a emergencias de la National Fire Protection Association (NFPA) de los EEUU [6]. Para el 9 de octubre de 2015 se publicó la Norma Oficial Mexicana NOM-018-STPS-2015, Sistema armonizado para la identificación y comunicación de peligros y riesgos por sustancias químicas peligrosas en los centros de trabajo [7], la cual entraba en vigor 3 años después (2018) y dejaba obsoleto el antiguo sistema del rombo de seguridad de la misma norma del año 2000.

El presente proyecto fue desarrollado en las instalaciones de la Facultad de Ciencias Químicas (FCQ) de la Universidad Autónoma de Nuevo León (UANL), Campus de Cd. Universitaria, el cual se encuentra ubicado en el municipio de San Nicolás de los Garza, Nuevo León, en los límites con el municipio de Monterrey. Se llevó a cabo la implementación de un sistema de identificación de peligros y riesgos por sustancias químicas que proporciona la información y herramientas necesarias, así como la capacitación y la concientización al usuario (alumno, profesor, personal técnico, etc.) de la institución, de tal manera que este pueda reconocer la naturaleza química del producto al cual se enfrenta, a fin de proteger su salud y el medio ambiente. Cumpliendo de esta manera con lo establecido en el postulado internacional del SGA que menciona la importancia de las Naciones Unidas en la armonización de sistemas de clasificación y etiquetado de productos químicos para favorecer el uso sin riesgos de estos [8].

El sistema fue denominado: “SISTEMA DE IDENTIFICACIÓN Y COMUNICACIÓN DE PELIGROS Y RIESGOS POR SUSTANCIAS QUÍMICAS”, con el cual se administra la clasificación y etiquetado de los más de 1000 productos químicos que se manejan, además de incluir el adiestramiento del personal y usuarios de las sustancias químicas peligrosas (SQP), los inventarios de cada almacén y las hojas de datos de seguridad (HDS). Todo lo anterior con base en lineamientos nacionales e internacionales para el manejo y control de SQP en los centros de trabajo.

METODOLOGÍA

Para el presente proyecto se emplearon los siguientes métodos:

1. Diseño de investigación documental, a través de la recopilación de información proporcionada (revisión documental y planeación) por:
 - Norma Oficial Mexicana NOM-018-STPS-2015 [7], Sistema armonizado para la identificación y comunicación de peligros y riesgos por sustancias químicas peligrosas en los centros de trabajo.
 - SISTEMA GLOBALMENTE ARMONIZADO (SGA) DE CLASIFICACIÓN Y ETIQUETADO DE PRODUCTOS QUÍMICOS [9].
 - Norma Mexicana NMX-R-019-SCFI-2011, SISTEMA ARMONIZADO DE CLASIFICACION Y COMUNICACION DE PELIGROS DE LOS PRODUCTOS QUIMICOS [10].
 - Listado de productos químicos de la FCQ.
 - HDS de los productos químicos de la FCQ.
2. Diseño de investigación experimental, a través de la aplicación de los requerimientos del SGA [9] y la NOM-018-STPS-2015 [7], principalmente:
 - Trabajo de campo en las instalaciones de la FCQ, específicamente en las áreas donde se almacenan los productos químicos.
 - Capacitación externa para el personal encargado de las áreas de almacenamiento de SQP.
 - Elaboración de formatos para la implementación.
 - Capacitación del personal operativo.
 - Recopilación de inventarios de SQP y HDS.
 - Elaboración de bases de datos y entrega de carpetas de las HDS.
 - Señalización o etiquetado de productos químicos.
 - Verificación del cumplimiento.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Se obtuvieron los resultados esperados para este proyecto de implementación del SGA [9] en la FCQ, campus Cd. Universitaria. En función de lo establecido en el SGA [9] propuesto por la ONU, y los requerimientos de la NOM-018-STPS-2015 [7], se logró obtener e implementar los elementos que conforman al sistema:

1. El listado actualizado de las SQP y mezclas.
2. Las HDS de las SQP y mezclas.
3. El número CAS para las SQP y mezclas.
4. La capacitación y adiestramiento.

A finales del año 2015 se inició con la revisión documental y la planificación de este proyecto, con la publicación de la NOM-018-STPS-2015 [7] el 9 de octubre de 2015 en el Diario Oficial de la Federación (DOF); se finalizó para el año 2018, con en la entrada en vigor de dicha norma, de

acuerdo a lo mencionado en su Transitorio Primero. En la **Figura 1** se puede observar el proceso de implementación en el tiempo, iniciando en el 2015 con la revisión documental (ver la METODOLOGÍA), durante la cual se planificó el trabajo que concluyó con la verificación del cumplimiento normativo del SGA [9] en la FCQ.

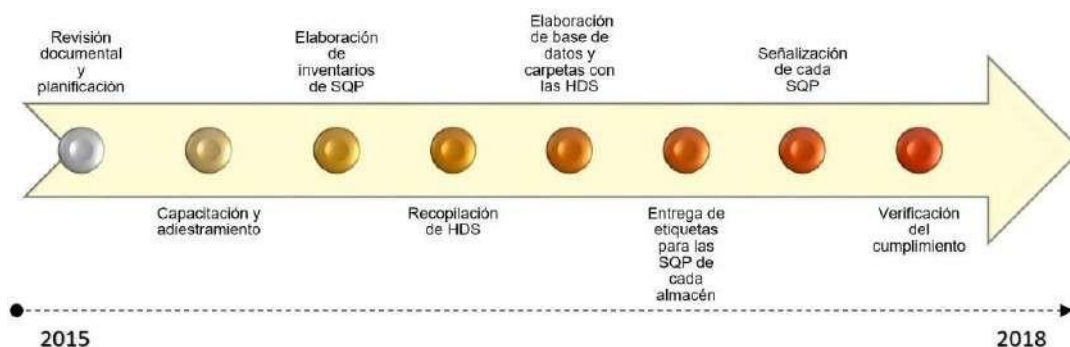


Figura 1. Proceso de implementación del SGA en la FCQ (campus Cd. Universitaria), UANL.

Como base primordial, en el mes de mayo de 2016, se llevó a cabo una capacitación inicial para los responsables de cada departamento y/o laboratorio por parte de expertos en la materia. Se cumplió con las expectativas, logrando capacitar más del 50% de los líderes de las áreas responsables del manejo y almacenamiento de SQP; como se puede visualizar en las gráficas de la **Figura 2**, 53% (17 jefes) del total (32) asistieron al adiestramiento, en contraste con el 31% (10 jefes) del total que no pudieron atender por diferentes motivos. Además de los laboratorios de servicio profesional, investigación y docencia, donde claramente se manejan SQ, se involucraron departamentos de apoyo como Intendencia y Mantenimiento, en los cuales se usan, en menor medida o de manera indirecta, productos químicos. Igualmente se convocaron a los representantes de Compras y Contraloría, quienes se encargan de la adquisición de las SQ; la Dirección y la Subdirección Administrativa, como cuerpo directivo de la FCQ; las Subdirecciones Académicas de las 4 carreras: Químico Farmacéutico Biólogo (QFB), Ingeniería Química (IQ), Licenciado Químico Industrial (LQI) e Ingeniero Industrial Administrador (IIA), como responsables de los cuerpos estudiantiles de la FCQ, y en general a todas las partes interesadas para lograr abarcar en su totalidad la población requerida para la capacitación.

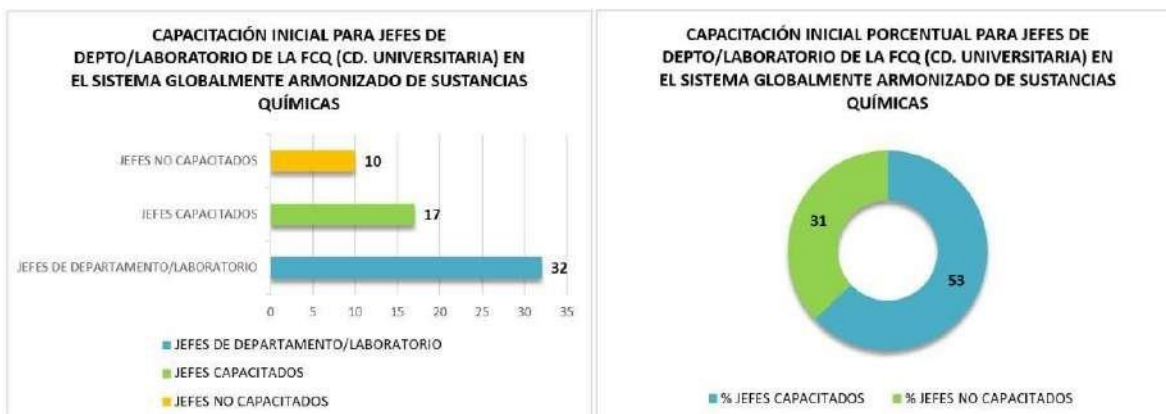


Figura 2. Gráficas de capacitación inicial de jefes de departamento/laboratorio de la FCQ (Cd. Universitaria) en el SGA de SQ.

Derivado del adiestramiento inicial, el departamento de Medio Ambiente y Seguridad (DMAyS) diseñó los formatos necesarios para el establecimiento del sistema: 1) Formato para el Inventario de Sustancias Químicas (**Figura 3**), 2) Etiqueta o señalización para los contenedores de las SQ, 3) Cartel informativo del SGA [9] (**Figura 4**) y 4) Carpetas para las HDS.

Sistema de Identificación y Comunicación de Peligros por Sustancias Químicas																		
INVENTARIO DE SUSTANCIAS QUÍMICAS																		
DEPARTAMENTO: _____					FECHA: _____													
RESPONSABLE: _____					ELABORÓ: _____													
No.	NOMBRE	CANTIDAD	Kg o L	No. CAS	PICTOGRAMAS										PALABRA DE ADVERTENCIA		ESTADO	
					Corrosión	Flamable	Explosivo	Presión	Corrosivo	T. Aguda	T. Crónica	Irregular	Atóxico	Sin símbolo	Peligro	Atención	Sólido	Líquido
1																		
2																		
3																		
4																		
5																		
6																		
7																		
8																		

Figura 3. Formato para el inventario de sustancias químicas del Sistema de Identificación y Comunicación de Peligros por Sustancias Químicas de la FCQ, UANL.

Para el segundo semestre de 2016 se continuaron con capacitaciones internas, con las cuales se pudo alcanzar a todos los jefes y, a su vez, al personal técnico, de apoyo y estudiantes (de posgrado, auxiliares becarios, prácticas profesionales y servicio social), logrando de esta manera abarcar al personal en todos los niveles. Este proceso de capacitación se continuo de manera obligatoria cada semestre para el personal faltante o de nuevo ingreso.



Figura 4. Etiqueta o señalización para los productos químicos (izquierda) y cartel informativo (derecha) con el SISTEMA DE IDENTIFICACIÓN Y COMUNICACIÓN DE PELIGROS POR SUSTANCIAS QUÍMICAS de la FCQ.

En comparación con el sistema anterior (basado en la NOM-018-STPS-2000) [6], el nuevo SGA de la ONU [9] y la NOM-018-STPS-2015 [7], presenta ventajas que mejoran la comunicación de las características de cada SQ:

1. Se trata de un sistema universal, que se aplica en todos los países miembros de la ONU.
2. La señalización o etiqueta presenta las características intrínsecas de los peligros de cada SQ, a diferencia del antiguo sistema que estaba basado en los riesgos.
3. La información del etiquetado permite una mayor concientización sobre el uso del producto, al hacer visible los peligros.

4. Ante una situación de emergencia, se pueden tomar decisiones más acertadas con base en la peligrosidad de cada SQ.
5. Presenta un sistema de fácil comprensión.
6. Es un sistema que invita al usuario a consultar la HDS, fomentando una cultura de compromiso y responsabilidad.

CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos demuestran las ventajas de la implementación adecuada de SGA [9], mismos que se pudieron corroborar al realizar la verificación del cumplimiento con base en las normas descritas en el proyecto. Se requiere del compromiso de la alta dirección y de los encargados de cada área para que el sistema pueda llevarse a cabo, madurar y mantenerse; la capacitación continua es la parte medular que permite el mantenimiento constante de todos los elementos propios del SGA [9], para que todos los usuarios de los productos químicos se mantengan informados y que la clasificación, identificación y comunicación de los peligros y riesgos de cada SQ pueda lograrse en cada área donde se almacene, maneje o transporte.

REFERENCIAS

[1] Organización Internacional del Trabajo [OIT] (abril 2014), LA SEGURIDAD Y LA SALUD EN EL USO DE PRODUCTOS QUÍMICOS EN EL TRABAJO. Día Mundial de la Seguridad y Salud en el Trabajo (SafeDay), Génova, Italia: OIT. Recuperado de https://www.ilo.org/wcmsp5/groups/public/@ed_protect/@protrav/@safework/documents/publication/wcms_235105.pdf

[2] Chemical Abstract Service [CAS] (enero 2023), BASES DE DATOS DE CAS, Columbus, Ohio: American Chemical Society [ACS]. Recuperado de <https://www.cas.org/es-es/support/documentation/cas-databases>

[3] Mendoza-Cantú A., Ize-Lema I. LAS SUSTANCIAS QUÍMICAS EN MÉXICO. PERSPECTIVAS PARA UN MANEJO ADECUADO. Revista internacional de contaminación ambiental 2017; 33: 719-745.

[4] United Nations [UN] (mayo 2015), Exposure to toxic substances causes 13 million deaths a year, says expert, New York: UN. Recuperado de <https://news.un.org/es/story/2015/05/1330541>

[5] United Nations Economic Commission for Europe [UNECE] (2003), Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals (GHS 1st edition), Ginebra, UN. Recuperado de <https://unece.org/ghs-1st-edition-2003>

[6] Secretaría del Trabajo y Previsión Social [STPS] (marzo 2000), NORMA Oficial Mexicana NOM-018-STPS-2000, Sistema para la identificación y comunicación de peligros y riesgos por sustancias químicas peligrosas en los centros de trabajo, Ciudad de México, Distrito Federal: STPS. Recuperado de https://www.dof.gob.mx/nota_detalle.php?codigo=2062745&fecha=31/12/1969#gsc.tab=0

[7] Secretaría del Trabajo y Previsión Social [STPS] (octubre 2015), NORMA Oficial Mexicana NOM-018-STPS-2015, Sistema armonizado para la identificación y comunicación de peligros y riesgos por sustancias químicas peligrosas en los centros de trabajo, México, Distrito Federal: STPS. Recuperado de https://www.dof.gob.mx/nota_detalle.php?codigo=5411121&fecha=09/10/2015#gsc.tab=0

[8] United Nations [UN] (junio 1992), Conferencia de las Naciones Unidas sobre el Medio Ambiente y el Desarrollo [CNUMAD], Río de Janeiro, Brasil: UN. Recuperado de <https://www.un.org/spanish/esa/sustdev/agenda21/agenda21spchapter19.htm>

[9] United Nations Economic Commission for Europe [UNECE] (julio 2023), Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals (GHS 10^a edition), Ginebra, UN. Recuperado de <https://unece.org/sites/default/files/2023-07/GHS%20Rev10e.pdf>

[10] Secretaría de Economía [SE] (junio 2011), NORMA Mexicana NMX-R-019-SCFI-2011, Sistema armonizado de clasificación y comunicación de peligros de los productos químicos, México, Distrito Federal: SE. Recuperado de https://dof.gob.mx/nota_detalle.php?codigo=5193142&fecha=03/06/2011#gsc.tab=0



VII CONGRESO INTERNACIONAL DE
QUÍMICA E INGENIERÍA VERDE

EJE TEMÁTICO 9

INGENIERÍA, MANUFACTURA Y CADENA DE SUMINISTRO



Impacto del Liderazgo de la Alta Dirección en la Implementación de un Sistema de Gestión en Empresas de Autopartes de Nuevo León

Impact of Leadership of High Offices in the Implementation of a System of Management in Auto Parts Companies

**Juan Manuel Hernández R.^{1*}, Carolina, Solís P.^{1*} Jorge Gilberto Pérez B.^{1*}
Iván Guillermo González P.^{1*} Jonathan Cuellar C.^{1*}**

¹Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Av. Universidad S/N, Cd. Universitaria, CP.66455, San Nicolás de los Garza, Nuevo León. México.

juan.hernandezr@uanl.edu.mx, carolina.solispa@uanl.edu.mx
jorge.perezbr@uanl.edu.mx ivan.gonzalezpl@uanl.edu.mx
jhonathan.cuellarcls@uanl.edu.mx

RESUMEN. Al implementar un sistema de gestión en las organizaciones, el liderazgo de la alta gerencia tiene un papel en la respuesta de los empleados. El objetivo es conocer la magnitud del impacto y de qué manera afecta a los subordinados el involucramiento de la alta dirección en su implementación en las organizaciones que residen en Nuevo León, México y se dedican al giro de las autopartes. La investigación se llevó a cabo mediante un cuestionario que fue aplicado 60 personas; las respuestas recibidas muestran que el liderazgo si tiene un alto impacto en los subordinados desde plan de comunicación que se utiliza para implementar el sistema de gestión, hasta la inspección que realiza la alta dirección al plan estratégico, de desarrollo y la respuesta interna de implementación.

Palabras clave: Alta dirección/ Sistema de gestión/ Empresa de Autopartes/ Subordinados

ABSTRACT. When implementing a management system on an organization, the senior management leadership has a big role in the employee's response. The goal is to know the magnitude of the impact and which way the involvement of senior management in its implementation affects the workers in organizations that reside in Nuevo León, México and are dedicated to auto parts. This investigation was carried out through a questionnaire that was applied to 60 people; the received answers shows that the leadership has a significant impact in the subordinates, from the communication plan, that is used to implement the management system, to the strategic and development planning inspection that is done by the senior management and the intern response of the implementation.

Key words: Senior Management/ Management system/ Auto parts organization/
Subordinates

INTRODUCCIÓN

El presente proyecto tiene como objetivo determinar cuál es el impacto que posee la alta dirección al momento de implementar un sistema de gestión dentro de una organización perteneciente a la industria de autopartes en Nuevo León, dicha participación puede ser directa o indirecta mediante diversas actividades que realiza la alta gerencia, como es el caso de comunicar las políticas y objetivos o mantener una buena relación con los proveedores de la empresa. Es de suma importancia determinar dichos efectos ya que con ello podremos desarrollar una guía con aquellas prácticas que permitan una implementación exitosa. En la actualidad el contar con un sistema de gestión representa una oportunidad para todas aquellas empresas que deseen sobresalir en el mercado competitivo debido a que estos sistemas permiten a la organización disminuir los errores, aumentar la eficiencia de los procesos, mejorar la calidad de sus productos, y, en consecuencia, aumentar la satisfacción de sus clientes.

Al momento de implementar nuevos sistemas de trabajo la intervención de la alta gerencia resulta ser esencial en todos los pasos de dicho proceso desde el planteamiento de los nuevos procedimientos hasta la culminación del proyecto, en la presente investigación se brindará un análisis para determinar cuál es el impacto de dicha participación, para ello se presentará en primera instancia una descripción de los antecedentes del tema, en segundo lugar, un análisis realizado por medio de una encuesta estructurada utilizando la Escala de Likert a diversas empresas certificadas en algún sistema de gestión y finalmente se compartirán los resultados, conclusiones y hallazgos importantes con respecto a dicho estudio.

MARCO TEÓRICO

La industria automotriz es un pilar estratégico tanto en México como a nivel mundial, generando múltiples empleos y contribuyendo a la economía. En México, el sector emplea a más de 960 mil personas, con más de 100 mil empleos en la industria automotriz terminal y más de 860 mil en el sector de autopartes, carrocerías y remolques. Esto beneficia directamente a más de 3.5 millones de mexicanos. Según las proyecciones de la INA (Industria Nacional de Autopartes), se espera un crecimiento continuo en los próximos dos años, superando los 102,226 millones de dólares en 2022 y alcanzando los 103,151 millones de dólares en 2023. Esto se debe en parte a los beneficios del Tratado de Libre Comercio entre México, Estados Unidos y Canadá (T-MEC), que impulsa las exportaciones en el sector, lo que representará un crecimiento del 1.18%, en comparación con el cierre del presente año, esto impulsará exportaciones con los beneficios que ha generado el Tratado de Libre Comercio entre México, Estados Unidos y Canadá (T-MEC). Nuevo León ha sido considerado importante como centro de negocios para todas las industrias. Sin embargo, para la industria automotriz y de autopartes es de gran relevancia, por estar cerca de la línea fronteriza con Estados Unidos, la moderna infraestructura que posee el Estado con respecto los demás, los centros económicos, etc. Todos estos factores proporcionan una base para un crecimiento estable [7]. La industria de autopartes es una de las destacadas para Nuevo León, lo que lo ubica en la tercera en producción dentro de este segmento. En la entidad se produjo el 11.2 por ciento del total de la producción en México, solo por debajo de Coahuila que registró 16.9 y Chihuahua, con 12.3 por ciento [5].

La implementación de un sistema de gestión es fundamental, ya que establece políticas y objetivos para dirigir y controlar la organización, con el objetivo de lograr metas establecidas (ISO 9000:2005). Al implementar un sistema de gestión de calidad automotriz, se asegura el cumplimiento de las especificaciones técnicas. De acuerdo con la Organización Internacional de Fabricantes de Automóviles (OICA por sus siglas en inglés), México se posiciona como el octavo productor mundial de automóviles, lo cual resalta la importancia de adoptar sistemas de gestión de calidad en el sector. La especificación ISO/TS 16949 unifica y reemplaza las normas de calidad automotriz de diferentes países. Los beneficios de implementar este sistema son evidentes, como la mejora en la calidad del producto y proceso, confianza global en los

procesos de compra y liberación de recursos para otras actividades de calidad. La industria automotriz cuenta con una norma propia de certificación de sistemas de gestión de calidad, diseñada específicamente para fabricantes de automóviles. Implementar la especificación ISO/TS 16949 es una decisión acertada para satisfacer las expectativas y requerimientos de los clientes en cuanto a calidad [6]. La gestión humana es vital para el desarrollo de los empleados. Si se considera al capital humano como un centro de costos en lugar de una inversión, se pierde la humanización de los empleados y la motivación por parte de la alta gerencia. Esto puede llevar a una cultura organizacional que no busca el bienestar de los empleados, sino que los ve como máquinas cuyo único propósito es alcanzar objetivos sin considerar las razones, los métodos y el potencial de aportar más.

El líder debe motivar y adaptarse a las necesidades del equipo y la situación actual [9]. Existen diferentes tipos de liderazgo, como el transformacional, que inspira a los seguidores a alcanzar metas más altas; el transaccional, que se enfoca en recompensas y estructuras; y la teoría de Camino-Meta, donde el líder motiva a los colaboradores para lograr metas personales y organizacionales. El estilo de liderazgo influye en el clima organizacional, la motivación y el desempeño de los subordinados. La alta gerencia desempeña un papel fundamental en esta tarea, y su responsabilidad va más allá de tomar decisiones. De acuerdo con la Norma ISO 9001, la alta dirección debe mostrar liderazgo y compromiso con el sistema de gestión de calidad. Esto implica asumir la responsabilidad de su eficacia, establecer la política de calidad y los objetivos, promover el enfoque a procesos, asegurar la disponibilidad de recursos y comunicar la importancia de una gestión de calidad efectiva [3].

La alta dirección desempeña diversas tareas en la implementación de un sistema de gestión de calidad. En primer lugar, deben adoptar un enfoque centrado en el cliente, comprendiendo sus necesidades y generando políticas y objetivos medibles y realistas. En segundo lugar, se requiere el entrenamiento y capacitación de los empleados en nuevas habilidades. En tercer lugar, se debe establecer y mantener relaciones con proveedores que cumplan con los estándares de la empresa. Por último, se debe trabajar en un sistema de comunicación efectivo para compartir información relacionada con el proyecto. Es crucial lograr la participación de la alta dirección, ya que esto ayuda a crear una cultura de calidad en la organización [1]. La implementación de un nuevo sistema implica cambios internos que deben administrarse adecuadamente para obtener los resultados esperados.

DESCRIPCIÓN DE PROBLEMA Y OBJETIVOS

La correcta implementación de un sistema de calidad es de suma importancia, pues facilita la revisión de los procesos, productos y servicios con el fin de identificar cómo pueden optimizarse, mantener la satisfacción de clientes, proveedores y personal, y cumplir los requisitos legales ante las autoridades.

En la implantación de un sistema de calidad, pueden surgir obstáculos tanto internos como externos. Uno de los principales factores que contribuyen al fracaso es la falta de liderazgo dentro de la organización. Se ha demostrado que el involucramiento activo de la alta dirección es crucial, ya que, sin un liderazgo sólido, el control de calidad será menos efectivo. Aunque una empresa pueda contar con empleados competentes, se necesita un liderazgo efectivo para lograr el éxito organizacional. Con esta investigación buscamos esclarecer la importancia que tiene el que la alta dirección se involucre en este proceso, a través del recatamiento de opiniones de la sociedad y así llegar a la conclusión de que tan necesario se considera el liderazgo a lo largo de este proceso en cualquier empresa; haciendo notar que es un tema que merece la misma atención que los resultados deseados.

METODOLOGÍA Y EXPERIMENTACIÓN

La presente investigación busca determinar el impacto que generan las actividades de la alta

dirección al implementar un sistema de gestión en empresas de autopartes en Nuevo León, esto representa nuestro sujeto de estudio. De acuerdo con el INEGI [2] se obtuvo una población de 71 empresas manufactureras, con más de 250 empleados, dedicadas a las actividades mostradas en la **Tabla I**.

Tabla I. Clase de actividades

CLASE DE LA ACTIVIDAD	CÓDIGO DE ACTIVIDAD
Fabricación de asientos y accesorios interiores para vehículos automotores	336360
Fabricación de autopartes de plástico con y sin reforzamiento	326192
Fabricación de equipo eléctrico y electrónico y sus partes para vehículos automotores	336320
Fabricación de motores de gasolina y sus partes para vehículos automotrices	336310
Fabricación de otras partes para vehículos automotrices	336390
Fabricación de partes de sistemas de dirección y de suspensión para vehículos automotrices	336330
Fabricación de partes de sistemas de frenos para vehículos automotrices	336340
Fabricación de partes de sistemas de transmisión para vehículos automotores	336350
Fabricación de piezas metálicas troqueladas para vehículos automotrices	336370

El tamaño de la muestra que se estudiaría, tomando un valor de Z de 1.96, es decir un nivel de confianza del 95%, con margen de error del 5%, es de 60 encuestas a aplicar. Posteriormente, se procedió con la aplicación de encuestas basado en la técnica de evaluación de escala de Likert del 1-5 para llevar a cabo el análisis de las actividades por parte de la alta gerencia que las personas consideraban que impactaron más al momento de implementar un sistema de gestión, manejando la escala mostrada en la **Tabla II**.

Tabla II. Escala

FACTOR	DEFINICIÓN	PUNTAJE
Muy positivo	Es esencial para lograr la exitosa implementación del sistema	5
Positivo	Ayudará en cierta forma a la implementación del sistema	4
Neutral	No considero que afecte o ayude a la implementación del nuevo sistema	3
Negativo	Afectará o entorpecerá la implementación del nuevo sistema	2
Muy negativo	No permitirá la implementación del nuevo sistema	1

Después, se procedió a aplicar las encuestas a personas laborando en empresas del ramo que se está estudiando para determinar cuáles eran los factores más influyentes en este proceso de implementación. Al obtener los resultados se procedió a analizarlos mediante un análisis estadístico comparativo.

RESULTADOS

- Información sobre los encuestado

Como se observa en los siguientes gráficos, se encuestó a 60 personas dentro del Área Metropolitana de Monterrey. En cuanto al género con el que se identificaban, se obtuvo que el 49% de los encuestados eran hombres, el 43% mujeres, mientras que el 8% se identificaba con otro diferente. A su vez las edades de los encuestados oscilan entre los 18-25 años en su mayoría con un 41% del total, seguidos de 26-32 años con un 36% y 32-40 años con un 20%, lo cual nos indica que, en su mayoría, los encuestados se encuentran en edad para laborar dentro de una organización.



Figura 1. Género de los encuestados

Figura 2. Rango de edad de encuestados

Con la fabricación de otras partes para vehículos automotrices, seguidos de la fabricación de equipo respecto a la actividad comercial que realizaban las empresas en las que estos laboraban, podemos destacar que un 59% de los encuestados trabajaban en empresas orientadas a lo eléctrico y electrónico además de partes para vehículos automotores con un 15%.



Figura 3. Género de los encuestados

- Impacto de la alta gerencia en la implementación de un sistema de gestión

Para un mejor análisis se decidió estudiar diversas actividades que la alta gerencia realiza durante la implementación de un sistema de gestión, con la finalidad de que los encuestados determinaran que tanto impacto estas actividades generaban y a su vez si este era positivo o negativo. Al finalizar con la encuesta se pudieron obtener los resultados mostrados en la **Tabla IV**.

Tabla III. Participación de la alta gerencia en un sistema de gestión (Actividades)

PRACTICAS DE LA ALTA GERENCIA
A01: Entrenamiento y capacitación de los empleados
A02: Formulación de una nueva política y objetivos en el sistema de trabajo. (Ejemplos: de calidad o ambientales)
A03: Establecimiento de altos estándares para los proveedores de la organización
A04: Inspección directa de los gerentes para verificar los empleados si realizan su trabajo
A05: Enviar un mensaje contundente a la Organización sobre la necesidad de cambio y adaptación al nuevo sistema de gestión.
A06: Diseño de instrumentos con un lenguaje claro, fácil de entender que expliquen paso a paso la estandarización de los procesos (ej. Mapa de procesos, fichas de caracterización, diagrama de flujo)
A07: Organización e implementación de equipos con participación de colaboradores de diferentes áreas.
A08: Una gran estrategia dentro de la implementación será llevar registro de control de cambios para documentar todos los cambios, los costos y recursos asociados y el impacto en el proyecto

Tabla IV. Actividades y control del impacto generado

FACTOR	A01	A02	A03	A04	A05	A06	A07	A08
Muy positivo	32	17	18	13	18	37	21	35
Positivo	24	29	28	24	36	20	21	22
Neutral	4	13	7	14	7	4	9	4
Negativo	1	2	8	6	0	0	7	0
Muy negativo	0	0	0	4	0	0	3	0
Suma	61	61	61	61	61	61	61	61

En el gráfico 4, se puede observar que las prácticas de la alta gerencia resultantes de la experimentación de esta investigación, las cuales tienen un mayor impacto al implementar un sistema de gestión de calidad son el diseño de instrumentos con un lenguaje claro, fácil de entender que expliquen paso a paso la estandarización de los procesos; el registro de control de cambios para documentar todos los cambios, costo y recursos asociados con el impacto del proyecto; el entrenamiento y capacitación de los empleados y la inspección directa de los gerentes para verificar el trabajo de los empleados.

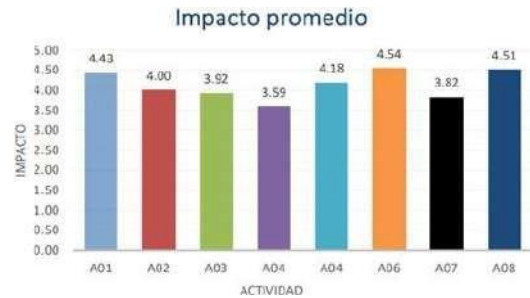


Figura IV. Impacto promedio de las prácticas de alta gerencia

A continuación, se muestran los resultados figuras de la **Tabla IV. Actividades y control del impacto generado.**



Gráfica 5. Impacto del entrenamiento y capacitación de los empleados en las prácticas de la alta gerencia al implementar un sistema de gestión de calidad



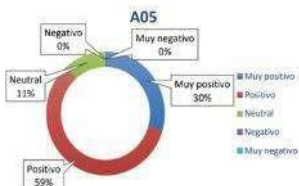
Gráfica 6. Impacto de la formulación de una nueva política y objetivos en sistema de trabajo en las prácticas de la alta gerencia al implementar un sistema de gestión de calidad



Gráfica 7. Impacto del establecimiento de los altos estándares para los proveedores de la organización en las prácticas de la alta gerencia al implementar un sistema de gestión de calidad



Gráfica 8. Impacto de la inspección directa de los gerentes para verificar el trabajo de los empleados al implementar un sistema de gestión de calidad



Gráfica 9. Impacto de enviar un mensaje contundente a la organización sobre la necesidad de cambio y adaptación a un nuevo sistema de gestión en las prácticas de la alta gerencia



Gráfica 10. Impacto del diseño de instrumentos con un lenguaje claro, fácil de entender la estandarización de los empleados en las prácticas de la alta gerencia al implementar un sistema de gestión de calidad



Gráfica 11. Impacto de la gestión e implementación de equipo con participación de diferentes áreas en las prácticas de la alta gerencia al implementar un sistema de gestión de calidad



Gráfica 12. Impacto de una estrategia de control de cambio de costos y recursos asociados para documentarlos al implementar un sistema de gestión de calidad

Los entrevistados evaluaron el impacto de las actividades de la alta gerencia en la implementación de un sistema de gestión utilizando una escala establecida. Según la Gráfica 5, el entrenamiento y capacitación de los empleados fue considerado muy positivo y positivo por el 91% de los encuestados, lo que permite estandarizar el trabajo y brindar orientación al personal. En la Gráfica 6, la implementación de nuevas políticas y objetivos se consideró en su mayoría positiva, aunque también se catalogó como neutral. En la Gráfica 7, se encontró que el control de calidad de los proveedores fue considerado positivo, neutral e incluso negativo, ya que establecer altos estándares puede dificultar la selección de proveedores. En la Gráfica 8, la inspección directa de los gerentes para verificar el trabajo de los empleados fue considerada en su mayoría positiva, aunque un 33% de los

encuestados la consideró neutral o incluso negativa. Esto puede atribuirse a la percepción de que la participación excesiva de la gerencia puede ser contraproducente, ya que se debe permitir a los empleados realizar sus actividades de manera independiente para que se sientan parte de la empresa. En la gráfica 9 y la gráfica 10 se ve que el enviar un mensaje sobre la necesidad del cambio y el diseño de instrumentos de lenguaje claro y fácil de entender para estandarizar resultaron ser positivos al implementar estos sistemas, a su vez en la gráfica 12 se puede ver que la documentación es otra actividad esencial, ya que permite no solo obtener buenos resultados, sino que sirve como método de consulta.

CONCLUSIÓN

El proceso de gestión de calidad es una parte integral de cada organización centrada en una mejor productividad, calidad y un menor costo de producción. Los datos recabados respaldan la idea que, dentro de la gestión de calidad, un buen liderazgo es esencial con el fin de mejorar la calidad en la organización, como la fuerza encargada de establecer objetivos y ayudar a los empleados para implementar los mismos. Sin un liderazgo sólido, el proceso de control de calidad probablemente sería menos efectivo. Las prácticas de la alta dirección que tienen un mayor impacto positivo en el proceso incluyen: diseñar formatos claros y detallados para los procesos (59% de impacto positivo), registrar y controlar los cambios a lo largo de la implementación (57% de impacto muy positivo), coordinar un entrenamiento completo para los empleados y comunicar los resultados esperados (52% de impacto muy positivo), y llevar a cabo inspecciones directas de los gerentes de manera guiada y de retroalimentación (39% de impacto positivo).

En conclusión, un buen liderazgo garantiza el bienestar de la empresa, sus clientes y empleados. Es responsabilidad de la dirección mantener un sistema de gestión de calidad y desarrollarlo estratégicamente, alineándolo con el propósito, valores, misión, ética y objetivos de la empresa. La función de modelo a seguir de los gerentes es crucial para el éxito. En futuras investigaciones, se recomienda considerar aspectos como el sector industrial, tamaño de la empresa, entorno y cultura. Además, es útil incluir conceptos relacionados con el liderazgo, como colaboración, comportamiento, capacitación, carácter y capacidad del personal, entre otros.

REFERENCIAS

Comunicaciones congresos

[1] Budayán, C., & Okudan, O. (Diciembre de 2020). Roadmap for the implementation of total quality management (TQM) in ISO 9001-certified construction companies: Evidence from Turkey.

Página de internet

[2] INEGI. (2022). *Directorio Estadístico Nacional de Unidades Económicas*. Obtenido de <https://www.inegi.org.mx/app/mapa/denue/Default.aspx?idee=8788497>

Investigación

[3] ISO. (2015). ISO 9001 Sistemas de gestión de la calidad - Requisitos.

Capítulo de libro

[4] J, D. K. (2003). *Comportamiento humano en el trabajo*. México: McGraw-Hill.

[5] Montoya, M. (2022). *Nuevo León, tercer fabricante de autopartes*. Monterrey.

Página de internet

[6] Quality, Q. (2022). *Gestión de Calidad en la Industria Automotriz ISO/TS 16949*. Obtenido de <https://www.qcaquality.com.ar/gestion-de-calidad-en-la-industria-automotriz.html>

Artículo en revista

[7] Ramirez, G. (1994). *La Industria Automotriz y de Autopartes en Nuevo León*. Monterrey.

Página de internet

[8] *Ventajas de implementar un sistema de gestión de calidad.* (Mayo de 2022). Obtenido de American Express: <https://www.americanexpress.com/es-mx/negocios/trends-and-insights/articles/beneficios-de-implementar-un-sistema-de-gestion-de-calidad/#:~:text=Implementar%20un%20sistema%20de%20gesti%C3%B3n%20de%20calidad%20en%20una%20Empresa,de%20trabajo%20en%20mejora%2>

Artículo en revista

[9] Willman, C., Velasco, I., & Arango, M. (2011). *Relación en las percepciones del estilo de liderazgo del jefe inmediato con el desempeño laboral de los estudiantes en práctica de la universidad*

MODELO PARA MEDIR EL NIVEL DE SERVICIO PERCIBIDO POR ALUMNOS DE EDUCACIÓN SUPERIOR

MODEL TO MEASURE THE LEVEL OF SERVICE PERCEIVED BY HIGHER EDUCATION STUDENTS

Carolina Solís Peña^{1*}, Iván Guillermo González Palomo¹, Azucena Minerva García León¹

¹Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Departamento de Ingeniería Industrial y Administración, Av. Universidad S/N, Cd. Universitaria, C.P. 66455, San Nicolás de los Garza, Nuevo León, México

*carolina.solispa@uanl.edu.mx, ivan.gonzalezpl@uanl.edu.mx, azucena.garcialn@uanl.edu.mx

RESUMEN. En los últimos años el brindar un nivel de servicio de calidad al cliente es vital para crear un vínculo de lealtad y confianza. Actualmente, el ser amable y cordial no es suficiente, se deben de comprender las necesidades y expectativas de los clientes. El servicio al cliente es el conjunto de estrategias que una compañía diseña para satisfacer las necesidades y expectativas de sus clientes y de esta manera ser mejor que sus competidores. En esta investigación se consideró medir el impacto de la confiabilidad, capacidad de respuesta, así como de los aspectos tangibles que se encuentran en la prestación del servicio. La medición se llevó a cabo mediante la aplicación de un instrumento de medición "una encuesta", a todo aquel que realizara un trámite en la institución, en total se obtuvieron 209 encuestas aplicadas, teniendo como resultado final un modelo en que se muestra que la confiabilidad y la capacidad de respuesta son las variables que realmente le interesan al cliente, por lo cual se da una serie de recomendaciones enfocadas a la mejora de estas variables.

Palabras clave: Nivel de servicio, Servicio al cliente, Percepción.

ABSTRACT. In recent years, providing quality customer service is vital to create a bond of loyalty and trust. Nowadays, being friendly and cordial is not enough, it is necessary to understand the needs and expectations of customers. The customer service is the set of strategies that a company designs to satisfy the needs and expectations of its customers and thus be better than its competitors. In this research, we considered measuring the impact of reliability, responsiveness and tangible aspects of service delivery. The measurement was carried out through the application of a measurement instrument, a survey, to all those who carried out a procedure in the institution, in total 209 surveys were applied, with the final result that reliability and responsiveness are the variables that really interest the customer, so a series of recommendations focused on the improvement of these variables are given.

Key words: Service level, Customer service, Perception.

INTRODUCCIÓN

De acuerdo con Restrepo *et al.* [1], el servicio al cliente es el conjunto de estrategias que una compañía diseña para satisfacer las necesidades de sus clientes. La mayoría de las compañías que son proveedoras de productos o servicios, buscan que lo que ellos ofrecen sobrepasen las expectativas que se tiene de ellos. Por otro lado, se tiene el concepto de satisfacción, el cual hace referencia al valor agregado que ofrecen las compañías proveedoras de un servicio, autores como Moreno y Moreno [2], indican que este valor agregado va más allá de la amabilidad y gentileza.

Pizam y Ellis [3], en su investigación determinan la calidad de un producto o servicio es con base al cumplimiento de lo establecido en las licitaciones celebradas.

De acuerdo a investigaciones desarrolladas se ha identificado que los principales factores que tienen un impacto en el servicio del cliente son: la actitud del servicio, la eficiencia, la proactividad, confiabilidad, responsabilidad, la innovación en sus servicios, los aspectos tangibles, la conciencia del tiempo, empatía, reputación y la competencia del personal.

En la Tabla 1 se puede observar la definición del concepto de cada una de las variables mencionadas.

Tabla 1. Consolidación de definiciones involucradas en la investigación.

Factores	Definición	Autores
Actitud de Servicio	Disposición de quienes atienden a los usuarios para escuchar y resolver el problema presentado.	[4] (Mejía, 2009)
Confiabilidad	Confianza generada por la prestación de servicios que una empresa realiza ante sus clientes. Este factor genera una lealtad y fidelidad al servicio.	[5] (Ventura, 2018)
Responsabilidad	Es el deseo y la disposición mostradas por el cliente para ayudarles.	[6] (Ibarra y Casas, 2015)
Innovación	Mejora continua del servicio.	[5] (Ventura, 2018)
Tangible	Hace referencia a la apariencia de las instalaciones de la organización, así como del personal.	[7] (Botero y Peña, 2006)
Empatía	Incluye la facilidad de contacto, un buen nivel de comunicación de parte de la empresa y la identificación de las necesidades.	[7] (Botero y Peña, 2006)
Competencia del personal	La capacidad del prestador de servicio en solucionar las necesidades del cliente.	[7] (Botero y Peña, 2006)

Fuente. Elaboración propia del autor.

Modelo propuesto

En la investigación se consideró la agrupación de varios factores encontrados en la literatura. Como es el caso en confiabilidad se consideró la reputación, responsabilidad y la confiabilidad. El modelo desarrollado consistió en tres variables independiente (confiabilidad, aspectos tangibles y capacidad de respuesta) y la variable dependiente (el nivel de servicio).

METODOLOGÍA

La presente investigación considera como población a los alumnos de la Facultad de Ciencias Químicas únicamente campus Cd. Universitaria, teniendo un total de 5000 estudiantes. En cuanto al tamaño de muestra se usó un nivel de confianza del 95%, lo cual indica que se tiene un 5% de error, como resultado se obtuvo una muestra de 206 encuestas necesarias para aplicar.

Esta investigación se apoyó de un instrumento de medición (encuesta), con el objetivo de recopilar información. Para la realización de la encuesta se usó la escala de Likert del 1-5, para que el sujeto de estudio evalué con base a su percepción las preguntas realizadas para cada una de las variables, esto con el apoyo de la literatura localizada en las diversas bases de datos. La encuesta estuvo integrada por la primera área enfocada a solicitar información del perfil del encuestado y una segunda parte que consistió en 24 preguntas, de las cuales 9 están asignadas al nivel de servicio, 4 de confiabilidad, 6 a aspectos tangibles y 4 a capacidad de respuesta.

En cuanto a la evaluación del instrumento de medición se apoyó con expertos en el tema, en donde se hizo un promedio con la evaluación de ellos y se realizaron las modificaciones pertinentes de acuerdo a los comentarios establecidos.

Por último, el método usado para el análisis de los datos fue la regresión lineal múltiple, en donde se desea analizar que las variables independientes tengan un impacto ya sea positivo o negativo en la variable dependiente.

Prueba Piloto

La confiabilidad de un instrumento de medición hace referencia al grado en que su aplicación repetida al mismo individuo u objeto produce resultados iguales. Para probar la confiabilidad de la encuesta aplicada se utilizó el estadístico alpha de Cronbach's. Los valores del alpha de Cronbach's deben de oscilar entre el 0.70 y 0.90, en donde el 0.70 es el mínimo aceptable y el 0.90 es excelente. De acuerdo a los resultados que se muestran en la Tabla 2, se puede concluir que la confiabilidad y aspectos tangibles, se encuentran en el rango de buenos y el nivel de servicio y capacidad de respuesta en excelente.

Tabla 2. Valores del alpha de Cronbach's.

Variable	Tipo de Variable	t	Cronbach's Alpha	Items Eliminados
Nivel de Servicio	Dependiente	9	0.931	0
Confiabilidad	Independiente	5	0.864	0
Aspectos Tangibles	Independiente	6	0.87	0
Capacidad de Respuesta	Independiente	4	0.905	0

Fuente. Elaboración propia del autor.

RESULTADOS

Análisis descriptivo del sujeto de estudio

Alrededor del 44.17 % se encuentra entre los 20 y 24 años, siguiendo con un 16% a aquellos entre 24 y 29 años de edad, estos datos pueden ser observados en la Tabla 3.

Tabla 3. Edades del sujeto de estudio.

Rango de edad	Número de estudiantes
15-19	6
20-24	91
25-29	33
30-34	14
35-39	17

40-44	7
45-49	13
50-54	15
55-59	6
60-64	4

Fuente. Elaboración propia del Autor.

Regresión múltiple

Una regresión lineal múltiple debe de cumplir con los principios de la regresión. Para esta investigación se usó el software *IBM SPSS Statistics 21* y el método usado fue el “*Stepwise*” también conocido como “Pasos Sucesivos”.

a) Medida de la bondad del ajuste: Coeficiente de correlación lineal. En esta investigación se usó la R^2 , también conocido como coeficiente de determinación, este coeficiente indica el porcentaje de la variación en la variable de respuesta, que es explicado por un modelo lineal. El coeficiente de R^2 puede obtener un valor entre 0 y 100% donde el 0% no explica el problema de investigación y valores arriba del 0.60 en estudios sociales, muestra que el modelo si representa al problema de investigación. En la Tabla 4 se muestra que para esta investigación se obtuvo una R^2 de 0.697, lo cual indica que el modelo representa un 70% al problema de investigación, las variables que tuvieron un impacto fueron la confiabilidad y capacidad de respuesta.

Tabla 4. Coeficiente de determinación R^2 .

Model	R	R^2
1	0.835 ^b	0.697

Fuente. Elaboración propia del Autor con *Software SPSS Statiscal 2021*.

b) ANOVA, se usó el análisis de la varianza con el objetivo de comparar las varianzas entre las medias de diferentes grupos. Se usa la F de Fisher muestra la diferencia entre la varianza dentro del grupo y la varianza entre grupos, este estadístico tiene como función aceptar la hipótesis nula o rechazar la hipótesis nula propuesta en la investigación. En esta investigación como puede observarse en la Tabla 5 se observa que se rechaza la hipótesis nula y se aprueba la alterna, la cual indica que el modelo es significativo.

Tabla 5. Análisis de Varianza (ANOVA).

ANOVA ^a						
Model		Sumatoria Cuadrada	Grados de Libertad	Cuadrados Medios	F	Signifi-cancia
1	Regresión	125.628	2	62.814	226.829	0.000 ^c
	Residual	54.554	197	.277		
	Total	180.182	199			
a. Variable Dependiente: Nivel de Servicio						
c. Predictores: (Constante), Confiabilidad, Capacidad de respuesta						

Fuente. Elaboración propia del Autor con *Software SPSS Statiscal 2021*.

c) Significancia de las variables *T-Student*. En la Tabla 6 se muestran los resultados del estadístico *T-Student*, prueba que muestra que variables tienen un impacto en el estudio realizado. En la Tabla 6 se puede observar que, de las tres variables independientes, solo dos de ellas resultaron significativas en el problema de investigación

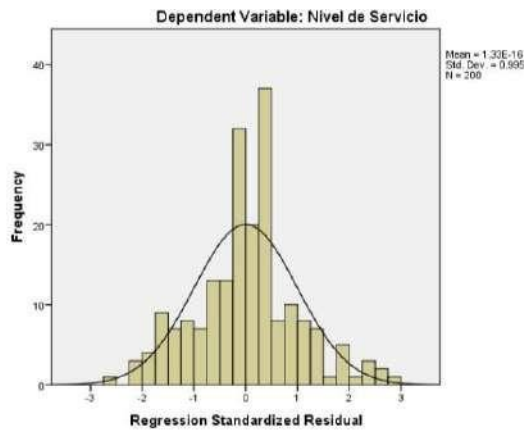
Tabla 6. Prueba *T-Student*.

Coeficientes ^a						
Modelo		Coeficientes No Estandarizados		Coeficientes Estandarizados	<i>t</i>	Signifi- cancia
		<i>B</i>	Error Estándar	Beta		
2	Confiability	0.436	0.051	0.460	8.467	0.000
	Capacidad de Respuesta	0.430	0.052	0.448	8.251	0.000

a. Variable Dependiente: Nivel de Servicio

Fuente. Elaboración propia del Autor con *Software SPSS Statiscal 2021*.

d) Normalidad. Con el objetivo de probar la normalidad se usará el histograma como se observa la Figura 1, en donde se puede ver que los datos cumplen con este supuesto de la regresión. La distribución normal cuenta con una única moda, que coincide con su media y mediana. Es simétrica y cuenta con la forma de la campana de Gauss.



Fuente. Elaboración propia del Autor con *Software SPSS Statiscal 2021*.

Figura 1. Histograma.

f) Multicolinealidad. Otro de los estadísticos de calidad que debe de cumplir una regresión es la colinealidad, como se muestra en la Tabla 7. La colinealidad indica si las variables independientes están correlacionadas, cuando deberían de ser independientes.

e) Durbin Watson. La siguiente prueba de calidad es la independencia entre sus residuos. El valor de este estadístico varía entre 0 y 4, en donde los valores permitidos deben de encontrarse entre 1.5 y 2.5. En este estudio se obtuvo una Durbin Watson de 2.035, con lo cual se puede indicar que se cumple con este supuesto en la investigación.

Tabla 7. Colinealidad.

Modelo		Colinealidad	
		Tolerancia	VIF
1	(Constante)		
	Confiabilidad	0.521	1.919
	Capacidad de Respuesta	0.521	1.919

Fuente. Elaboración propia del Autor con *Software SPSS Statiscal* 2021.

f) Modelo Propuesto.

$$Y = 0.460 \text{ Confiabilidad} + 0.448 \text{ Capacidad de Respuesta} + E$$

CONCLUSIONES

Se concluye que las organizaciones deben de invertir su capital en generar confianza en la marca por parte de su cliente, a través de estrategias enfocadas a la eficiencia y efectividad. Además de medir la capacidad de respuesta que se tiene para resolver las necesidades del cliente, esto mediante el seguimiento de sus problemas o necesidades, así como proporcionar atención especializada y la disminución de los tiempos de resolución de los problemas. Dentro de las sugerencias solicitadas por el sujeto de estudio fue el uso de *chat bots* con el objetivo de evitar esperar la respuesta de una persona del departamento.

REFERENCIAS

- [1] Restrepo, C. E., Ferro, L. S. R., & Mejía, S. E. (2006). Enfoque estratégico del servicio al cliente. *Scientia et technica*, 12(32), 289-294.
- [2] Moreno, M. C. M., & Moreno, M. D. C. M. (2016). Satisfacción del usuario y calidad del servicio en alojamientos turísticos del estado Mérida, Venezuela. *Revista de Ciencias Sociales*, 22(2), 111-131.
- [3] Pizam, A., & Ellis, T. (1999). Customer satisfaction and its measurement in hospitality enterprises. *International journal of contemporary hospitality management*, 11(7), 326-339.
- [4] Mejía, M. C. L. (2009). ¿Cómo puedo mejorar el servicio a cliente. *Técnicas para perfeccionar la actitud en el servicio al cliente*.
- [5] Ventura, N. V. C. (2018). El servicio al cliente como filosofía y factor de posicionamiento de las cooperativas de taxis. *Innova research journal*, 3(2), 71-82.
- [6] Ibarra Morales, L. E., & Casas Medina, E. V. (2015). Aplicación del modelo Servperf en los centros de atención Telcel, Hermosillo: una medición de la calidad en el servicio. *Contaduría y administración*, 60(1), 229-260.
- [7] Botero, M. M., & Peña, P. (2006). Calidad en el servicio: el cliente incógnito. *Suma psicológica*, 13(2), 217-228.

REDISEÑO DE LA CADENA DE VALOR PARA LA MEJORA DEL SERVICIO DE UNA EMPRESA DE AUTOPARTES.

REDESIGNING THE VALUE CHAIN TO ENHANCE SERVICE IN AN AUTOMOTIVE PARTS COMPANY

Carolina Solís Peña^{1*}, Fátima Abygail Dragustinovis López¹, Leonardo Gabriel Hernández Landa¹.

¹Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Departamento de Ingeniería Química, Ave. Universidad S/N, Cd. Universitaria, San Nicolás de los Garza N.L. México, C.P. 66455.

**Carolina.solispa@uanl.edu.mx*

RESUMEN. La cadena de suministro engloba todas las actividades en donde el flujo de información y materiales tienen como objetivo de abastecer la necesidad de un producto y/o servicio. La demanda de cada uno de los eslabones de la cadena de suministro está en constante cambio debido a la influencia del mercado internacional. En la presente investigación el proceso seleccionado utiliza un intermediario, el cual tiene como función recibir la información del cliente y hacerla llegar al proveedor del producto que se está solicitando; sin embargo, esta triangulación de información ha traído consigo afectaciones en la actualización de las ordenes de producción y el servicio proporcionado entre proveedor y cliente es nulo; Es por ello que en esta investigación se decidió mapear el flujo de la cadena de valor del producto mostrando el tiempo y distancias que recorre el producto a enviar al cliente, así como como medio de transporte usado, entre otras características esto con el objetivo de proporcionar acciones de mejora del proceso, dentro de las que destacaron el análisis de la utilidad del intermediario y los beneficios que pudieran traer consigo la eliminación del mismo.

Palabras clave: *Abastecimiento, Demanda, Valor*

ABSTRACT. The supply chain encompasses all activities where the flow of information and materials aims to meet the needs of a product and/or service. The demand of each link in the supply chain is constantly changing due to the influence of the international market. In the present investigation, the selected process involves an intermediary whose function is to receive customer information and relay it to the product supplier being requested. However, this triangulation of information has resulted in disruptions in updating production orders, and the service provided between the supplier and the customer is nonexistent. That is why this investigation decided to map the flow of the product's value chain, showing the time and distances it travels to reach the customer, as well as the mode of transportation used, among other characteristics. The objective is to provide process improvement actions, including analyzing the usefulness of the intermediary and the potential benefits that could come from its elimination.

Keywords: *Supply, Demand, Value*

INTRODUCCIÓN

El concepto de cadena de valor permite ofrecer una ventaja competitiva a las organizaciones [3]. Por otro lado, otros autores definen a la cadena de valor como un instrumento y modelo gráfico, que permite describir el desarrollo de las actividades de una organización [6].

Dentro de los principales indicadores (Tabla 1) que se miden en la cadena de valor tenemos, los días de inventario, tiempo de entrega, veracidad del inventario, desempeño de la entrega de ordenes al cliente final.

Tabla 1. Definiciones de los principales indicadores para el caso de estudio

Concepto	Definición
Days on Hand	Los días de inventario pueden determinarse mediante el inventario promedio por 360 entre los costos de venta [1].
Tiempo de Entrega	Es el tiempo que transcurre desde que se coloca la orden hasta que se entrega [2].
Veracidad del Inventario	% de asertividad del inventario real y el físico [4].
Desempeño de la entrega de ordenes	% de ordenes entregadas en tiempo al cliente final [5].

La presente investigación como se observará más adelante parte de la identificación de los principales actores de la cadena de valor para posteriormente analizar los métricos establecidos y generar una propuesta de mejora para la organización.

METODOLOGÍA

El mapeo de la cadena de valor de una organización, identifica aquellas actividades que genera un valor para los clientes. Por otro lado, desde el punto de vista estratégico la cadena de valor permite observar las estrategias que usan las organizaciones para satisfacer las necesidades del cliente [3]. En este caso la organización decide tener un intermediario entre el cliente y la planta manufacturera, lo cual hace que la información viaje de manera más lenta y se reaccione a destiempo ocasionado gastos innecesarios.

SITUACIÓN ACTUAL

Uno de los principales productos que maneja la empresa seleccionada es la manufactura de un ensamble que tiene como función modular el flujo de evaporación del motor de un vehículo, dentro de las principales características es una pieza pequeña, la cual es empaquetada en cajas plásticas y es embarcado al cliente final en pallets retornables. El modo seleccionado para su envío es el terrestre, utilizando camiones tracto articulados con cajas de 53 ft. Los equipos para realizar la transportación son subcontratados por la planta de Monterrey y los costos oscilan en \$7000 dólares con un tiempo de entrega de 2 días. Por otro lado, la incoterm seleccionada por la planta manufacturera del componente es DDP, la cual significa Delivery Duty Paid, esta se caracteriza por la entrega de la mercancía por parte del vendedor en el lugar requerido por el

comprador, y el vendedor se encargará de importar la mercancía en el país del comprador y pagar los aranceles IVA/GST.

El flujo de la cadena de valor el cual se observa en la figura 1. comienza con el envío de los requerimientos por parte del cliente al intermediario en Tennessee y posteriormente este envía la información hacia la planta que se encuentra en Monterrey México. Cada viernes la planta de Monterrey recibe las ordenes por parte del intermediario y se genera el plan de producción, el cual es reflejado a los compradores de materiales con el objetivo de realizar la compra de materia prima necesaria, una vez que los proveedores reciben estas órdenes, lo embarcan ya sea por el medio de transporte que manejen, puede llegar a ser vía camión, aéreo o marítimo (esto depende de la ubicación del proveedor) y ya que lo embarcan llega a nuestro almacén donde es recibido y es surtido a las líneas de producción para la fabricación del producto terminado

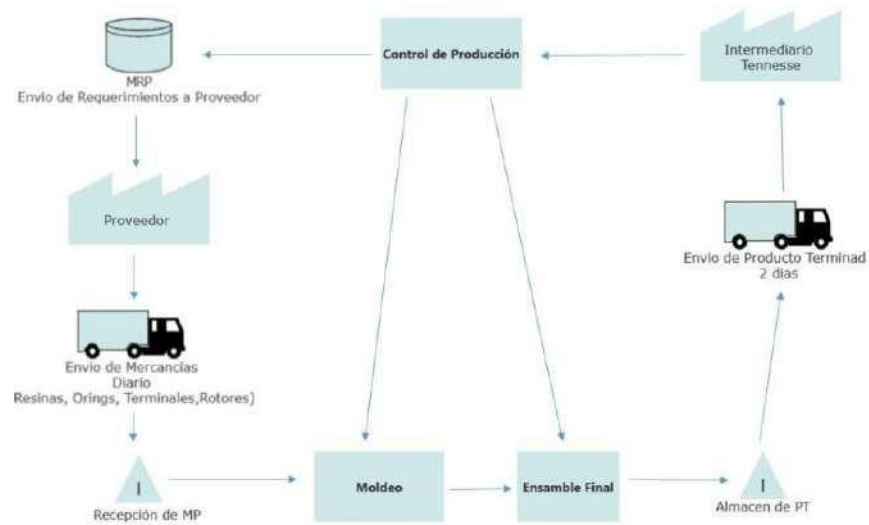


Figura 1. Flujo de la cadena de valor

Dentro de los principales indicadores de la compañía para el departamento de producción se encuentran los siguientes:

Delivery performance: el cual debe de ser del 100%

Veracidad del Inventario: 100%

Day on hand: no se debe de tener menos de 1.5 días y tampoco más de 3 días.

Costos por expeditados: 0

PROBLEMA DE INVESTIGACION

Cuando es emitido un cambio por el cliente final, el intermediario (Tennessee), solicita material fuera del emitido inicialmente, y es complicado reaccionar considerando que solo se emiten ordenes por el intermediario 1 vez por semana. Entonces este nuevo requerimiento se detectaría en la siguiente semana. Por lo tanto, estos movimientos en los requerimientos crean problemas en la cadena de suministro de la planta manufacturera, generando de esta manera sobre

inventarios de materias primas, así como producto terminado y en el peor de los casos expeditados para cumplir con los requerimientos del cliente final. En la Figura 2 se puede mostrar como fluye la información y los materiales con sus respectivos tiempos.

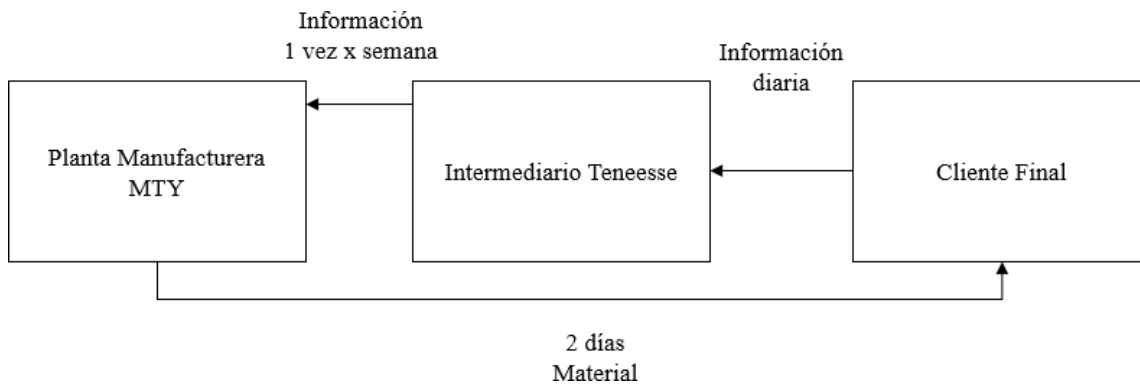


Figura 2. Flujo de Información y Materiales (Tiempo).

RESULTADOS FINALES

Con el objetivo de eliminar los tiempos de desfase de los requerimientos mostrados, se propone eliminar el intermediario y de esta manera tener contacto directo con el cliente final y así poder ver de manera diaria los requerimientos del cliente final, y evitar expeditados y/o sobre inventarios. El flujo de materiales e información propuesto se muestra en la Figura 3.

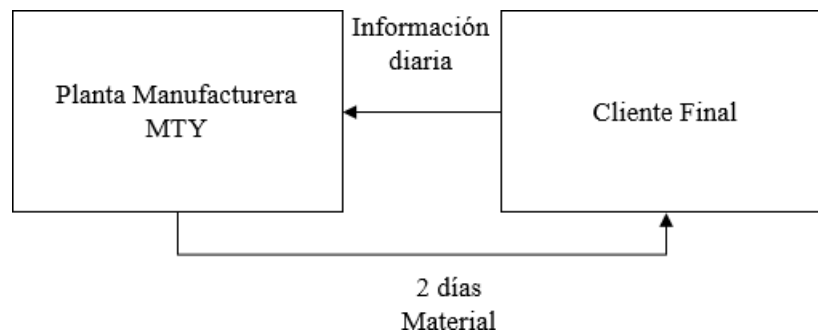


Figura 3. Flujo de Información y Materiales (Tiempo).

Con la propuesta el medio de transporte planteado en un inicio permanece, los días de tránsito siguen manteniendo en 2 días, por otro lado, los días de inventario se redujeron de 8 -10 días a 3-5 días de *days on hand*, el flujo de la información pasa de ser semanal a diario por lo que la respuesta directa al cliente es 100 % directo.

CONCLUSIÓN

Las fluctuaciones de la demanda a lo largo de la cadena de suministro generan problemas de abasto o en su defecto de sobre inventario en alguno de los eslabones de la cadena de suministro. Lo cual trae consigo incrementos en los costos de transportación de materiales

debido a los expeditados y esto a su vez impacta en el rendimiento de las organizaciones, por lo tanto, de acuerdo con el problema planteado y en concordancia con la literatura mostrada se sugiere eliminar todas aquellas fuentes que pudieran ocasionar demoras en el flujo de información de la cadena de suministro.

REFERENCIAS

- [1]. Altuve , J. (2014). Rentabilidad de la variable activo corriente o circulante. *Actualidad Contable Faces*, 5-17.
- [2]. Cooper, R. (1989). Requirements Planning Systems Infusion. *International of Management Science*. .
- [3]. Quintero, J., & Sánchez, J. (2006). La cadena de valor: Una herramienta del pensamiento estratégico. *Telos. Revista de Estudios Interdisciplinarios en Ciencias Sociales*. , 377-389.
- [4]. Schrady. (1970). Operational definitions of inventory record accuracy. *Naval Research Logistics Quarterly*, 133-142.
- [5]. Subramanya, K. (2012). Impact of warehouse management system. *International Journal of computer applications*.
- [6]. Vergiu, J. (2013). La cadena de valor como herramienta de gestión para una empresa de servicios. *Industria Data* , 17-28.

Capacidad Económica Familiar y su Influencia en el Rendimiento Académico de Estudiantes de Ingeniería: Estudio transversal Preliminar

The Family Economic Capacity on Academic Performance of the Students of the Engineering: Preliminary cross-sectional study

José Daniel Velázquez Martínez¹. Leticia Téllez González². Mauricio Torres Torres¹. Soraya Concepción Elizondo Jiménez¹. Rogelio Martín De la Rosa Villarreal¹.

¹Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Departamento de Ingeniería Industrial y Administración, Ave. Universidad S/N, Cd. Universitaria, San Nicolás de los Garza N.L. México, C.P. 66455.

² Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Facultad de medicina. C. 13 Sur 2702, Los Volcanes, 72420 Puebla, Pue.

jose.velazquezmrz@uanl.edu.mx

RESUMEN. La pobreza es un fenómeno complejo, el cuál puede explicarse por un conjunto de elementos de escasez que pueden amenazar la dignidad de quienes lo sufren y, por otro lado, la educación es uno de los pilares fundamentales para el fortalecimiento de una economía. Por lo que el presente trabajo se centra en describir de manera preliminar la capacidad económica familiar y su influencia en el rendimiento académico de algunos estudiantes de ingeniería industrial. Para lo cual, se llevó a cabo un estudio transversal con una muestra por conveniencia, dirigida a los estudiantes que se encontraban cursando el último semestre de la carrera de ingeniería industrial, debido a que los estudiantes de los últimos semestres cuentan con una mayor experiencia en cuanto a como se ve afectado su rendimiento académico dada su capacidad económica. En el estudio se tuvo una tasa de respuesta de aproximadamente el 63%, encontrando que la mayoría de los estudiantes se encuentran en un nivel socio económico medio (siendo aproximadamente el 50% de los estudiantes). Por otro lado, se encontró que los estudiantes con ingreso económico bajo, a pesar de sus carencias obtienen buenos resultados, pero no llegan a ser sobresalientes, lo que sugiere que necesitan hacer más esfuerzo para obtener un resultado, por lo que es necesario llevar a cabo más investigaciones sobre este tema.

Palabras clave: Rendimiento académico. Nivel socioeconómico. Familia. Estudiantes. Pobreza.

ABSTRACT. Poverty is a complex phenomenon, which can be explained by a set of elements of scarcity that can threaten the dignity of those who suffer it and, on the other hand, education is one of the fundamental pillars for strengthening an economy. Therefore, the present work focuses on a preliminary description of the family economic capacity and its influence on the academic performance of some industrial engineering students. For which, a cross-sectional study was carried out through a survey which was adapted for use in the studied context, with a convenience sample (n=90), aimed at students who were studying the last semester of the university. industrial engineering career, because the students of the last semesters have more experience in terms of how their academic performance is affected given their economic capacity. The study had a response rate of approximately 63%, finding that most of the students are in a medium socioeconomic level (being approximately 50% of the students). On the other hand, it was found that students

with low income, despite their deficiencies, obtain good results, but do not become outstanding, which suggests that they need to make more effort to obtain a result, so it is necessary to carry out conduct more research on this topic.

Keywords: *Academic performance. Socioeconomic level. Family. Students. Poverty.*

INTRODUCCIÓN

La pobreza nos muestra la falta o insuficiencia de algo con respecto a un límite preestablecido [1]. Diversos autores definen a la pobreza como un fenómeno complejo, el cuál puede explicarse por un conjunto de elementos de escasez que pueden amenazar la dignidad de quienes lo sufren [2].

La educación es fundamental para el fortalecimiento de una economía [3]. En varios países del sur global, se han realizado estudios financieros, los cuales han demostrado que los individuos con mayor educación generalmente obtienen salarios mayores, experimentan menores tasas de desempleo, y trabajan en ocupaciones de mayor estatus que aquéllos menos educados; sin una comprobación experimental, resulta complejo saber si la falta de educación es la que ha generado menores niveles de pobreza o si las personas menos pobres son las que eligen estar mejor educadas [4]. Por lo que el nivel de educación financiera tiene una relación muy amplia con el nivel de ingresos y la preparación académica de las personas. Una persona con mayor grado de estudios y un mayor sueldo, es más probable que tenga el conocimiento adecuado de los productos financieros y su funcionamiento, mientras que, una persona de bajo nivel de estudios y un sueldo bajo, va a desconocer totalmente de educación financiera. [5]. Así como también terminar una carrera profesional involucra tanto factores personales como académicos e institucional [6]. En estudiantes de licenciatura, se ha encontrado que las calificaciones están asociadas con los esfuerzos académicos y características personales, así como por el bachillerato de procedencia, factores sociales, familiares, económicos, psicológicos y vocacionales [7]. Las condiciones socioeconómicas juegan un papel de mayor importancia con relación al clima organizacional o el acoplamiento entre estudiante y universidad. Eso lleva a que los estudiantes de bajos ingresos puedan ser expulsados (o que se retiren) no por razones de pobreza, sino porque resulta imposible combinar los estudios con un trabajo, y en México, el 51.4% de los estudiantes desertores indica estar trabajando; las características cruciales del grupo son que provienen de familias de menor capital educativo (lo cual hace suponer que tienen menor capital financiero) y estar trabajando en el momento de decidir abandonar la carrera [8]. Finalmente, el nivel socioeconómico (NSE), se define como la clasificación de una persona o su familia en una jerarquía de acuerdo con su acceso o control de riqueza, poder y estatus social, se ha considerado como uno de los predictores más importantes del logro educativo de los estudiantes [9]. Se describen tres motivos principales por los que el NSE afecta directamente al rendimiento académico, los cuales son: 1.- Los estudiantes tienen menos acceso a apoyos académicos y sociales fuera de la escuela; 2.- Los estudiantes con bajo NSE, están expuestos a condiciones que influyen en su salud, seguridad y bienestar; y 3.- Los padres de estos estudiantes no tienen acceso a altos niveles de capital social y cultural. [10]. Una mayor capacidad económica familiar proporciona a la familia más oportunidades y recursos para mejorar su calidad de vida y brindar a sus miembros las condiciones necesarias para su desarrollo integral. La capacidad económica familiar está significativamente correlacionada con el nivel de rendimiento académico de los estudiantes. Las condiciones económicas precarias limitan la producción académica de los

estudiantes, ya que deben equilibrar su tiempo entre la formación académica y el trabajo [11]. En un estudio, los hallazgos sobre la relación entre el estado socioeconómico de los padres y el rendimiento académico de los estudiantes mostraron que la mayoría de los estudiantes de bajo nivel socioeconómico tienen un bajo rendimiento académico [12]. El cuidado parental, las buenas prácticas de los padres en el hogar, las instalaciones adecuadas en el hogar, la participación en la educación de sus estudiantes y los ingresos mejoraron el rendimiento académico de sus hijos [13]. Por lo que el objetivo del presente trabajo de investigación es describir de manera preliminar la capacidad económica familiar y su influencia en el rendimiento académico de estudiantes de décimo semestre de IIA-FCQ-UANL.

METODOLOGÍA

Se trató de un estudio transversal con una muestra por conveniencia, dirigida a los estudiantes que se encontraban cursando el último semestre de la carrera de ingeniería industrial. Las características de la población estudiada, el instrumento utilizado, los criterios de inclusión, exclusión y eliminación, así como el software utilizado se describen a continuación

2.1 Población de estudio

La unidad educativa de la Facultad de Ciencias Químicas fue seleccionada de manera específica para facilitar la obtención de datos e interpretación de resultados. La población muestreada fueron alumnos de decimo semestre.

2.2 Instrumento utilizado

Encuesta tomada y adaptada del artículo de Intriago (ver Tabla 1), para los detalles ver cita [14].

2.3 Criterios de selección de muestra

Criterios de inclusión. - Se considera incluir al alumnado perteneciente a décimo semestre.

Criterios de exclusión. -Encuestas que no estén contestadas mínimo al 80%

Criterios de eliminación. - Respuestas de personas ajenas a décimo semestre de la carrera IIA en la FCQ de la UANL.

2.4 **Software utilizado:** Microsoft Excel versión 2016, Microsoft 365 Forms y Teams versión 1.6.00.19562

Tabla 1. Instrumento: Variables definidas para establecer la relación entre el nivel económico y el rendimiento académico.

Promedio de ingresos familiares mensuales	1 Alto (Mayor a \$27,800), 2 Medio (\$15,600-\$27,800), 3 Bajo (Menos a \$15,600)
Dependencia del ingreso económico	1 Mamá, 2 Papá, 3 Mamá y papá, 4 Hijos, 5 Otros
Educación de la madre	1 Primaria, 2 Secundaria, 3 Bachillerato o equivalente, 4 Carrera trunca, 5 Licenciatura, 6 Posgrado, 7 No aplica
Educación del padre	1 Primaria, 2 Secundaria, 3 Bachillerato o equivalente, 4 Carrera trunca, 5 Licenciatura, 6 Posgrado, 7 No aplica

Ocupación de la madre	1 Trabajo formal, 2 Trabajo no formal, 3 Trabajo doméstico, 4 Desempleado, 5 No aplica
Ocupación del padre	1 Trabajo formal, 2 Trabajo no formal, 3 Trabajo doméstico, 4 Desempleado, 5 No aplica
Ayuda para realizar tareas	1 Si, 2 No
Calificación EGEL	1 Sobresaliente, 2 Satisfactorio, 3 Aún no satisfactorio
Promedio general de la carrera	Respuesta personal

RESULTADOS

La Figura 1 muestra el promedio de ingresos familiares mensuales en la familia de los encuestados, se mostró una marcada diferencia entre el grupo de ingresos mensuales bajo respecto al resto, de una muestra de 94 encuestados únicamente el 9% (8 personas) de ellos se encuentran en un nivel bajo. En su mayoría, el 50% (47 respuestas) de los encuestados se encuentran en el nivel medio de ingresos entre \$15,000 y \$27,800 al mes, aunque la diferencia entre estos últimos y los de ingresos altos es de un 9% (7 personas de diferencia), por lo cual podemos decir que alrededor de un 92% de la muestra se encuentra en el nivel medio y alto.



Figura 1. Promedio de ingresos familiares mensuales.

En la Figura 2 podemos observar los promedios obtenidos durante la carrera del alumnado que respondió la encuesta, se muestra que el 17% del alumnado (16 alumnos) obtuvo un promedio de 75 a 80, un 27% (25 alumnos) obtuvieron un promedio de entre 81 a 85, la mayoría de respuestas nos arrojaron con el 33% (31 alumnos) lograron un promedio de 86 a 90, el 21% (20 alumnos) respondieron que tienen un promedio de entre 91 a 95 y únicamente el 2% (2 alumnos) lograron obtener durante su periodo universitario un promedio mayor a 95. Esto nos deja con una posición media de 86.71 y una desviación estándar de 4.74.

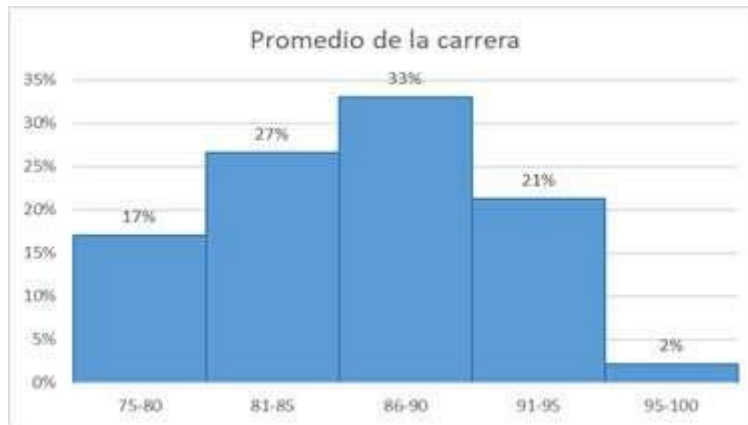


Figura 2. Promedio de carrera del alumnado de décimo semestre

De acuerdo con las respuestas de los encuestados como se ve en la Figura 3. se puede apreciar los resultados obtenidos en el examen de egreso a licenciatura según el promedio de ingresos mensuales, a simple vista notamos que ningún estudiante logró obtener un resultado sobresaliente dentro del nivel socioeconómico bajo.

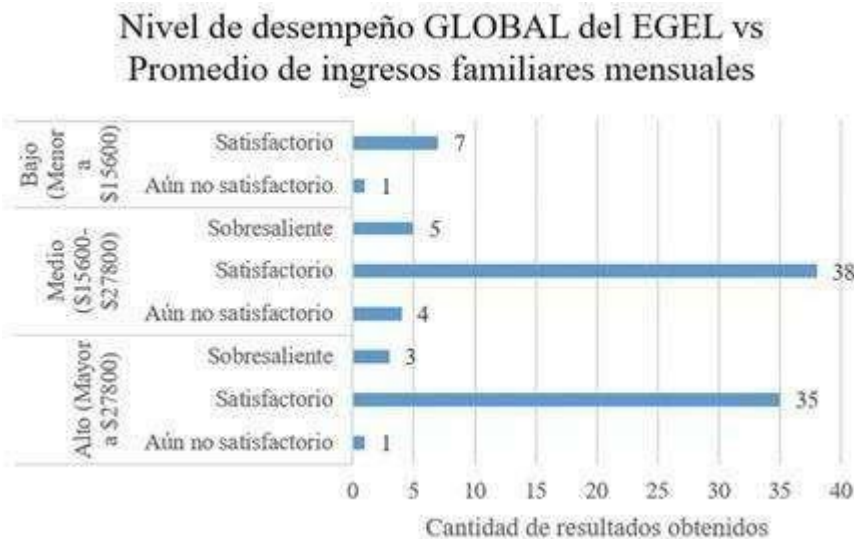


Figura 3. Nivel de desempeño global del EGEL vs Promedio de ingresos familiares mensuales.

CONCLUSIONES

Los estudiantes dentro del nivel económico bajo no lograron alcanzar un resultado sobresaliente en el examen de egreso a licenciatura, mientras que los estudiantes de ingresos altos y medios si lograron obtenerlo, por lo que podría estar influyendo la capacidad económica familiar en el rendimiento académico, además los estudiantes con ingreso económico bajo a pesar de sus carencias obtienen buenos resultados sin ser sobresalientes. Por lo tanto, es necesario realizar llevar a cabo más investigaciones que nos permitan modelar mejor esta realidad.

AGRADECIMIENTOS

Primeramente, nuestra gratitud a D-os y también a nuestras estudiantes Isbelia Fernanda Rodríguez Moreno, Monserrat Ramos Guerrero, María Fernanda Bernal Palencia por su dedicación y apoyo.

REFERENCIAS

- [1] Casas-Herrera J, Augusto and Barichelo -Rodrigo P. Hacia una noción sobre la pobreza. Apuntes del Cenes [online]. (2015): vol.34, pp.39-62.
- [2] Dieterlen, P. "Los retos de la justicia distributiva frente a la pobreza en Justicia global, derechos humanos y responsabilidad." (2007): 181-196.
- [3] Navarro-Chávez J, Delfín-Ortega O. "Educación y pobreza en México. Un análisis de eficiencia a nivel de estados." Acta Universitaria 27. (2017): 33-45.
- [4] Ordaz-Juan L. "México: impacto de la educación en la pobreza rural. Cepal." Serie Estudios y Perspectivas (México, DF) No 105 (2009).
- [5] Anáhuac, R. G. (2022). El reto de la educación financiera en México. Recuperado de: <https://www.anahuac.mx/generacion-anahuac/educacion-financiera-mexico-reto>
- [6] Vera-Noriega J, et al. "Factores asociados al rezago en estudiantes de una institución de educación superior en México." Revista iberoamericana de educación superior 3.7.(2012): 41-56.
- [7] Gómez-López V, Sandra-Rosales M, Maldonado- Vigil. M "Comparación de factores sociales asociados al estatus académico en estudiantes de Medicina." Investigación en educación médica 4.15.(2015): 133-138.
- [8] Vries, Wietse de, et al. "¿Desertores o decepcionados? Distintas causas para abandonar los estudios universitarios." Revista de la educación superior 40.160 (2011): 29-49.
- [9] Sirin- Selcuk. "Estado socioeconómico y rendimiento académico: una revisión metaanalítica de la investigación", Revisión de la investigación educativa, vol. 75, núm. 3, (2005): 417-453.
- [10] Chaparro-Caso L, Coral-González B, Caso-Niebla J. "Familia y rendimiento académico: configuración de perfiles estudiantiles en secundaria." Revista electrónica de investigación educativa 18.1 (2016): 53-68.
- [11] Chávez, W.A. (2020). Capacidad económica familiar y rendimiento académico universitario en Apurímac, a veinticinco años del fin de la violencia social en el Perú. Departamento de Humanidades y Educación, Universidad Nacional Micaela Bastidas de Apurímac Abancay, Apurímac. Recuperado de: <https://www.iiisci.org/journal/pdv/risci/pdfs/XA765AX20.pdf>
- [12] Pantalón, KR. Influencias del estatus socioeconómico de los padres en el rendimiento académico: un estudio de caso de comunidades rurales en Kailali, Nepal. Contemp. Res. Interdiscip. AcademiaJ.4,(2020):95-109.
- [13] Miftahu, I. y Melaiye, RO. Influencia del estatus socioeconómico de los padres en el rendimiento académico de los estudiantes en las escuelas secundarias del estado de Taraba, Nigeria. Jalingo J. Soc. Administrar. ciencia3,(2021):239-255.
- [14] Intriago-Cusme N, et al. "Asociando el estatus socio económico y el rendimiento académico en el distrito Chone." *Santiago* 160 (2023): 85-101.

EVALUACIÓN DE HERRAMIENTAS TECNOLÓGICAS COMO RECURSO EDUCATIVO EN LA FORMACIÓN DE BACHILLERATO, INGENIERÍA Y POSGRADO

TECHNOLOGICAL TOOLS EVALUATION AS EDUCATIONAL RESOURCE IN HIGH SCHOOL, BACHELOR OF SCIENCE AND POSTGRADUATE TRAINING

Azucena Minerva García León^{1*}, María de los Ángeles Martínez Mercado¹, Daniela del Carmen Bacre Guzmán¹, Elva Patricia Puente Aguilar¹, Iván Guillermo González Palomo¹

¹Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Departamento de Ingeniería Industrial y Administración, Ave. Universidad S/N, Cd. Universitaria, San Nicolás de los Garza N.L., México, C.P. 66455.

*azucena.garcialn@uanl.edu.mx

RESUMEN. Actualmente, con los avances tecnológicos, se han desarrollado nuevas herramientas digitales que se han integrado al proceso de enseñanza-aprendizaje, con la finalidad de adquirir conocimientos, desarrollar habilidades y actitudes en la formación de los estudiantes. El objetivo principal de la presente investigación es evaluar el uso de herramientas tecnológicas en el proceso aprendizaje en cursos, así como su eficacia y facilidad. Se aplicó una encuesta a fin de evaluar la perspectiva de los estudiantes de cinco herramientas tecnológicas: realidad virtual, inteligencia artificial, realidad aumentada, aulas virtuales y métodos tradicionales. En las cinco dimensiones fueron evaluadas las oportunidades que generan diferentes herramientas tecnológicas: interacción entre alumnos y profesores, motivación al estudiar, interés en los temas y contenidos, facilidad que identifican los alumnos al utilizarlas, disponibilidad de acceso. Por lo que, cada dimensión se evaluó en los mismos 7 reactivos, los cuales se respondieron en una escala Likert, donde 5 es totalmente de acuerdo y 1 es totalmente en desacuerdo. El tamaño de la muestra se calculó tomando en cuenta que la Universidad Autónoma de Nuevo León cuenta con aproximadamente 136,423 alumnos matriculados a nivel bachillerato, licenciatura y posgrado; resultando en encuestar a 97 alumnos con un nivel de confianza del 95%. La confiabilidad del instrumento de medición fue excelente, siendo el alfa de Cronbach de 0.92. Los resultados muestran que la inteligencia artificial presenta el mayor puntaje promedio de 3.94, seguido de la realidad virtual 3.67; por lo que son las herramientas más aceptadas por los estudiantes para desarrollar un aprendizaje significativo. En conclusión, la inteligencia artificial se presenta como la herramienta más apta para mejorar el proceso educativo de los estudiantes, mejorar la interacción entre estudiantes y profesores, así como aumentar la motivación por el aprendizaje y mejorar el proceso de enseñanza.

Palabras clave: Herramientas tecnológicas, Inteligencia artificial, Aprendizaje significativo.

ABSTRACT. Nowadays, with technological advances, new digital tools have been developed and integrated into the teaching-learning process, with the purpose of acquiring knowledge, developing skills and attitudes in the training of students. The main objective of this research is to evaluate the use of technological tools in the learning process in courses, as well as their effectiveness and ease. A survey was applied in order to evaluate the students' perspective of five technological tools: virtual reality, artificial intelligence, augmented reality, virtual classrooms and traditional methods. In the five dimensions, the opportunities generated by different technological tools were evaluated: interaction among students and teachers, motivation to study, interest in the topics and contents, ease of use identified by students, availability of access. Thus, each dimension was evaluated in the same 7 items, which were answered on a Likert scale, where 5 is totally agree and 1 is totally disagree. The sample size was calculated considering that the Autonomous University of Nuevo León has approximately 136,423 students enrolled at the high

school, undergraduate and postgraduate levels, resulting in 97 students being surveyed with a confidence level of 95%. The reliability of the measuring instrument was excellent, being Cronbach's alpha 0.92. The results show that artificial intelligence presents the highest average score of 3.94, followed by virtual reality 3.67; therefore, they are the most accepted tools by students to develop meaningful learning. In conclusion, artificial intelligence is presented as the most suitable tool to improve the educational process of students, improve interaction between students and teachers, as well as increase motivation for learning and improve the teaching process.

Key words: *Technological tools, Artificial intelligence, Significant learning.*

INTRODUCCIÓN

En el proceso de formación educativa, los individuos se ven obligados a adquirir nuevos conocimientos de manera continua. Desde una edad temprana, se ven inmersos en un entorno educativo constante que les permite mejorar su autoconocimiento y familiarizarse con el mundo que les rodea.

En la actualidad, las herramientas tecnológicas han ganado terreno en la educación debido a las ventajas que ofrecen para mejorar la calidad y eficiencia del aprendizaje al permitir la integración de diversos medios y recursos a fin de enriquecer la experiencia educativa [1].

Entre estas herramientas, se han observado avances destacables en el ámbito de la computación en la nube, representada por plataformas como *Google Classroom*, *Drive* y *Microsoft Teams*, entre otras. Específicamente, con la llegada de la pandemia por COVID-19, estas herramientas en línea se convirtieron en una solución para los estudiantes con la finalidad de dar continuidad a sus estudios.

Otra herramienta que ha ganado relevancia recientemente es la Inteligencia Artificial (IA), cuyo objetivo es lograr que los ordenadores puedan pensar y actuar de manera similar a los seres humanos. Este enfoque ha resultado beneficioso al permitir la automatización de tareas complejas y obtener información de manera más amigable y eficiente. La IA se ha aplicado en diversos campos, incluido el educativo, donde puede adaptarse a las necesidades individuales de los estudiantes, brindar recomendaciones personalizadas y mejorar la experiencia de aprendizaje [2].

Por otro lado, la realidad virtual consiste en sumergir al participante en un entorno simulado altamente realista, lo que le permite explorar y manipular objetos y procesos a través de recursos tridimensionales. Mediante el uso y la interacción con estos elementos virtuales, se pueden realizar análisis y estudios del objeto de estudio en un contexto virtualmente inmersivo [3].

No obstante, también se ha desarrollado otra herramienta similar denominada Realidad Aumentada (RA). La RA se caracteriza por ser un proceso cognitivo divergente que promueve el aprendizaje mediante la acción y la exploración de diferentes fórmulas o enfoques para resolver problemas prácticos. Aunque su implementación en el sistema educativo es relativamente reciente, se han demostrado efectos positivos en el aprendizaje. La RA fusiona elementos virtuales con el entorno físico, permitiendo a los estudiantes interactuar con información digital superpuesta a la realidad, lo que fomenta la creatividad, la participación y la resolución de problemas de manera más dinámica [4].

Una aplicación de RA sería generar escenarios virtuales para que los estudiantes estén inmersos en lugares o ecosistemas relacionados con el curso. Por ejemplo, un estudiante de ingeniería industrial y administración podría usar la realidad aumentada para, desde la ubicación en la que esté, simular a su alrededor una línea de producción, pues ya ha sido usada como técnica didáctica en la enseñanza [5].

Según Acosta y Villegas (2013) [6], en cuanto a las aplicaciones de gestión de aulas virtuales presentan una plataforma destinada a la gestión del aprendizaje, conocida como *Learning Management System* (LMS), la cual ofrece la posibilidad de crear espacios de comunicación en línea entre los miembros de un curso, mediante un aprendizaje interactivo.

Por último, cabe mencionar que hay competencias digitales que han comenzado a ser parte de las nuevas prácticas docentes por lo que la educación virtual corresponde un reto que enfrentar para la evolución de los métodos de enseñanza [7].

METODOLOGÍA

Se construyó un instrumento de medición con la finalidad de determinar y evaluar las herramientas de aprendizaje que son más aptas como recurso educativo, de acuerdo con la perspectiva de los estudiantes de bachillerato, licenciatura y posgrado. Se realizó una revisión bibliográfica de las tendencias de herramientas tecnológicas de aprendizaje y los contextos educativos donde se aplican, con la finalidad de utilizar las como dimensiones de la encuesta.

Las dimensiones o herramientas tecnológicas para evaluar fueron: realidad virtual, realidad aumentada, inteligencia artificial, aulas virtuales y aulas o herramientas tradicionales. Cada dimensión está constituida con los mismos 7 reactivos. La encuesta está basada en una escala de respuestas de Likert de 1 a 5: 1 totalmente en desacuerdo, 2 en desacuerdo, 3 ni de acuerdo ni en desacuerdo, 4 de acuerdo y 5 totalmente de acuerdo.

Los reactivos de las cinco dimensiones fueron los siguientes:

1. La utilización de la herramienta permite una mejor interacción entre estudiantes y profesores.
2. La utilización de la herramienta ayuda a un mejor desarrollo de los contenidos (temas) impartidos por los docentes.
3. La utilización de la herramienta motiva a la elaboración de proyectos, actividades y forma de estudio.
4. La utilización de la herramienta hace el aprendizaje más interesante.
5. La utilización de la herramienta es intuitiva y de fácil manejo.
6. El uso de estas herramientas están al alcance mío o de mi Institución.
7. He tenido la oportunidad de utilizar esta herramienta de aprendizaje.

Además, se estimó el número de encuestas a aplicar, tomando en cuenta que la población es conocida y con un nivel de confianza determinado.

$$n = \frac{N * Z^2 * p * q}{d^2 * (N - 1) + Z^2 * p * q}$$

donde n es el tamaño de muestra, α es el nivel de confianza, Z^2_α es el valor crítico de tablas del área bajo la curva normal, p es la proporción aproximada del fenómeno en estudio en la población de referencia, q es la proporción de la población de referencia que no presenta el fenómeno en estudio ($1 - p$) y d es el nivel de precisión absoluta (referido a la amplitud del intervalo de confianza deseado en la determinación del valor promedio de la variable en estudio).

A los 35 reactivos de la encuesta, se les aplicó el análisis del coeficiente de Cronbach, con la finalidad de estimar la confiabilidad del instrumento de medición, a través de la siguiente ecuación.

$$\alpha = \frac{k}{k - 1} \left(1 - \frac{\sum_{i=1}^k S_i^2}{S_T^2} \right)$$

donde α es el coeficiente de Cronbach, k es el número total de reactivos de la encuesta, S_i^2 es la varianza de las puntuaciones por reactivo y S_T^2 es la varianza de la suma de puntuaciones por encuesta.

RESULTADOS

La encuesta para medir el grado de aceptación de las herramientas tecnológicas como recurso de enseñanza-aprendizaje, se aplicó a estudiantes la Universidad Autónoma de Nuevo León. Los encuestados pertenecen a de diferentes semestres y niveles educativos: preparatoria, licenciatura y posgrado.

El instrumento de medición estuvo integrado por 5 dimensiones, donde en cada dimensión se evaluaron las mismas 7 reactivos. Por lo tanto, un total de 35 preguntas evaluadas a través de una escala de Likert fue aplicada.

Se calculó el número de estudiantes a encuestar, tomando en cuenta un nivel de confianza del 95%, la proporción aproximada del fenómeno en estudio en la población de referencia fue 0.90, y el nivel de precisión absoluta fue de 0.05. Por lo tanto, se aplicaron 97 encuestas en total.

Con la finalidad de validar la confiabilidad del instrumento de medición, se calculó el alfa de Cronbach. El coeficiente de alfa de Cronbach fue de 0.918, lo cual indica que el instrumento tiene un algo grado de confiabilidad para utilizarse en la recolección de datos. Consecuentemente, la consistencia de los resultados obtenidos es muy alto.

La Figura 1, muestra que los estudiantes estimaron que la inteligencia artificial es la herramienta que permite una mejor interacción entre ellos y sus profesores (3.89), seguido de la realidad virtual (3.67). Los estudiantes opinaron que la realidad aumentada (3.52) y las aulas virtuales (3.51), apoyan la interacción en el aula de forma intermedia. Mientras que las herramientas tradicionales fueron las que los estudiantes creen que son las que menos favorecen la interacción estudiante-profesor (3.48).

En cuanto a las herramientas que ayudan al desarrollo de contenidos o temas impartidos por los docentes, los estudiantes opinaron que la mejor herramienta para ese fin es la inteligencia artificial (3.95). En segundo lugar, para los estudiantes la realidad virtual (3.76) y la realidad aumenta (3.75), los apoyarían de manera regular; mientras las aulas virtuales (3.56) y las herramientas tradicionales (3.44) les apoyarían poco.

Para los estudiantes, la inteligencia artificial (4.03) es la herramienta que más los motivaría en la elaboración de proyectos, actividades y el estudio. Otras herramientas que los motivaría de forma regular son la realidad aumentada (3.89) y la realidad virtual (3.88). En tanto que, las aulas virtuales (3.44) y las herramientas tradicionales (3.23), poco los motivaría en sus actividades escolares.

Con respecto a las herramientas que favorecen el aprendizaje, los estudiantes percibieron que en primer lugar está la realidad aumentada (4.08), seguida de la inteligencia artificial (4.04) y de la realidad virtual (3.99). En cambio, las aulas virtuales (3.60) y las herramientas tradicionales (3.20) son las que los estudiantes creen que menos los ayudan a aprender.

Por otra parte, los estudiantes juzgaron que las herramientas más intuitivas y de fácil manejo son la inteligencia artificial (4.00); seguidamente, se encuentran la realidad virtual (3.68) y las aulas virtuales (3.62). Según los estudiantes, la realidad aumentada (3.51) y las herramientas tradicionales (3.37) son las menos intuitivas.

Las herramientas que están al alcance de los estudiantes y de la institución son, en primer lugar, la inteligencia artificial (3.92) y las herramientas tradicionales (3.78). A continuación, los estudiantes establecieron en este rubro a las aulas virtuales (3.65), la realidad virtual (3.54) y por último la realidad aumentada (3.00).

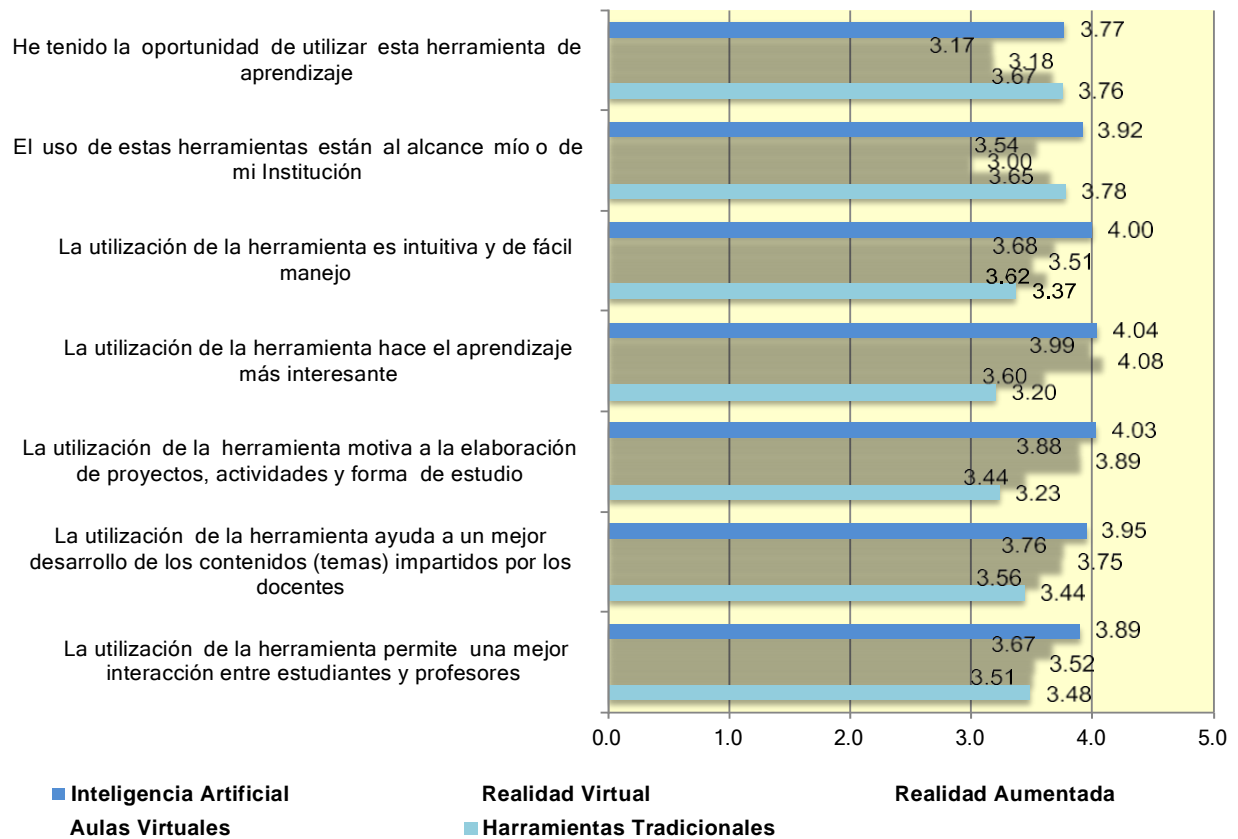


Figura 1. Puntaje de la utilización de la herramienta que permite una mejor interacción entre estudiantes y profesores.

Por lo que concierne a los recursos educativos que los estudiantes han podido utilizar, son las herramientas tradicionales (3.76) y la inteligencia artificial (3.77). Por el contrario, las que casi no han utilizado son las aulas virtuales (3.67), la realidad aumentada (3.18) y la virtual (3.17).

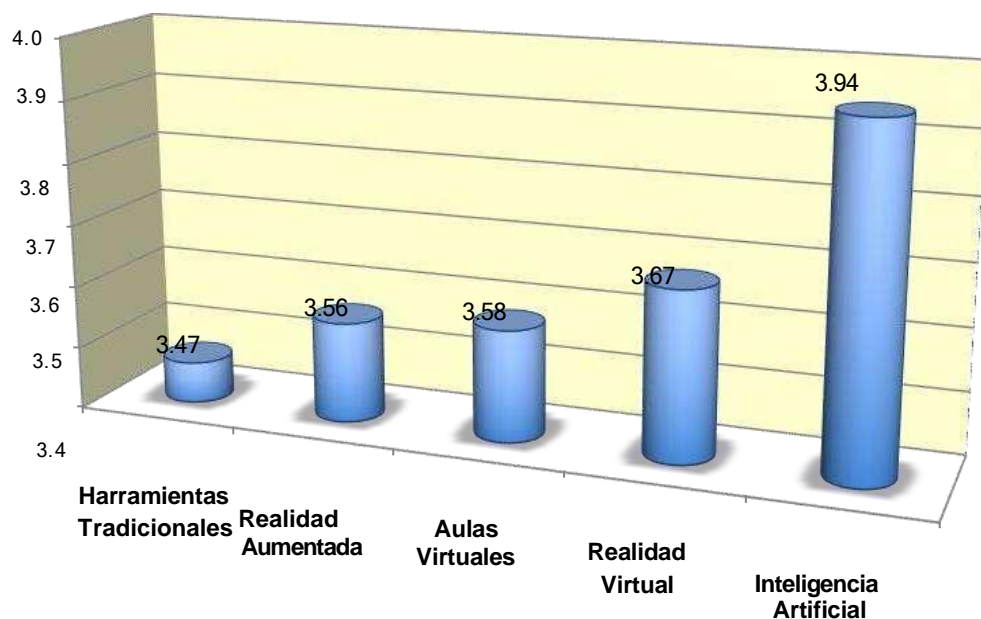


Figura 2. Puntaje global para cada herramienta tecnológica.

Por último, se observa en la Figura 2 que la inteligencia artificial (3.94) fue el recurso educativo mejor evaluado por los estudiantes para apoyarlos en su formación académica. A continuación, las herramientas evaluadas medianamente para asistirlos son la realidad virtual (3.67), las aulas virtuales (3.58) y la realidad aumentada (3.56). Las herramientas tradicionales (3.47), a pesar de ser las más utilizadas, los estudiantes opinaron que son el recurso educativo que menos los apoya en el aprendizaje.

CONCLUSIONES

En conclusión, los estudiantes opinaron que la inteligencia artificial seguida de la realidad virtual, son las herramientas que permiten una mejor interacción entre los estudiantes y profesores, que apoyan de mejor manera el desarrollo de los contenidos o temas impartidos por los docentes, que motivan para la elaboración de proyectos, actividades y el estudio, la que es la más intuitiva y de fácil manejo y están al alcance de los estudiantes y la institución. Asimismo, los estudiantes estimaron que la realidad aumentada seguida de la inteligencia artificial y la realidad virtual, son los recursos educativos que hacen más interesante el aprendizaje. Además, de las nuevas herramientas tecnológicas, la inteligencia artificial es la que los estudiantes han tenido la oportunidad de utilizar.

Finalmente, los avances tecnológicos están permitiendo el desarrollo de nuevas herramientas para el aprendizaje y, en ese sentido, la inteligencia artificial se presenta como una de las más aptas para mejorar el proceso educativo de los estudiantes.

AGRADECIMIENTOS

El equipo investigador agradece a los estudiantes Angélica María Garza Saucedo, Carlos Daniel Herrera López, Kevin Stuart González Ortiz y Valeria Margarita Lerma Medrano, por su participación en el desarrollo de la presente investigación; quienes están adscritos a la licenciatura de Ingeniero Industrial Administrador de la Facultad de Ciencias Químicas.

REFERENCIAS

- [1] Marquez, R. B. (2022). Las herramientas tecnológicas en el aprendizaje, un desafío en tiempos de pandemia. *LATAM Revista Latinoamericana de Ciencias Sociales y Humanidades*, 3(2), 784-794. <https://doi.org/10.56712/latam.v3i2.147>
- [2] UNESCO (2021, 13 octubre). La Inteligencia Artificial en la Educación. UNESCO. <https://es.unesco.org/themes/tic-educacion/inteligencia-artificial>
- [3] Sousa Ferreira, R., Campanari Xavier, R. A., & Rodrigues Ancioto, A. S. (2021). La realidad virtual como herramienta para la educación básica y profesional. *Revista Científica General José María Córdova*, 19(33), 223-241. <https://doi.org/10.21830/19006586.728>
- [4] Calvo, J. (2021). Lo que aporta la realidad aumentada a la educación. *Educación*, 3.
- [5] Berumen López, E., Acevedo Sandoval, S., & Reveles Gamboa, S. (2021). Realidad aumentada como técnica didáctica en la enseñanza de temas de cálculo en la educación superior. Estudio de caso. *RIDE. Revista Iberoamericana para la Investigación y el Desarrollo Educativo*, 11(22). <https://doi.org/10.23913/ride.v11i22.890>
- [6] Acosta, C., & Villegas, B. (2013). Uso de las aulas virtuales bajo la modalidad de aprendizaje dialógico interactivo. *Revista de Teoría y Didáctica de las Ciencias Sociales*, (19), 121-141.
- [7] Martínez-Garcés, J., & Garcés-Fuenmayor, J. (2020). Competencias digitales docentes y el reto de la educación virtual derivado de la covid-19: Digital teaching competences and the challenge of virtual education arising from COVID-19. *Educación y humanismo*, 22(39), 1-16. <https://doi.org/10.17081/eduhum.22.39.4114>

IMPLEMENTACIÓN DE SENSOR PERSONALIZADO PARA ALARMA DE HORNO EN INDUSTRIA CERÁMICA

IMPLEMENTATION OF CUSTOM SENSOR FOR OVEN ALARM IN CERAMIC INDUSTRY

Leal Rendón Nury Margarita¹, Bacre Guzmán Daniela del Carmen^{2*}, Martínez Mercado María de los Angeles³

^{1,2,3} *Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Departamento de Ingeniería Química, Ave. Universidad S/N, Cd. Universitaria, San Nicolás de los Garza N.L. México, C.P. 66455.*

**carmen.bacregz@uanl.edu.mx*

RESUMEN. La industria cerámica abarca la producción de una amplia gama de productos como vajillas, azulejos, vajillas y elementos decorativos, la cual, en la actualidad, debe ser caracterizada por su innovación tecnológica, sustentabilidad y presencia global. El proyecto fue llevado a cabo empleando la siguiente metodología propia: Identificación del problema, recolección de información, análisis de solución de problema, viabilidad de la solución e implementación de la solución. Esto sigue un enfoque sistemático, lo cual permitió comprender el funcionamiento de los equipos y el proceso productivo de manera detallada. Se establecieron rutinas de mantenimiento para asegurar el correcto funcionamiento del equipo. Se identificó que el horno presentaba la problemática de que los quemadores se apagaban con regularidad, lo cual resultaba en productos defectuosos debido a una cocción incompleta. Las posibles causas de la extinción de los quemadores pueden atribuirse a una mala calibración, falta de mantenimiento, desgaste por el uso continuo, etc. En la búsqueda por solucionar esta falla, se propuso instalar un sensor y una alarma personalizada en la empresa. Logrando con ello la reducción del desperdicio de gas que se ocasionaba al apagarse los quemadores, así como el aumento en la productividad del horno, al disminuir el desperdicio de materia prima por piezas defectuosas.

El objetivo del presente informe es exponer el trabajo realizado para una empresa del sector cerámico que enfrentaba un problema en su horno de decorado o fundente. Inicialmente, el horno contaba con una alarma que se activaba al detectar cualquier falla, la cual no está ya en funcionamiento, esta situación generaba que no se detectara de inmediato la baja de temperatura del horno afectando la calidad de los productos. En conclusión, el proyecto brindó una solución efectiva y contribuyó a optimizar el funcionamiento del horno y la calidad de los productos cerámicos.

Palabras clave: *Sensor, desperdicio, ecoeficiencia.*

ABSTRACT. The ceramic industry encompasses the production of a wide range of products such as pots, tiles, tableware and decorative elements, which, at present, must be characterized by its technological innovation, sustainability and global presence. The project was carried out using the following proprietary methodology: Problem identification, information gathering, problem solution analysis, solution feasibility, and solution implementation. This follows a systematic approach, which allowed understanding the operation of the equipment and the production process in detail. Maintenance routines were established to ensure the proper functioning of the equipment. The oven was identified as having a problem with the burners going out regularly, resulting in defective products due to

incomplete cooking. The possible causes of burner extinction can be attributed to poor calibration, lack of maintenance, wear due to continuous use, etc. In order to solve this failure, it was proposed to install a sensor and a personalized alarm in the company. Achieving with this the reduction of the waste of gas that was caused when the burners went out, as well as the increase in the productivity of the furnace, by reducing the waste of raw material due to defective parts.

The objective of this report is to expose the work carried out for a company in the ceramic sector that faced a problem in its decoration or flux furnace. Initially, the oven had an alarm that was activated when detecting any failure, which is no longer in operation. This situation meant that the drop in oven temperature was not immediately detected, affecting the quality of the products. In conclusion, the project provided an effective solution and contributed to optimizing the operation of the kiln and the quality of the ceramic products.

Key words: *Sensor, waste, eco-efficiency.*

INTRODUCCIÓN

El presente trabajo muestra los resultados de un proyecto llevado a cabo en una empresa del sector cerámico que presentaba una problemática con la calidad de sus pocillos de peltre, lo que ocasionaba que se tuvieran que re TRABAJAR piezas e incluso llevar a scrap una buena parte de las piezas defectuosas, como se mostrará en el desarrollo de este documento, esta situación se daba específicamente en el horno de cocido, el cual perdía temperatura sin que los operadores se dieran cuenta a tiempo, ocasionando que el proceso no concluyera satisfactoriamente. El proceso de producción cerámica ha adquirido una creciente relevancia debido a la necesidad de reducir el impacto ambiental y optimizar la eficiencia en el uso de recursos. Para lograr una producción cerámica sostenible y minimizar el desperdicio, se destacan dos conceptos fundamentales: la ecoeficiencia y la implementación de sensores.

La ecoeficiencia se concibe como una herramienta que busca generar cambios esenciales en la forma de producir y utilizar recursos. Esto implica implementar mejoras orientadas hacia la sostenibilidad, como el incremento del precio del producto o servicio, la optimización del uso de materias primas y la reducción de los impactos ambientales. El término ecoeficiencia fue acuñado por el industrial suizo Stephan Schmidheiny, en 1992 [1]. La ecoeficiencia se refiere a una estrategia para mejorar el valor de una organización al tiempo que se reduce el consumo de materiales y energía, y se consideran los residuos y emisiones de carbono [2]. Esta representa una opción para impulsar la innovación y transformar los procesos de producción en empresas, encaminándolas hacia un desarrollo sostenible. Aunque su implementación presenta desafíos, ofrece beneficios significativos que pueden traducirse en ventajas competitivas [3].

Por otro lado, dada la importancia de la gestión adecuada de residuos en el proceso cerámico, se debe considerar que estos suelen clasificarse como no reciclables, a excepción de su utilización como material de relleno. No obstante, investigaciones indican que los residuos cerámicos tienen el potencial de ser aprovechados en la producción de hormigón, aunque todavía faltan directrices y normativas al respecto [4]. El proceso de fabricación de cerámica es complejo, involucrando diversas sustancias inorgánicas que, a través de la cocción, se convierten en productos con características específicas tanto estéticas como técnicas. Actualmente, se han desarrollado tratamientos para gestionar las emisiones gaseosas, los desechos líquidos y la generación de residuos durante este proceso. Estos residuos, en algunas ocasiones, pueden reutilizarse como subproductos en

pequeñas cantidades debido a su similitud con las materias primas iniciales. El desperdicio en el proceso cerámico se refiere a la pérdida o mal uso de materias primas, energía y agua, así como la generación de subproductos no deseados. Esta problemática puede ocurrir en diferentes etapas del proceso, desde la extracción de las materias primas hasta la fabricación y acabado de los productos cerámicos. Además del impacto negativo en el medio ambiente, el desperdicio conlleva costos adicionales para las empresas. En el presente estudio, el desperdicio se enfoca en la etapa de acabado o vitrificación de pocillos de peltre [5].

En cuanto a los sensores, estos se definen como dispositivos que reaccionan ante estímulos físicos, como temperatura, luz, sonido, presión, magnetismo o movimiento, enviando señales para medir o controlar diversas variables. Estos dispositivos están presentes en diversos campos, como en las pistolas de radar que detectan vehículos en movimiento, en las alarmas antirrobo que utilizan fotosensores u ondas sonoras para detectar objetos en movimiento, o en localizadores de montantes utilizados por carpinteros para ubicar maderas detrás de paredes. Un sensor es un dispositivo que detecta una determinada acción externa, temperatura, presión, etc., y la transmite adecuadamente, estos pueden experimentar cambios en su resistencia cuando están sometidos a variaciones de temperatura, debido a la agitación térmica que ocasiona una dispersión de electrones, lo que a su vez reduce la velocidad y aumenta la resistencia del sensor. Los materiales más comunes utilizados en la fabricación de sensores son platino, níquel, cobre y molibdeno, mientras que la cerámica no se considera dentro de esta categoría. [6]. En la producción cerámica, los sensores desempeñan un papel crucial al monitorizar y controlar variables como temperatura, presión, humedad, pH y concentración de gases. Proporcionan datos en tiempo real que permiten ajustar las condiciones de producción y optimizar el rendimiento del proceso.

La combinación de ecoeficiencia y sensores se vislumbra como una vía prometedora para mejorar el proceso cerámico, tanto desde una perspectiva ambiental como económica. La optimización en el consumo de recursos, la reducción de residuos y emisiones, así como la mejora en la calidad del producto y la eficiencia energética, son algunos de los beneficios que se esperan obtener mediante la implementación de estos conceptos. De esta forma, al pensar en ecoeficiencia mediante el uso de sensores, se podrán desarrollar estrategias que promuevan la sustentabilidad y competitividad en la industria cerámica.

El objetivo del presente informe es exponer el trabajo realizado para una empresa del sector cerámico que enfrentaba un problema en su horno de decorado o fundente. Inicialmente, el horno contaba con una alarma que se activaba al detectar cualquier falla, la cual no está ya en funcionamiento, esta situación generaba que no se detectara de inmediato la baja de temperatura del horno afectando la calidad de los productos.

METODOLOGÍA

Una vez revisada la problemática, y conocido el proceso de manufactura del producto, el proyecto se desarrolló siguiendo una metodología propia:

Recolección de la información, se identificaron posibles causas que pudieran originar el problema de la incorrecta cocción de las piezas:

- Problemas con el termostato: un termostato defectuoso puede causar fluctuaciones en la temperatura del horno de cocido.

- Aislamiento deficiente: cuando el aislamiento no está bien sellado se puede perder calor.
- Falta de mantenimiento: cuando el horno y los quemadores no han sido limpiados regularmente se acumulan residuos que pueden bloquear la circulación del aire caliente, haciendo que se pierda calor en el horno.
- Problemas de ventilación: cuando la ventilación no es adecuada causa un desequilibrio en la circulación de aire caliente y puede causar zonas frías en el horno.
- Calibración incorrecta: si la calibración del equipo no es precisa la temperatura real puede diferir a la que muestra el indicador.
- Fatiga de los componentes electrónicos. El desgaste de los componentes electrónicos puede provocar fallos en los componentes, reducir su vida útil, causar ineficiencias en el funcionamiento del horno e incluso llevar a averías completas del sistema.
- Emisión de gas. La incorrecta emisión de gas puede afectar el suministro de oxígeno necesario para el proceso de combustión, disminuyendo la eficiencia del horno, lo que pudiera llevar a la liberación de productos no deseados o contaminantes en el aire.

Identificación del problema. El problema detectado se origina en el apagado inadvertido de los quemadores del horno durante el proceso de cocción. Los operadores no se percataban del apagado hasta después de que la temperatura necesaria para el cocimiento había disminuido considerablemente, esta falta de supervisión resultaba en numerosas piezas defectuosas debido al incorrecto curado del producto. Cabe mencionar que los operadores habían retirado una alarma previa debido al ruido constante que generaba por causas no agravantes al proceso, como problemas con el conveyer, piezas atoradas, etcétera.

Análisis de solución de problema Se analizaron y revisaron todas las posibles causas enlistadas en el punto anterior, se verificaron y se aseguró que funcionaran correctamente, gracias a esto se identificó que no se contaban con rutinas de mantenimiento correctamente establecidas.

Viabilidad de la solución e implementación de la solución: Se propusieron dos posibles soluciones:

Se propone implementar una solución mediante la instalación de termopares estratégicamente en diversas áreas del horno, con el objetivo de monitorear de forma continua la temperatura durante el proceso de cocción. Al detectar cualquier variación o fluctuación inusual en la temperatura, se activaría una alarma inmediata para alertar a los operadores sobre la situación. Sin embargo, para llevar a cabo esta solución, será preciso adquirir el equipo necesario, que en este caso incluye los termopares y el sistema de alarma. La compra e instalación de dicho equipo se plantea como una inversión para mejorar la supervisión y control del horno, asegurando una cocción adecuada de las piezas y evitando la aparición de defectos en el producto final, por lo que esta opción resulta más costosa.

Como segunda opción, se consideró la posibilidad de mantener el equipo actual y realizar modificaciones específicas en el programa del PLC existente, además de instalar una nueva alarma destinada únicamente al quemador. Después de una evaluación detallada, se

determinó que esta alternativa era la más viable y, por ende, fue seleccionada como la solución a implementar, con esta solución, se espera mejorar la supervisión y el control del proceso del quemador, lo que contribuirá a evitar interrupciones y garantizar un funcionamiento adecuado y seguro del horno. La elección de esta opción mejorara la eficacia, rentabilidad y capacidad para mejorar la calidad y la eficiencia en la operación.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Se procedió a instalar una alarma que se activa en el momento en que se detecta el apagado de alguno de los quemadores. Esta alarma es de tipo audiovisual y tiene una intensidad de 110 dB. El sistema de control del quemador envía una señal cada vez que se produce un apagado inesperado, lo que desencadena la emisión de un sonido y una luz intensa. Es importante destacar que esta alarma persiste de forma continua hasta que un operador acuda a restablecer la operación del quemador afectado.

Para la implementación de esta opción, se tomó una de las salidas del PLC Siemens S7511, y se realizó la programación utilizando el software de Siemens TIA Portal versión 15.1. La condición establecida en la programación permitió que cada vez que se detectara un apagado inusual del quemador o un falso encendido, se activara la alarma de manera inmediata, brindando una detección temprana de los problemas y asegurando una rápida respuesta del personal encargado.

La **Tabla I** presenta los resultados obtenidos posterior a la implementación de la alarma y la modificación al PLC, como puede observarse el mayor logro fue en la reducción del scrap, teniendo una disminución de las piezas inservibles en un 58.62%, mientras que la producción diaria se incrementó un 12.09% debido a que ya no debían esperar a que el horno alcanzara de nuevo la temperatura adecuada para el proceso, porque ahora la detección es inmediata, se corrige y ya no se pierde temperatura. En cuanto al consumo de gas hubo una reducción del 9.08%, que, si bien pudiera verse como algo bajo, es una contribución a la eficiencia energética, reducción de costos por consumo, así como a la emisión de gases.

Tabla I. Comparación de los resultados obtenidos antes y después de la implementación.

Concepto	Antes de la implementación	Después de la implementación	% Mejora
Producción diaria	9,100 piezas/día	10,200 piezas/día	12.09%
Gas por consumo mensual	24,304 m ³	22,098 m ³	9.08%
Calidad	6.28%	2.36%	62.42%
Scrap	2.9%	1.2%	58.62%

La **Figura 1** muestra de derecha a izquierda, los pocillos de peltre antes de entrar al horno, después del cocido con la calidad correcta y cuando salían del horno posterior a un horneado con la temperatura incorrecta, visiblemente defectuosos.



Figura 1. Pocillos antes y después del horneado.

CONCLUSIONES

El presente trabajo presenta como por medio de la implementación de una metodología propia, se identificó la causa de la incorrecta cocción de las piezas, la cual fue solucionado de forma económica al trabajar con equipo con el que ya se contaba, de manera tal que se tuvo una importante reducción en retrabajos y desperdicios, así como una mejora en la eficiencia energética, al disminuir el consumo del gas, la optimización en el consumo de recursos y la reducción de residuos permitirá obtener beneficios económicos y ambientales significativos.

En conclusión, la instalación de la alarma y modificación del PLC han demostrado ser una solución efectiva para reducir desperdicios, retrabajos y el gasto de gas, mejorando la calidad y eficiencia del proceso cerámico. La adecuada supervisión y control del horno mediante la detección temprana de problemas han contribuido a maximizar la producción y disminuir los costos operativos. La empresa de esta manera logra tener una práctica más sostenible, minimizando su impacto ambiental y optimizando el uso de recursos.

REFERENCIAS

- [1] Yucra Ramos, G. J. (2021). Revisión sistemática: ecoeficiencia de las tecnologías del tratamiento de aguas residuales domésticas en los últimos 10 años.
- [2] Merchán-Gómez, J. E., & Vegas-Meléndez, H. J. (2020). Importancia de la teoría de la ecoeficiencia en las organizaciones empresariales. *Polo del Conocimiento*, 5(10), 145-162.
- [3] Romero, M. M., Herrera, A. C., & Barboza, M. D. G. (2019). La ecoeficiencia en pequeñas y medianas empresas: retos y beneficios para un desarrollo sostenible. *Revista de Jóvenes Investigadores Ad Valorem*, 2(2), 83-97.
- [4] Zimbili, O., Salim, W., & Ndambuki, M. (2014). A review on the usage of ceramic wastes in concrete production. *International Journal of Civil, Environmental, Structural, Construction and Architectural Engineering*, 8(1), 91-95.
- [5] Isach Cuenca, A. (2022). Estudio técnico y económico de implantación de un sello RCS aprovechando los residuos generados por la industria cerámica en una empresa dedicada a la extrusión de láminas poliméricas (Doctoral dissertation, Universitat Politècnica de València)
- [6] Bustamante, O. A. P. (2019). Brazo y mano robótica para manipulación de objetos. Informe Proyecto de Título de Ingeniero Civil Electrónico. Escuela de Ingeniería Eléctrica Facultad de Ingeniería.

IMPACTO DEL AMBIENTE DE TRABAJO SIMULADO (SWE) EN EL APRENDIZAJE DE ESTUDIANTES DE INGENIERÍA INDUSTRIAL

IMPACT OF THE SIMULATED WORK ENVIRONMENT (SWE) ON THE LEARNING OF INDUSTRIAL ENGINEERING STUDENTS

Elva Patricia Puente Aguilar*, Azucena Minerva García León, Leonardo Gabriel Hernández Landa, Patricia Gómez Fuentes, Argelia Vargas Moreno

¹Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Departamento de Ingeniería Industrial y Administración, Ave. Universidad S/N, Cd. Universitaria, San Nicolás de los Garza N.L. México, C.P. 66455.

*elva.puenteagl@uanl.edu.mx

RESUMEN. El Ambiente Simulado de Trabajo (SWE) es un entrenamiento donde se aplican diversas técnicas de Manufactura Esbelta en una línea de producción simulada. La presente investigación tuvo como objetivo analizar el impacto de este entrenamiento en los alumnos de noveno semestre de la carrera de Ingeniero Industrial Administrador que realizan esta actividad como práctica en el Laboratorio de Manufactura Esbelta. Se construyeron dos encuestas a fin de evaluar el grado de conocimiento, antes y después de la práctica de laboratorio, con respecto a diversas metodologías de Manufactura de Clase Mundial como 5's, trabajo estándar, control visual, 8 desperdicios, takt time, valor agregado, entre otras; así como identificar los factores que inciden en el desempeño físico durante la actividad. Se calculó la cantidad de encuestas a aplicar, de acuerdo con un margen de error del 10% y un nivel de confianza del 90%. Los resultados de las encuestas mostraron que la mayoría de los alumnos contaban con materiales suficientes en la práctica (80%) y que los objetivos fueron claramente explicados (88%). Se observó que hubo una disminución en la motivación después de la práctica, pero el grado de aprendizaje se mantuvo alto. En relación con el desempeño de los líderes de equipo (Team Leads) y el gerente de sección (Section Manager), fueron evaluados positivamente en cuanto a su motivación, conocimiento, capacidad para explicar y capacidad para retroalimentar a los estudiantes. Se observó una mejora significativa en la comprensión de los conceptos teóricos relacionados con la manufactura esbelta, después de la práctica. Algunos factores que afectaron a los estudiantes durante la práctica fueron el cansancio, sueño, hambre, ruido y temperatura. En conclusión, se confirmó que el Ambiente Simulado de Trabajo (SWE) es efectivo para la adquisición y aplicación de los temas de Manufactura Esbelta en los estudiantes de Ingeniería Industrial y Administración.

Palabras clave: Manufactura esbelta, SWE, Estudiantes, Ingeniería.

ABSTRACT. The Simulated Work Environment (SWE) is a training where different Lean Manufacturing techniques are applied in a simulated production line. The objective of this research was to analyze the impact of this training on the ninth semester students of the Industrial Engineering with minor in Management program who carry out this activity as a practice in the Lean Manufacturing Laboratory. Two surveys were conducted in order to evaluate the degree of knowledge, before and after the laboratory practice, with respect to diverse methodologies of World Class Manufacturing such as 5's, standard work, visual control, 8 wastes, takt time, added value, among others; as well as to identify the factors that affect the physical performance during the activity. The number of surveys to be applied was calculated according to a margin of error of 10% and a confidence level of 90%. The results of the surveys showed that most of the students had sufficient materials in practice (80%) and that the objectives were clearly explained (88%). It was observed that there was a decrease in motivation after the practice, but the degree of learning remained high. In relation to the performance of the Team Leads and the Section Manager, they

were evaluated positively in terms of their motivation, knowledge, ability to explain and ability to provide feedback to the students. A significant improvement in the understanding of the theoretical concepts related to lean manufacturing was observed after the training. Some factors that affected the students during the practice were fatigue, sleepiness, hunger, noise and temperature. In conclusion, the study confirmed that the Simulated Work Environment (SWE) is effective for the acquisition and application of Lean Manufacturing topics in Industrial Engineering and Management students.

Keywords: *Lean Manufacturing, SWE, students, engineering.*

INTRODUCCIÓN

Se ha demostrado que el cerebro tiende a ignorar los aprendizajes cuando estos no son utilizados o vinculados, integrándolos durante y después de un proceso de formación [1]. Es por ello que la aplicación de los conocimientos teóricos aprendidos en el estudio de una carrera universitaria se lleva a cabo muchas veces en laboratorios, donde se realizan experimentos, prácticas y trabajos, con el objetivo de representar o acercarse a la realidad del mercado laboral [2].

Para que los estudiantes pongan en práctica el concepto teórico estudiado en el aula, la Facultad de Ciencias Químicas estableció un acuerdo de colaboración con el sector productivo para instalar un simulador de ambiente de trabajo como parte del Laboratorio de Manufactura Esbelta, con el objetivo de brindar a los estudiantes una experiencia similar a un ambiente de trabajo real en una planta de una empresa automotriz. De acuerdo con [3], el uso de un simulador promueve el aprendizaje activo, donde los estudiantes son los protagonistas del proceso de enseñanza-aprendizaje, de esta manera el aprendizaje se vuelve significativo, dado que los estudiantes son quienes asimilan, seleccionan y organizan nueva información para establecer relaciones con el conocimiento adquirido previamente de manera teórica en un aula de clase [4].

Durante la simulación, los alumnos trabajan de forma colaborativa, asumiendo distintos roles y proponiendo alternativas de solución, así como oportunidades de mejora. Por lo tanto, los procesos de aprendizaje de los estudiantes no se generan solos, sino que forman parte de una actividad social interactuando con otros estudiantes. Gracias a la realización de esta actividad colaborativa, el proceso de enseñanza-aprendizaje se vuelve más activo, dinámico, interesante, comprometido y significativo [5].

El Ambiente de Trabajo Simulado (SWE) del Laboratorio de Manufactura Esbelta tiene como objetivo fortalecer la formación práctica especializada de los estudiantes del noveno semestre de la carrera de Ingeniería Industrial y Administración. Los alumnos realizan prácticas de laboratorio para aprender de forma activa y significativa en condiciones reales similares a las de la industria automotriz, aplicando diversas técnicas y herramientas de su clase Manufactura de Clase Mundial.

Las técnicas de Manufactura Esbelta [6] fueron desarrolladas por los japoneses después de la Segunda Guerra Mundial en la compañía Toyota Motor Company. Algunos de los objetivos de implementar esta metodología conocida en inglés como Lean Manufacturing son: incrementar la productividad, mejorar la calidad, acortar los tiempos de entrega y reducir costos, entre otros. El éxito del llamado Toyota Production System (TPS) [7] demuestra que las técnicas de manufactura esbelta son poderosas y efectivas, es por ello por lo que un ambiente de trabajo simulado, donde los estudiantes de ingeniería aplican estas técnicas de manera práctica, es de gran valor en su formación.

El objetivo principal de este estudio es evaluar el grado de conocimiento, aprendizaje y experiencia de los estudiantes de Ingeniería Industrial en las herramientas de manufactura esbelta y de clase mundial al realizar la simulación en el SWE. Adicionalmente, se analizaron

factores que podrían influir en el aprendizaje como factores físicos, ambientales y sociales con el fin de determinar la utilidad de la práctica en la formación de los estudiantes.

METODOLOGÍA

Para este estudio como primer paso se determinó realizar una recopilación de datos cuantitativos para lo cual se diseñaron dos encuestas como instrumentos de medición con el objetivo de analizar el grado de conocimiento de los estudiantes y los factores que influyen en el aprendizaje antes y después de realizar la práctica en el ambiente de trabajo simulado. La primera encuesta se denominó “de entrada” y midió el nivel de conocimiento antes de la práctica. La segunda encuesta denominada “de salida” midió el nivel de conocimiento después de la práctica, así como algunos factores que influyeron en el grado de aprendizaje durante la simulación.

La encuesta de entrada se dividió en dos secciones, la primera relacionada con datos demográficos como edad, género, grado académico, etc. además del nivel de conocimiento para cada tema. La encuesta indaga sobre el conocimiento y la experiencia en la aplicación de los temas de manufactura de clase mundial a través de un cuestionario de autoevaluación utilizando la escala de Likert [8], la cual es una de las escalas más utilizada en instrumentos de medición.

Los temas de Manufactura Esbelta abordados en la encuesta incluyen: 5´S, 8 desperdicios, valor agregado, flujo de una pieza, andon, justo a tiempo, validación de procesos, trabajo estándar, lead time, balanceo de líneas, kanban, parar y arreglar, kaizen, seguridad primero, control visual, takt time, jalar, poka yoke, TPM, y mapa del flujo de valor [6].

La encuesta de salida se dividió en tres secciones, la primera parte explica el propósito de la encuesta e indaga sobre los datos personales y el rol del estudiante durante la práctica en el SWE. La segunda sección indaga sobre los conocimientos y aprendizajes adquiridos durante el entrenamiento en el SWE a través de un cuestionario de autoevaluación sobre los temas de manufactura esbelta mencionados anteriormente.

La encuesta de salida también incluyó una tercera sección para el análisis de factores físicos y ambientales que afectan al estudiante durante la práctica en el SWE que pueden influir en el desempeño y el aprendizaje del estudiante. Estos factores incluyeron: 1. Elementos de laboratorio, 2. Ambiente, 3. Condición física (antes de iniciar la práctica de laboratorio), 4. Condición física (durante la práctica en el SWE), 5. Jefe de equipo y Capacidad del jefe de sección, 6. Eficiencia en el aprendizaje.

Para determinar la muestra del estudio se consideró una población total de 192 estudiantes que conforman la totalidad de los estudiantes inscritos en la clase de Manufactura de Clase Mundial de noveno semestre de la carrera Ingeniero Industrial Administrador en el semestre Enero-Junio 2023. Se calculó la cantidad de encuestas a aplicar, de acuerdo con un margen de error del 10% por posibles inasistencias a la práctica, un nivel de confianza del 90% y con una desviación estándar de 0.5 de la población, dado que no se conoce, obteniendo una muestra requerida de 51 estudiantes para el análisis de datos.

Las encuestas se desarrollaron y distribuyeron a través de la plataforma Google Forms [9] a los estudiantes programados para acudir a la práctica durante los meses de marzo, abril y mayo de 2023.

Finalmente, se realizó una prueba t-Student pareada [8] con la finalidad de comprobar, al 95% de confianza, que el aprendizaje fue significativo; asimismo, se procesaron y analizaron las respuestas obtenidas, se realizaron tablas y gráficas y se obtuvo el informe final de resultados.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Para la obtención de los resultados, la encuesta de entrada fue aplicada antes de la práctica y la de salida después de la práctica de laboratorio, las respuestas se registraron a través de la escala

Likert, que va de 1 a 5 en el nivel de conocimiento: 1 no conozco el tema; 2 estoy relacionado con el concepto; 3 lo conozco bien, pero no le he practicado; 4 lo conozco bien y lo he practicado; 5 tengo un certificado, curso, etc. La aplicación de la encuesta se realizó antes y después de la práctica, a través de la plataforma Google Forms, Además se les preguntó sobre aspectos físicos que pudieron haber afectado su desempeño y retención de aprendizaje durante la práctica.

Se obtuvo la respuesta de 65 estudiantes. Del total, el 40% de los estudiantes fueron mujeres y 60% fueron hombres. Además, el 91 % de los encuestados está realizando prácticas profesionales o trabaja, por lo que el 9 % restante, únicamente estudia la universidad.

La Figura 1 muestra la comparación de las autoevaluaciones promedio, del total de estudiantes, por cada tema de manufactura esbelta antes y después de la práctica de laboratorio en el SWE.

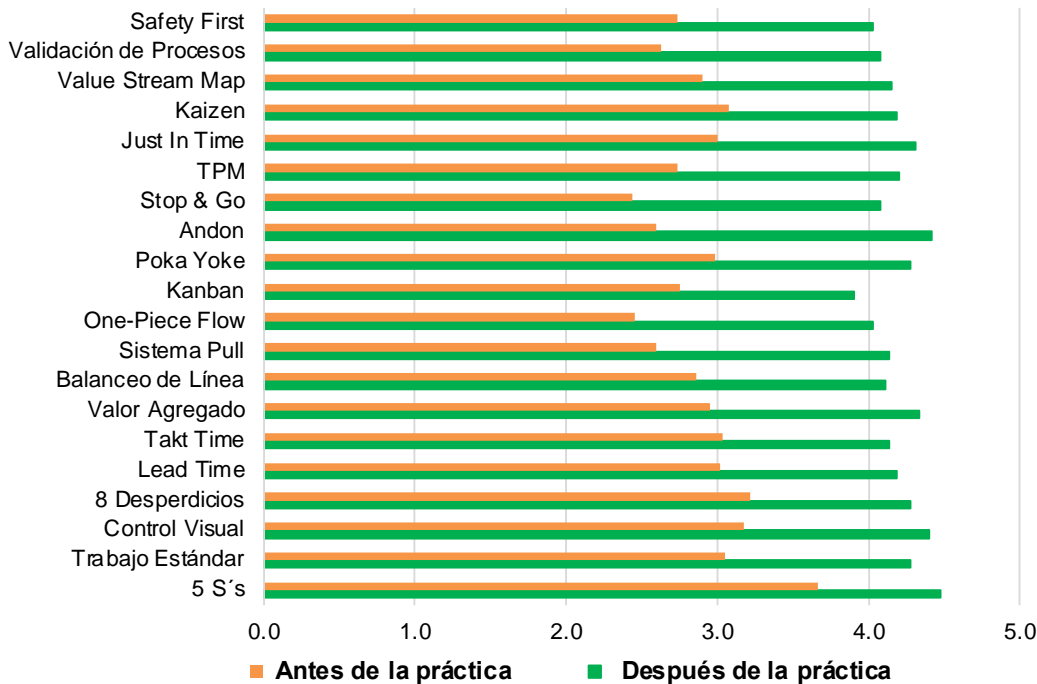


Figura 1. Evaluación promedio del total de estudiantes por tema, antes y después de la práctica de laboratorio en el SWE.

Como ejemplo del aprendizaje en los temas evaluados, se observa que los estudiantes tienen un mayor conocimiento sobre el tema de las 5'S antes de la práctica (3.67), por lo que el incremento de conocimiento fue del 22% (de 3.66 a 4.48).

Adicionalmente en la Figura 2, se observa la comparación de las evaluaciones promedio por estudiante, del total de temas de manufactura esbelta, entre antes de iniciar y después de concluida la práctica de laboratorio en el SWE. Se evidencia, que el promedio general de conocimientos sobre los temas de manufactura esbelta es mayor al finalizar la práctica (4.20) que al inicio (2.91) de la misma; siendo un importante incremento de conocimiento general.

Asimismo, se realizó una prueba t-Student pareada al 95% de confianza, con la finalidad de comprobar que el aprendizaje de los temas de manufactura fue significativo, entre el inicio y el fin de la práctica de laboratorio por estudiante. La prueba indicó que las diferencias de promedios aparejados de las evaluaciones por estudiante de los temas, entre antes y después de la práctica, son estadísticamente significativos ($p < 0.05$). Por consiguiente, se comprueba la eficacia de las prácticas de laboratorio a fin de afianzar y fortalecer los temas de manufactura esbelta, tanto teórica como práctica.

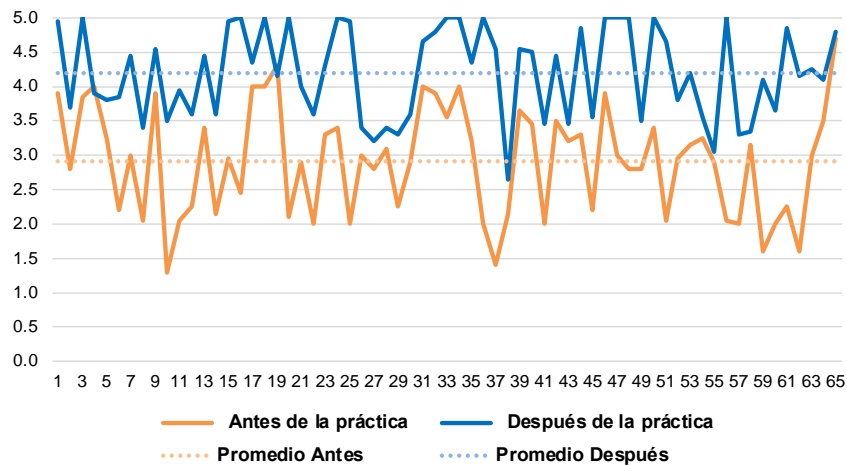


Figura 2. Evaluación promedio del total de temas por estudiante, antes y después de la práctica de laboratorio en el SWE.

Por otra parte, con base en la literatura analizada previamente, se estudiaron los factores de mayor relevancia que pudieran afectar el desempeño de aprendizaje de los estudiantes durante la práctica de laboratorio en el SWE, tales como motivación, cansancio, sueño y hambre.

Los resultados muestran, en la Figura 3, que el 43% de los estudiantes llegaron motivados a la práctica; sin embargo, la práctica motivó a los estudiantes de forma significativa, por lo que el 97% de ellos salieron motivados para aplicar los conocimientos aprendidos durante la práctica. La motivación tuvo un efecto bienestar en los estudiantes, por lo que el porcentaje de estudiantes cansados disminuyó de 43% a solo el 26%, después de 8 horas de práctica de laboratorio.

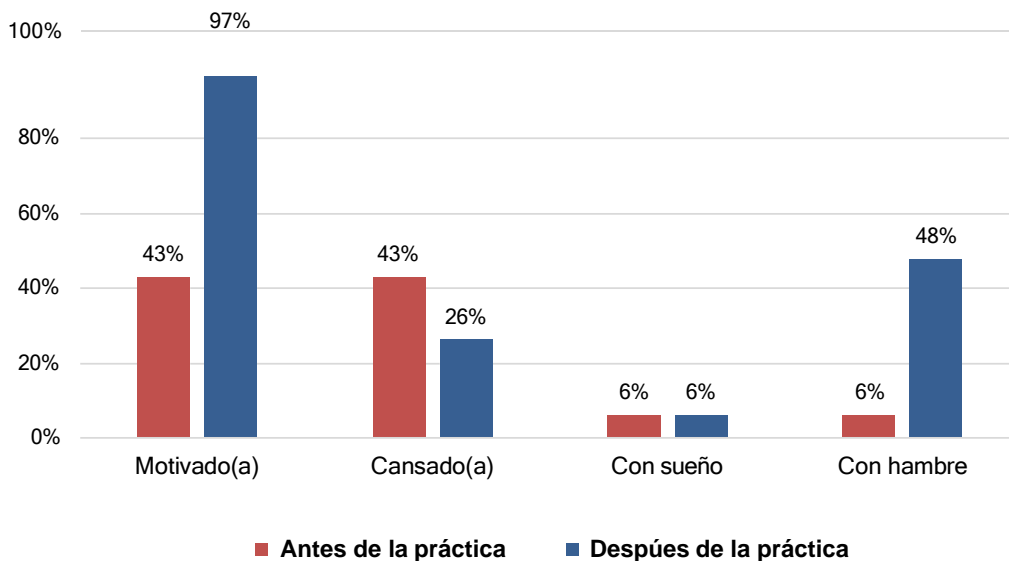


Figura 3. Porcentaje de estudiantes con condiciones particulares, antes y después de la práctica de laboratorio en el SWE.

El sueño no fue un factor que influyó en el desempeño de los estudiantes durante la práctica, dado que únicamente el 6% lo presentó antes y durante el laboratorio. La cantidad de estudiantes con hambre, aumento conforme transcurrió la práctica, al inicio sólo lo presentaba el 6% y aumentó a 48%.

CONCLUSIONES

En conclusión, la encuesta aplicada antes y después de la práctica de laboratorio en el SWE reveló mejoras significativas en los conocimientos de los estudiantes sobre los temas de Manufactura Esbelta. Se observó un aumento considerable en el conocimiento de los temas menos conocidos (42 al 70 %). Los temas con conocimiento intermedio mostraron incrementos menores (43 al 47 %). Por otro lado, los temas que los estudiantes dominaban antes de la práctica también experimentaron mejoras, aunque más moderadas (33 al 44 %). Además, se confirmó estadísticamente la eficacia de las prácticas de laboratorio para fortalecer los conocimientos tanto teóricos como prácticos de Manufactura Esbelta.

Por otra parte, se encontró que la motivación de los estudiantes aumentó significativamente después de la práctica de laboratorio (43 a 97%) para aplicar los conocimientos adquiridos. El sueño no tuvo un impacto significativo en el rendimiento de los estudiantes durante la práctica. Sin embargo, el hambre afectó a un número creciente de estudiantes a medida que avanzaba la práctica (6 al 48 %).

Finalmente, estos hallazgos destacan la importancia de las prácticas de laboratorio en el SWE para mejorar los conocimientos de los estudiantes sobre Manufactura Esbelta y resaltan la necesidad de considerar factores como la motivación y el hambre para optimizar el rendimiento y la retención del aprendizaje durante estas prácticas.

REFERENCIAS

- [1] Jerez Yáñez, O. (2015) Aprendizaje activo, diversidad e inclusión. Enfoque, metodologías y recomendaciones para su implementación. Recuperado de <https://repositorio.uchile.cl/handle/2250/136742>
- [2] Franky, G. A. Laboratorios reales versus laboratorios virtuales, en la enseñanza de la física. El hombre y la Máquina, 2009, (33), 82-95.
- [3] López Guede, J. M., Ramos, J. A., Apiñaniz, E., Mesanza, A., & Delgado, R. (2018). Aprendizaje activo y cooperativo en el Área de Informática Industrial. Recuperado de <https://dialnet.unirioja.es/servlet/articulo?codigo=8601978>
- [4] Cáliz, A. B. (2011). Metodologías activas y aprendizaje por descubrimiento. Revista digital innovación y experiencias educativas, 7. Recuperado de https://archivos.csif.es/archivos/andalucia/ensenanza/revistas/csicsif/revista/pdf/Numero_40/ALEJAN_DRA_BARO_1.pdf
- [5] Zuluaga-Ramírez, C. M., & Aguirre-Henao, A. M. Actividades prácticas del grupo GEIO automatizadas en la Celda Manufactura Flexible. Entramado, 2014, 10(1), 340-352.
- [6] Womack, J. E., & Jones, D. B. Lean thinking—Banish waste and create wealth in your corporation. Journal of the Operational Research Society, 1997; 48(11), 1148. <https://doi.org/10.1038/sj.jors.2600967>
- [7] Liker, Jeffrey K. 2004. *Toyota Way: 14 Management Principles from the World's Greatest Manufacturer*. 1st ed. New York: McGraw-Hill Education. <https://www.accessengineeringlibrary.com/content/book/9780071392310>
- [8] Hernández-Sampieri, R., Collado, C. F., y Lucio, P. B. (2014). Metodología de la investigación (6ª ed.). McGraw-Hill Education.
- [9] Google Forms <https://docs.google.com/forms/>



VII CONGRESO INTERNACIONAL DE
QUÍMICA E INGENIERÍA VERDE

EJE TEMÁTICO 10

ADMINISTRACIÓN Y NEGOCIOS SUSTENTABLES



PERCEPCIÓN DE LOS ESTUDIANTES EN LA IMPLEMENTACIÓN DE POLÍTICAS DE RESPONSABILIDAD SOCIAL UNIVERSITARIA EN INSTITUCIONES DE EDUCACIÓN SUPERIOR

STUDENTS' PERCEPTION ON THE IMPLEMENTATION OF UNIVERSITY SOCIAL RESPONSIBILITY POLICIES IN HIGHER EDUCATION INSTITUTIONS

Ruth Isela Martínez Valdez¹, Katia Site Pérez Martínez², Ana Irene Cuevas Gutiérrez³,
Dora Ivonne Martínez Valdez⁴, Judith Irasema Martínez Valdez^{5*}

^{1,4,5} *Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Departamento de Ingeniería Química, Ave. Universidad S/N, Cd. Universitaria, San Nicolás de los Garza N.L. México, C.P. 66455.*

² *Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Contaduría Pública y Administración, Ave. Universidad S/N, Cd. Universitaria, San Nicolás de los Garza N.L. México, C.P. 66455.*

³ *Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Psicológica, Dr. Carlos Canseco #110, Esq., Con Dr. Aguirre Pequeño. Col. Mitras Centro, C.P. 64460*

**risela_martinez@yahoo.com.mx*

RESUMEN. En el entorno actual de las Instituciones de Educación Superior (IES) se están implementando políticas de responsabilidad Social Universitaria (SU) que están redefiniendo la estructura tradicional y la proyección social solidaria, además se está integrando un enfoque global que cuida los aspectos que impactan los procesos académicos y administrativos de las universidades, estos aspectos son la dignidad de la persona, el medioambiente y el desarrollo sostenible. El objetivo de este estudio es determinar si existe una diferencia significativa en la implementación de políticas de Responsabilidad Social Universitaria (RSU) desde la percepción del estudiante en Instituciones de Educación Superior (IES). Esta investigación tiene un enfoque cuantitativo, no experimental y transversal, se elaboró un instrumento de medición el cual se aplicó a una muestra no probabilística de 300 hombres y mujeres que al momento de la aplicación de la encuesta estudiaban en tres Instituciones de Educación Superior en el Área de Metropolitana de Monterrey. Los resultados obtenidos nos muestran que en la actualidad existe una diferencia significativa en la implementación de políticas de responsabilidad Social Universitaria entre las IES que se estudiaron.

Palabras clave: *Responsabilidad social universitaria, dignidad de la persona, desarrollo sostenible*

ABSTRACT. In the current environment, higher education institutions are implementing policies of University Social Responsibility (USR) that are redefining the traditional structure and social solidarity projection, as well as integrating a global approach of care in aspects that impact the academic and administrative processes of universities such as the dignity of the person, sociability and solidarity, and the environment and sustainable development. The objective of this study is to determine if there is a significant difference in the implementation of university social responsibility policies from the perception of students in higher education institutions. The present research has a quantitative, non-experimental and transversal approach, a measurement instrument was elaborated and applied to a probabilistic sample of 300 men and women studying in three institutions of higher education in the Metropolitan Area of Monterrey. The results obtained show that there is currently a significant difference in the implementation of university social responsibility policies among the HEIs studied.

Keywords: *University social responsibility, personal dignity, sustainable development*

INTRODUCCIÓN

En la actualidad, las instituciones de educación superior (IES) han experimentado una evolución en el contexto social, fomentando estrategias que se ajusten a los objetivos de la institución, que reflejen los beneficios para la sociedad y los stakeholders. Además, implementar políticas de Responsabilidad Universitaria le permite obtener certificaciones, premios que cultivan un comportamiento ético, sustentable, de respeto al medio ambiente y de carácter igualitario [1]. La idea de responsabilidad social surge en el ámbito empresarial a raíz de una demanda por establecer conductas éticas y leales dentro de la organización y, con ello, cumplir no solo con los objetivos de la organización, sino también con los requerimientos de sus clientes, accionistas y, con ello, asegurar un bienestar óptimo para la población [2]. Se deriva del término Responsabilidad Social (RS) del término Responsabilidad Social Corporativa (RSC), Responsabilidad Social Universitaria (RSU) [3] de este último se centrará esta investigación.

El objetivo de esta investigación es determinar si existe una diferencia significativa en la implementación de políticas de Responsabilidad Social Universitaria (RSU) en función de la percepción de los estudiantes de dos Instituciones de Educación Superior (IES)

METODOLOGÍA

La RSU sostiene que, para alcanzar el equilibrio expuesto anteriormente, es necesario formar a los estudiantes que valoren los principios y virtudes democráticos, así como desarrollar habilidades que le permitan desempeñarse de manera adecuada su labor [5] El concepto de RSU se define como el compromiso que la institución tiene para difundir e implementar un conjunto de conocimientos y valores en la formación profesional, en los procesos de investigación, innovación y proyección social, y que deben estar enfocados en la solución de problemas sociales [6]. Asimismo, las IES en un contexto humanista se inquietan por establecer dentro de sus programas educativos elementos que fortalezcan las relaciones cordiales y afectuosas entre todos los integrantes de estas instituciones y, con ello, protegen la dignidad de las personas. Estas acciones convierten a las universidades en una comunidad comprometida con el respeto al medio ambiente y el desarrollo sostenible [7]. En relación con lo anterior, la Universidad Católica de Temuco realizó una encuesta a 206 estudiantes, de los cuales el 40% no piensa que su universidad pueda llevar a cabo programas que protegen la dignidad de la persona, en cambio, en temas de medioambiente y desarrollo sostenible, el 36% está de acuerdo con los programas para esta variable que lleva a cabo su universidad [8]. Además, se llevó a cabo un estudio en la Universidad Nacional del Centro del Perú en relación con la percepción de las variables dignidad de la persona y medio ambiente y desarrollo sostenible. Se llevó a cabo una encuesta a 474 individuos y se obtuvieron los siguientes datos. En relación con la dignidad de la persona, el 41.5% se encuentra parcialmente de acuerdo con los programas implementados por la universidad. En relación con la variable de medioambiente y desarrollo, el 49.7% respondió que se encontraba parcialmente de acuerdo [9].

Con relación a lo encontrado se formularon las siguientes hipótesis:

H¹. Existe una diferencia significativa entre los estudiantes de una universidad pública y los estudiantes de una universidad privada en la implementación de programas de Responsabilidad Social Universitaria (RSU) en cuanto a la dignidad de la persona.

H. Existe una diferencia significativa entre los estudiantes de una universidad pública y los estudiantes de una universidad privada en la implementación de programas de Responsabilidad Social Universitaria (RSU) en cuanto al medioambiente y el desarrollo sostenible.²

Para llevar a cabo esta investigación, se encuestó a 144 estudiantes de nivel universitario de una prestigiosa universidad pública y a 156 estudiantes de una universidad privada. La investigación se centra en un enfoque descriptivo, no experimental y enfoque transversal, la muestra no es probabilística, ya que las encuestas se aplicaron de forma no aleatoria. A continuación, se aplicó un instrumento de medición denominado "Encuesta de percepción de Responsabilidad Social Universitaria", que consta de dos secciones: la primera se centra en el tipo demográfico y la segunda en ítems de las variables de estudio. Se utilizó una escala de Likert de cinco puntos que oscila entre 1.-totalmente de acuerdo hasta 5.-totalmente en desacuerdo [8].

Se llevó a cabo una prueba piloto con 60 individuos y se examinaron los elementos fundamentales para determinar la relación entre variables, el instrumento original contiene 11 ítems para las dos variables, no se eliminó ningún ítem, quedando 6 ítems para la dignidad como persona y 5 para el desarrollo sostenible. Se evaluó la fiabilidad del instrumento y se obtuvieron los Alfa de Cronbach por variable y total del instrumento mediante el software Statistical Package for Social Sciences (SPSS) v21. Los resultados obtenidos fueron: $\alpha = 0.856$ para la dignidad de la persona; $\alpha = 0.943$ para el medio ambiente y el desarrollo sostenible, y $\alpha = 0.921$. Se ha recopilado la información durante un lapso temporal comprendido entre mayo y junio de 2023, mediante la creación de una encuesta digital en la plataforma Microsoft Forma. A continuación, se aplicó la aplicación enviando una liga para ser respondida por los sujetos de estudio. En última instancia, se obtuvieron 300 respuestas, de las cuales 144 fueron estudiantes de una universidad pública y 156 de una universidad privada, con este número de encuestados se establece un equilibrio para evitar sesgos en los resultados.

Se evaluaron los datos de media, desviación estándar y valores mínimo y máximos (Tabla I) de toda la población en relación con la percepción de los participantes que respondieron a cada una de las variables con una escala de Likert de 5, en la cual 1 es completamente de acuerdo y 5 es completamente en desacuerdo. Se puede apreciar que la media de las dos variables está de acuerdo con lo que se discutió, ya que en la variable de dignidad como persona en la universidad pública se encuentra de 1.62 y en la universidad privada se encuentra de 1.59. En cuanto al resultado en la variable medioambiente y desarrollo sostenible en la universidad pública, el resultado fue de 1.91 y en la universidad privada fue de 1.82. Tenían una diferencia mínima y están de acuerdo.

Tabla I. Media entre la universidad pública y la universidad privada y las variables

		N	Media	Desviación típica
Dignidad como persona	Universidad Pública	144	1.6273	.72635
	Universidad Privada	156	1.5919	.60827
	Total	300	1.6089	.66666
Medioambiente y desarrollo sostenible	Universidad Pública	144	1.9167	.87306
	Universidad Privada	156	1.8269	.71557
	Total	300	1.8700	.79499

Se llevó a cabo la evaluación de los supuestos fundamentales del ANOVA: normalidad y homocedasticidad, características que garantizan la validez de la prueba. Con el propósito de corroborar la normalidad, se llevó a cabo la prueba de Kolmogórov-Smirnov con el nivel de significancia $p > 0.05$, lo cual demostró que existe una distribución normal. Se llevó a cabo un análisis de Levene con el fin de determinar si los datos exhiben homocedasticidad. Se obtuvo para la dignidad de una persona $p = 0.911$ y para el bienestar de la población $p = 1.025$ $a > 0.05$. Estos hallazgos indican que los datos tienen variaciones similares. Se examinaron los datos utilizando la aplicación SPSS v21.

En la tabla II se encuentra la tabla ANOVA, en la que se extrajo el promedio de las variables y, con este promedio, se calculó una única variable o escala sumada para llevar a cabo el análisis de la dignidad como persona, con lo cual se rechaza la H1. Existe una diferencia significativa entre las percepciones de los estudiantes de una universidad pública y los estudiantes de una universidad privada en la adopción de programas de Responsabilidad Social Universitaria (RSU) en relación con la dignidad de la persona. Con respecto a la variable medioambiente y desarrollo sostenible se obtuvo $p = 0.329$, por lo que se rechaza la **H2**. Existe una diferencia significativa en la percepción de estudiantes de una universidad pública y estudiantes de una universidad privada en la implementación de programas de Responsabilidad Social Universitaria (RSU) con respecto al medioambiente y el desarrollo sostenible. Valores para $p < 0.05$.

Tabla II. ANOVA de un factor

		Suma de cuadrados	gl	Media cuadrática	F	Sig.
Dignidad como persona	Inter-grupos	.094	1	.094	.211	0.646
	Intra-grupos	132.793	298	.446		
	Total	132.887	299			
Medioambiente y desarrollo sostenible	Inter-grupos	.603	1	.603	.954	0.329
	Intra-grupos	188.367	298	.632		
	Total	188.970	299			

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Los hallazgos obtenidos en la investigación evidencian que las percepciones de los estudiantes de una universidad pública y de una universidad privada en cuanto a la Responsabilidad Social Universitaria (RSU) no tienen una diferencia significativa en las variables de dignidad como persona y medioambiente y el desarrollo sostenible, con los resultados obtenidos se rechazan las H1 y H2, lo cual se ajusta a los estudios llevados a cabo en la Universidad Católica de Temuco con estas dos variables [8].

A pesar de que no se produjo una diferencia significativa entre ambas universidades, estos hallazgos son de gran ayuda para universidades públicas o privadas para continuar, tales como programas que fomenten la dignidad como persona de sus estudiantes y establecen mejores relaciones en relación con el medioambiente y el desarrollo sostenible, la adopción de estrategias que fomenten profesionistas comprometidos y responsables con la resolución de problemas ambientales y sociales. Para obtener una perspectiva distinta, se recomienda aplicar el instrumento en un contexto distinto, integrando otras variables como sociabilidad y solidaridad, integridad, aceptación y aprecio por la diversidad, además comparar con otras universidades para determinar si esos programas de RSU puedan integrarse en los objetivos transversales de la malla curricular universitaria.

REFERENCIAS

- [1] Ahumada-Tello, E., Ravina-Ripoll, R., López-Regalado, M.E. Responsabilidad Social Universitaria. Desarrollo de competitividad organizacional desde el proceso educativo. Actualidades Investigativas en Educación 2018; 18: 1-30.
- [2] Ibarra-Morales L., Casas-Medina, E. y Olivas-Valdez, E. La Responsabilidad Social Empresarial: Una estrategia enfocada al desarrollo sustentable. Caso: Las ESR de Hermosillo, Sonora. Revista Iberoamericana de Contaduría, Economía y Administración, 2012; 1: 1-18.
- [3] Laurencio-Leyva, A. y Farfán-Pacheco, P.C. La innovación educativa en el ámbito de la responsabilidad social universitaria. Revista Cubana de Educación Superior, 2012; 5: 16-34.
- [4] ANFECA, Asociación Nacional de Facultades en Contaduría y Administración (septiembre 2014). Estatutos Generales de la Asociación Nacional de Facultades y Escuelas de Contaduría y Administración A.C. Recuperado de <http://www.anfeca.unam.mx/>
- [5] Sosa, A., Iñigo, E., Martín, E. La dimensión social de la pertinencia como complemento sustancial en el logro de la equidad en la Educación Superior. Revista cubana de educación superior 2016; 1: 30-40.
- [6] Evia-Alamilla, N. M.; Echeverría-Echeverría, R.; Carrillo-Trujillo, C. D. y Quintal-López, R. (2017). Ciudadanía en el currículo educativo: Un análisis del Modelo de Responsabilidad Social Universitaria en una universidad pública. Revista CS 2017; 23: 77-104.
- [7] UNESCO (septiembre 2009), Conferencia Mundial sobre educación superior 2009: la nueva dinámica de la educación superior y la investigación para el cambio social y el desarrollo. Recuperado de https://unesdoc.unesco.org/ark:/48223/pf0000183277_spa
- [8] Villar-Temuco, J. Primera encuesta de percepción de la responsabilidad social universitaria. UNIVERSIDAD CATÓLICA DE TEMUCO. Observando la Responsabilidad Social Universitaria, 2005;1: 1-36
- [9] Huamán-Pérez, F., Poma-Castellanos, G., Churampi-Cangala, R., Manuel Huamán-Pérez, M. Percepción de principios y valores de responsabilidad social universitaria del personal administrativo de la Universidad Nacional del Centro del Perú, Socialium Revista científica de Ciencias Sociales 2017; 1: 28-39

EL IMPACTO DE LAS CAMPAÑAS DE GREENWASHING EN LA ACTITUD E INTENCIÓN DE COMPRA ENTRE HOMBRES Y MUJERES

THE IMPACT OF GREENWASHING CAMPAIGNS ON THE ATTITUDE AND PURCHASE INTENTION AMONG MEN AND WOMEN

María del Carmen Catache Mendoza¹, Ruth Isela Martínez Valdez², Elí Samuel González Trejo³, Gloria Pedroza Cantú^{4*}

^{1,2,3,4}Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Departamento de Ingeniería Química, Ave. Universidad S/N, Cd. Universitaria, San Nicolás de los Garza N.L. México, C.P. 66455.

*risela_martinez@yahoo.com.mx

RESUMEN. En la actualidad los consumidores han aumentado su conciencia ambiental lo cual impacta la intención de compra de productos ecológicos, motivo por el cual las empresas están empleando técnicas y estrategias de marketing verde y etiquetado ecológico a través del cual se vende la idea de productos sustentables, aunque en la realidad no siempre se cumple con la imagen exterior que se ve del producto y surge el *greenwashing* (lavado de imagen). Esta investigación tiene como objetivo determinar si existe diferencia significativa entre hombres y mujeres en su actitud e intención de compra en campañas de *greenwashing*. El estudio es cuantitativo, explicativo y descriptivo, de corte transversal y no experimental. La muestra fue no probabilística a 301 hombres y mujeres de entre 22-35 años del Área Metropolitana de Monterrey. Los resultados obtenidos muestran que existe una diferencia significativa entre hombres y mujeres en la actitud e intención de compra frente a campañas de *greenwashing*.

Palabras clave: *Greenwashing, actitud del consumidor, intención de compra, género*

ABSTRACT. Nowadays, consumers have increased their environmental awareness, which has an impact on the purchase intention of ecological products. For this reason, companies are using green marketing techniques and strategies and ecological labeling through which the idea of sustainable products is sold, although in reality the external image of the product is not always fulfilled and greenwashing arises. The objective of this research is to determine if there is a significant difference between men and women in their attitude and purchase intention in greenwashing campaigns. The study is quantitative, explanatory and descriptive, cross-sectional and non-experimental. The sample was non-probabilistic and consisted of 200 men and women between 22-35 years old in the Monterrey Metropolitan Area. The results obtained show that there is a significant difference between men and women in the attitude and purchase intention towards greenwashing campaigns.

Keywords: *Greenwashing, purchase attitude, purchase intention, gender*

INTRODUCCIÓN

En la actualidad los consumidores han adoptado un comportamiento sustentable al elegir los productos que compran, en un estudio realizado por [1] se encontró que los consumidores mexicanos eligen los productos que sean amigables con el medioambiente, ya que al buscar productos verdes sienten que aportan al cuidado ambiental y que contribuyen a un mejor mundo. Al aumentar la conciencia ambiental en México y en otras partes del mundo, las empresas han incorporado en sus actividades de mercadotecnia estrategias verdes, como empaques y envases ecológicos, diseño de productos verdes que tengan un impacto en la actitud e intención de compra de este tipo de productos [2]. Por consiguiente, las organizaciones están implementando estrategias para establecer marcas con una buena imagen y reputación ecológica para generar una ventaja competitiva [3] Sin embargo, también se han presentado prácticas que emplean información engañosa de forma deliberada con la finalidad de mostrar una imagen pública de que los productos son amigables con el medioambiente, esto se conoce como *greenwashing* o lavado verde [4].

El objetivo de este estudio es determinar el impacto de las campañas de *greenwashing* en la actitud e intención de compra de productos verdes entre hombres y mujeres.

METODOLOGÍA

Es fundamental señalar que es una actitud del consumidor, es la situación favorable o desfavorable hacia un producto y que tiene un impacto en la intención de llevar a cabo o no una acción concreta [5]. El incremento de los consumidores preocupados por un entorno ecológico ha generado una actitud favorable para hacer compras de productos verdes, esta actitud se ve afectada cuando los compradores se sienten engañados [6] Con relación a lo anterior, la actitud del consumidor tiene una influencia directa en la intención de compra, la cual es el resultado de la percepción de un consumidor de los beneficios que una marca puede ofrecerle, la intención de compra está ligada a las actitudes del consumidor [7]. Como resultado, existe una conexión entre la actitud e intención de compra, pues la primera predice de forma significativa la intención de compra de productos ecológicos o verdes [8]. En este entorno de conciencia ambiental surge el *greenwashing*, este término surge de la palabra “*green*” (verde) y “*washing*” (lavado) y son las prácticas que las empresas usan para lavar su imagen y dar la impresión de ser empresas preocupadas por el medioambiente, lo cual confunde a los consumidores que eligen comprar productos ecológicos [9]. Al igual que existen consumidores que permanecen indiferentes a este tipo de prácticas engañosas y siguen comprando los productos, también existen consumidores muy comprometidos con el medioambiente y a quienes su actitud e intención de compra tiene un impacto al descubrir que las empresas hacen *greenwashing* [10][11].

Con respecto a las variables de estudio se hicieron investigaciones en Bogotá sobre cómo las empresas publicitarias de productos *ecofriendly* afectan a los consumidores, incluyendo su edad y su ingreso. Se encontraron que los factores de edad e ingresos pueden afectar a estas campañas engañosas, pero no se encontraron diferencias significativas en cuanto a género [13]. Otro estudio llevado a cabo en Perú en empresas comercializadoras de productos orgánicos, entre mujeres y hombres de edades comprendidas entre 18 y 25 años, no se evidenció una discrepancia significativa en cuanto a género, no obstante, se constató una discrepancia significativa en cuanto a la edad [14]. Por su parte, [15] examinó la percepción de 160 personas en campañas de *Greenwashing* de grandes empresas en Bilbao y si halló una diferencia significativa entre mujeres y hombres.

Con relación a la actitud del consumidor se llevó a cabo un estudio entre 1,000 jóvenes españoles en el que se observaban las campañas de entretenimiento sostenible de 6

empresas importantes de España, los resultados no se diferenciaron en relación con la actitud de mujeres y hombres, pero sí en los diversos grupos de edad [16]. En el mismo estudio realizado por [15] en empresas de moda no se halló una diferencia significativa en la actitud del consumidor a pesar de las campañas de entretenimiento que se llevan a cabo. Con relación a los encontrados se formularon las siguientes hipótesis.

H¹. Existe una diferencia significativa entre hombres y mujeres en la intención de compras ante las campañas de greenwashing.

H². Existe una diferencia significativa entre hombres y mujeres en la actitud del consumidor ante las campañas de greenwashing

Para llevar a cabo esta investigación, se encuestó a 301 mujeres y hombres que, al momento de ser evaluados, tenían una edad comprendida entre 22 y 35 años. Se realizó esta investigación mediante un diseño descriptivo, no experimental y enfoque transversal, y una muestra no probabilística, ya que las encuestas se aplicaron a individuos de manera no aleatoria. A continuación, se implementó un instrumento de medición [12] denominado "Impacto de las campañas de Greenwashing en la actitud e intención de compra de productos ecológicos", que se compone de dos secciones: la primera se centra en el tipo demográfico y la segunda en ítems de las variables de estudio. Se empleó una escala de Likert de cinco puntos que oscila entre 1.-totalmente de acuerdo hasta 5.- totalmente en desacuerdo.

Se aplicó una prueba piloto a 50 personas y se analizaron los componentes principales para identificar los factores que explicaban la relación entre variables, el instrumento original tenía 14 ítems para las dos variables, pero se eliminó uno quedando, 10 ítems para intención de compra y 3 para actitud del consumidor. En segundo lugar, se analizó la confiabilidad del instrumento y se obtuvieron los Alfa de Cronbach por variable y total del instrumento usando el software Statistical Package for Social Sciences (SPSS) v21. Estos resultados fueron: $\alpha = 0.975$ para intención de compra; $\alpha = 0.846$ para actitud del consumidor y para todo el instrumento, $\alpha = 0.962$. Se recopiló la información en un período comprendido entre mayo y junio de 2023, generando una encuesta digital en MS FORMS. Posteriormente, se aplicó enviando una liga para ser respondida por los sujetos de estudio. Finalmente, se obtuvieron 301 respuestas de los cuales 160 fueron mujeres y 142 hombres que oscilaban entre 22 y 35 años.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Se estimaron los datos de media, desviación estándar y valores mínimo y máximos (Tabla I) de toda la población en relación con la percepción de los encuestados que respondieron cada una de las variables con una escala de Likert de 5, en donde 1 es totalmente de acuerdo y 5 es totalmente en desacuerdo. Se puede ver que la media de intención de compra es de 1.22, y la actitud del consumidor es de 1.01, lo que significa que están de acuerdo con lo que se les preguntó. En ambas variables hay una mínima diferencia entre mujeres y hombres.

Se llevó a cabo la evaluación de los supuestos fundamentales del ANOVA: normalidad y homocedasticidad, características para asegurar la validez de la prueba. Con el fin de corroborar la normalidad, se llevó a cabo la prueba de Kolmogórov-Smirnov con el nivel de significancia $p > 0.05$, lo cual demostró que existe una distribución normal. Se hizo un análisis de Levene para ver si los datos muestran homocedasticidad. Se obtuvo una prueba para intención de compra $p = 0.466$ y para actitud del consumidor $p = 0.210$ $\alpha > 0.05$. Estos

resultados muestran que los datos tienen variaciones iguales. Se analizaron los datos en el programa SPSS v21.

Tabla I. Media de las variables

		N	Media	Desviación típica
Intención de compra	Mujeres	160	3.1771	1.20880
	Hombres	142	2.8926	1.23594
	Total	302	3.0433	1.22786
Actitud del consumidor	Mujeres	160	2.7271	1.01068
	Hombres	142	2.7958	1.01746
	Total	302	2.7594	1.01277

Se hizo una prueba ANOVA de un factor. En la tabla II se muestran las medias de las dos variables de estudio. Para intentar comparar a mujeres, se obtuvo una media de 3.17, mientras que, para hombres, se obtuvo una media de 2.89. Esto indica que las campañas de *greenwashing* afectan más a las mujeres que a los hombres, mientras que, en cuanto a actitud del consumidor, no hay una diferencia importante.

Tabla II. Media entre hombres y mujeres entre IDC y ADC

		N	Media	Desviación típica
Intención de Compra	Mujeres	160	3.1771	1.20880
	Hombres	142	2.8926	1.23594
	Total	302	3.0433	1.22786
Actitud del consumidor	Mujeres	160	2.7271	1.01068
	Hombres	142	2.7958	1.01746
	Total	302	2.7594	1.01277

En la tabla III se presenta la tabla ANOVA, en la que se extrajo el promedio de las variables y, con este promedio, se calculó una sola variable o escala sumada para realizar el ANOVA, obteniéndose los siguientes resultados: para la variable intención de compra en relación con las campañas de *greenwashing*, se obtuvo $p = 0.044$, lo que confirma la diferencia significativa entre mujeres y hombres

se acepta H1. Además, en lo que respecta a la variable actitud del consumidor, se obtuvo $p = 0.557$, lo que no tuvo una diferencia significativa entre hombres y mujeres en cuanto a las campañas de *Greenwashing*, por lo tanto, se rechaza la H2. Valores para un $p < 0.05$.

Tabla III. ANOVA de un factor

		Suma de cuadrados	gl	Media cuadrática	F	Sig.
Intención de compra	Inter-grupos	6.088	1	6.088	4.080	.044
	Intra-grupos	447.713	300	1.492		
	Total	453.801	301			
Actitud del consumidor	Inter-grupos	.355	1	.355	.345	.557
	Intra-grupos	308.382	300	1.028		
	Total	308.737	301			

CONCLUSIONES

El objetivo de la investigación era determinar el impacto de las campañas de *greenwashing* en la actitud e intención de compra de productos verdes entre hombres y mujeres. Los resultados de esta investigación muestran una diferencia significativa entre mujeres y hombres en la intención de compra, sin embargo, no ocurrió lo mismo con la actitud del consumidor, ya que no se encontró una diferencia significativa.

Según lo dicho en la literatura acerca de los estudios realizados en Bilbao en empresas de moda, existe una conexión con este estudio, ya que también se halló una diferencia significativa en la intención de compra entre mujeres y hombres como respuesta a las campañas de economía alternativa [15] Por otro lado, en lo que se refiere a las actitudes del consumidor ante las campañas de *greenwashing* los resultados de esta investigación no arrojaron una diferencia significativa entre mujeres y hombres, lo que coincide con las investigaciones realizadas en empresas de moda en Bilbao [15] y los hallazgos de España la percepción en las campañas de *greenwashing* en 6 de las principales empresas de este país [16].

Los resultados de esta investigación son importantes para desarrollar la estrategia comercial de las organizaciones y evitar estrategias de *Greenwashing* que puedan afectar las actitudes del consumidor y afectar la intención de compra de los productos si se sienten engañados. Se recomienda extender estas investigaciones en diversos contextos y mercados, con el propósito de comprender mejor las variables que influyen en las dos variables de estudio, así como otros factores que posibilitan comprender mejor el comportamiento de compra de los consumidores.

REFERENCIAS

- [1] GlobeScan (septiembre 2014), Greendex 2014: Consumer Choice and the Environment – A Worldwide Tracking Survey – Full Report. Recuperado de <https://globescan.com/2014/09/26/greendex-2014-consumer-choice-and-the-environment-a-worldwide-tracking-survey-full-report/> y https://globescan.com/wp-content/uploads/2017/07/Greendex_2014_Highlights_Report_NationalGeographic_GlobeScan.pdf
- [2] Alvarado-Niño, J. H. *El greenwashing usado por el sector empresarial en Bogotá y su influencia en el consumidor adulto*. Universidad La Gran Colombia, tesis de grado 2018.
- [3] Vega-Zamora, M., Naspetti, S., & Zanolli, R. Principales motivaciones del consumidor de alimentos ecológicos en Italia el caso del aceite de oliva. *Agrociencia* 2016; 54:327-336.
- [4] De-Freitas-Netto, S. V., Falcão-Sobral, M. F., Bezerra-Ribeiro, A. R., & Da-Luz-Soares, G. R. Concepts and forms of greenwashing: a systematic review. *Environmental Sciences Europe* 2020; 32: 1-12.
- [5] Estrada-Domínguez, J., Cantú-Mata, J., Torres-Castillo, F., & Barajas-Ávila, E. Factores que influyen en el consumidor para la adquisición de productos sustentables. *Interciencia* 2020; 45: 36-41.
- [6] Malik, C., Singhal, N., & Tiwari, S. Antecedents of consumer environmental attitude and intention to purchase green products: moderating role of perceived product necessity. *International Journal of Environmental Technology and Management* 2018; 20: 259-279.
- [7] Giraldo, W. y Otero, M. Efectos en la intención de compra a partir del valor de marca, la actitud hacia el dinero y el estilo parental. *Revista Espacios* 2018; 39: 10-22.
- [8] Sun, Y., Wang, S., Gao, L., & Li, J. Unearthing the effects of personality traits on consumer's attitude and intention to buy green products. *Natural Hazards* 2018, 93: 299-314.
- [9] Gutierrez-Gutierrez M. El Marketing, el Greenwashing y su influencia en el Brand Equity. Caso de estudio: Colombia. *ESSAY gráfica* 2021; 185: 137-145.
- [10] Baskentli, S., Sen, S., Du, S., & Bhattacharya, C. B. Consumer reactions to corporate social responsibility: The role of CSR domains. *Journal of Business Research* 2019; 95: 502-513.
- [11] Lefevre, E., & Nilsson, M. The responsible consumer. Consumer consciousness from idea to delivery: an exploratory study of consumers' willingness to act socially responsible when purchasing fashion. Kristianstad University. Tesis Doctoral 2020.
- [12] Bucio-Gutierrez, Jimenez, K. Azuela, J. Intención de compra verde. *Investigación Administrativa* 2020; 49: 2448-7678.
- [13] Gutierrez-Aragón, O. Gassiot-Melian, A, Nebot-López, A. Comportamiento de compra y actitud ante el greenwashing. Estudio comparativo entre consumidores de territorios con diferente desarrollo económico. *Revista Universitaria Empresa* 2022; 24: 2-14.
- [14] Monge-Díaz, K. (2022) Impacto del marketing verde en las actitudes y en la intención de comprar productos orgánicos del consumidor de Lima Metropolitana moderna. Universidad Esan Perú. Tesis de Grado 2022.
- [15] Urrutia-Ortiz, L. La confianza del consumidor hacia la moda sostenible de las cadenas “fast-fashion”. Universidad del País Vasco. Tesis de Grado, 2022.
- [16] Hallam, M. Montlló-Ribo, M. Rofas-Tudela, S & Ciutat-Vendrell, G. El fenómeno del greenwashing y su impacto sobre los consumidores. Propuesta metodología para su evaluación. *Aposta. Revista de Ciencias Sociales* 2011; 50 1-38.



VII CONGRESO INTERNACIONAL DE
QUÍMICA E INGENIERÍA VERDE

EJE TEMÁTICO 12

INDUSTRIA 4.0



Digitalización y Automatización de Procesos. Estudio de caso en proceso de compra en una Institución de Educación Superior.

Digitalization and Process Automation. Case study in the process of purchase in a Higher Education Institution.

Rocío Lizbeth López Villarreal^{1*}, Carolina Solís Peña², Nasser Mohamed Noriega³,
Rosario Lucero Cavazos Salazar⁴

¹Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica, Ave. Universidad S/N, Cd. Universitaria, San Nicolás de los Garza N.L. México, C.P. 66455.

²Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Coordinación de Ingeniería Industrial y Administración, Ave. Universidad S/N, Cd. Universitaria, San Nicolás de los Garza N.L. México, C.P. 66455.

³Universidad Autónoma de Nuevo León, Dirección de Innovación y Desarrollo de Modelos Tecnológicos, Ave. Universidad S/N, Cd. Universitaria, San Nicolás de los Garza N.L. México, C.P. 66455.

⁴Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica, Ave. Universidad S/N, Cd. Universitaria, San Nicolás de los Garza N.L. México, C.P. 66455.

*rocio.lopezvrl@uanl.edu.mx

RESUMEN. La digitalización de los procesos permite a las organizaciones automatizar sus actividades de tal manera que sean efectivos, productivos, rápidos y, en algunos casos, aporten estrategias nuevas enfocadas la sustentabilidad. Las Instituciones de Educación Superior (IES) cuentan con procesos repetitivos que pueden automatizarse como en el caso de los procesos de compra de activos tecnológicos en la Universidad Autónoma de Nuevo León (UANL). El objetivo de la investigación es la digitalización y automatización del proceso de compra de activos tecnológicos, lo cual lograra disminuir tiempos y además aprovechar de una manera más eficiente los recursos. La metodología propuesta consistió en el mapeo del proceso, con el objetivo de identificar tiempos, distancias y costos a los que se incurre en él. Como resultado se generó una propuesta basada en un modelo tecnológico que contempla herramientas y aplicaciones que sustituyen al proceso físico de traslado de información entre dependencias universitarias implementando un formulario como la herramienta inicial que desencadena la automatización del proceso, haciendo que la información viaje en segundos de un sitio a otro y evitando el uso de transporte para la papelería llegando a dos vertientes importantes, la primera es que al digitalizar el proceso y automatizarlo, se elimina el uso del papel generando la segunda que es que los trasportes oficiales, los cuales son limitados, puedan ser puestos a disposición de una reasignación para que se utilicen en traslado de pasajeros o carga, dejando como futura investigación la afectación en los recursos y cómo se reflejan en la sustentabilidad de la universidad.

Palabras clave: Digitalización, automatización, RPA, tecnología

ABSTRACT. The digitization of processes allows organizations to automate their activities in such a way that they are effective, productive, fast and, in some cases, contribute new strategies focused on sustainability. Higher Education Institutions have repetitive processes that can be automated, as in the case of the purchase processes of technological assets at the Universidad Autónoma de Nuevo León (UANL). The objective of the research is the digitization and automation of the process of purchasing technological assets, which will reduce time and make more efficient use of resources. The proposed methodology

consisted of mapping the process, with the objective of identifying times, distances and costs incurred in it. As a result, a proposal was generated based on a technological model that includes tools and applications that replace the physical process of transferring information between university units, implementing a form as the initial tool that triggers the automation of the process, making the information travel in seconds from one place to another and avoiding the use of transport for stationery reaching two important aspects, the first is that by digitalizing the process and automating it, the use of paper is eliminated, generating the second, which is that official transport, which is limited, can be made available for a reallocation to be used in the transfer of passengers or cargo, leaving as future research the impact on resources and how they are reflected in the sustainability of the university.

Keywords: *Digitalization, automatization, RPA, technology*

INTRODUCCIÓN

La digitalización, según la empresa tecnológica Gartner [1] se refiere a la utilización de tecnología para cambiar las formas de operar un negocio y, con esto, poder ofrecer oportunidades para el aumento de ingresos y la generación de valor. Cuando se digitaliza, se replantea un modelo de trabajo para que este pueda aprovechar los beneficios del uso de tecnología, por ejemplo, sistemas autónomos y robotizados (RAS, por sus siglas en inglés), sensores inteligentes, análisis de datos, inteligencia artificial o la realidad aumentada [2].

La digitalización abre camino a nuevos escenarios de trabajo lo que permite que en un proceso administrativo se puedan suplir procedimientos manuales o transportación con aplicaciones o herramientas digitales tales como un formulario, una aprobación o una firma digital, entre otras. La automatización robótica de los procesos (RPA, por sus siglas en inglés) es una herramienta que permite a las organizaciones recrear procesos de forma digital y automatizarlos, con esto pueden hacerse nuevos modelos de trabajo que sean eficientes, confiables y que tengan bajo costo utilizando de forma sostenible los recursos [3]. Dentro de las ventajas se encuentran también una mayor eficiencia y mejor distribución de la información que conlleva a mejor productividad y procesos ágiles [4].

La actual investigación se desarrolló a partir de un caso de compra de activo tecnológico en una Institución de Educación Superior (IES) mexicana que cuenta con sedes en diferentes lugares del noreste del país

El objetivo de esta investigación es disminuir los tiempos y costos que se involucran en la transportación de documentación física entre sedes universitarias a través de la digitalización y automatización del proceso de compra de activos tecnológicos.

METODOLOGÍA

Los mapeos de procesos se aplican para, de una forma visual, identificar las actividades que se desarrollan en un proceso determinado permitiendo ver el flujo que se realiza a través de los departamentos de una organización [5].

En esta investigación se utilizaron las áreas involucradas en el proceso; cliente interno, departamentos de tecnología, adquisiciones, compras y recepción de envíos, rectoría y el proveedor. El proceso actual se realiza de forma física trasladando documentación entre las diferentes sedes. En la **Figura 1** se puede ver el mapeo del proceso.

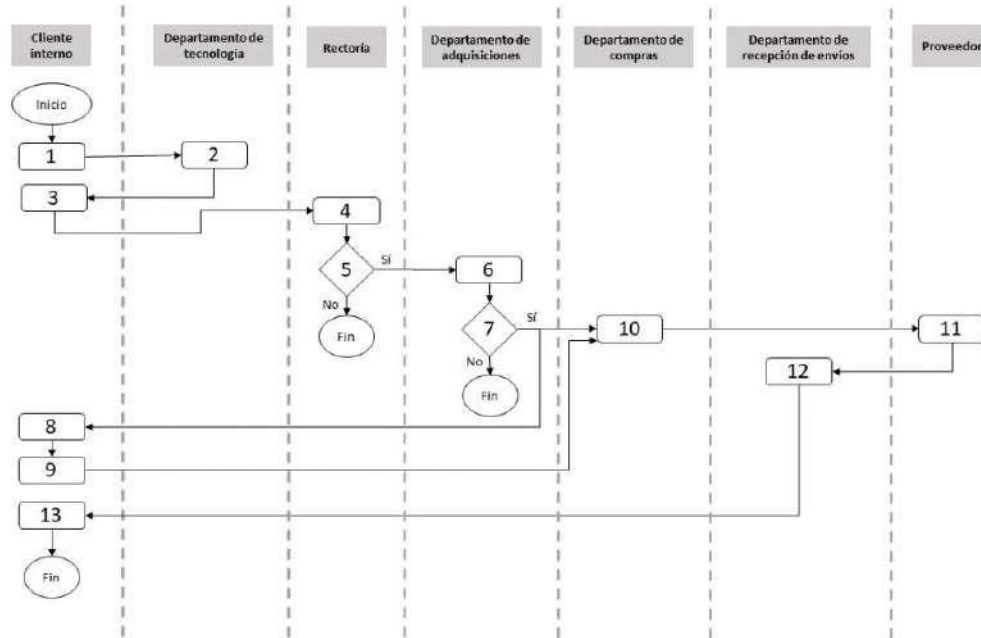


Figura 1. Mapeo del proceso actual de compra de activos tecnológicos.

Los movimientos de información entre las actividades que se muestran en la **Figura 1**, se realizan de forma física utilizando un vehículo. En la **Tabla I** se detallan las rutas entre sedes, sus distancias y sus costos aproximados.

Tabla I. Detalle de las rutas de transporte involucradas en el proceso de compra de activos tecnológicos.

No. de ruta	Ruta	Tiempo (min)	Distancia (km)	Costo (pesos)
1	Cliente interno -Dpto. de tecnología	20	10.2	\$17.26
2	Cliente interno - Rectoría	20	10.2	\$17.26
3	Cliente interno - Dpto. de adquisiciones	20	10.2	\$17.26
4	Dpto. de tecnología - Cliente interno	20	12.8	\$21.66
5	Rectoría - Dpto. de adquisiciones**	5	0.05	N/A
6	Dpto. de adquisiciones - Cliente interno*	5	0	N/A
7	Dpto. de adquisiciones - Dpto. de compras**	5	0.05	N/A
8	Dpto. de compras - Proveedor	20	4.1	\$6.94
9	Proveedor - Dpto. de recepción de envíos	20	4.2	\$7.11
10	Dpto. de recepción de envíos - Cliente interno	20	12.8	\$21.66

*El flujo de información es a través de llamada

**Las dependencias involucradas en estas rutas se encuentran en el mismo edificio

Las distancias, tiempos y costos son medidos utilizando a un cliente interno y un proveedor, sin embargo, estos pueden variar de ubicación y realizar cambios en los datos utilizados. El costo se sacó utilizando el rendimiento promedio en km/L de un vehículo tipo VAN

dividido entre el costo promedio de la gasolina en pesos/L y multiplicado por la distancia que recorría el vehículo en la ruta. El rendimiento utilizado fue de 13 km/L y el costo de gasolina promedio fue de \$22 pesos/L.

En la **Tabla II** se muestran el detalle de actividades en el mapeo del proceso actual.

Tabla II. Actividades actuales en el proceso de compra de activos tecnológicos.

No. de actividad	Descripción	Dependencia	Tiempo (días)
1	Creación de solicitud de soporte técnico	Cliente interno	1
2	Creación de soporte técnico para los activos tecnológicos	Dpto. de tecnología	15
3	Creación de solicitud de compra de activo	Cliente interno	1
4	Atención de solicitud, revisión de motivos	Rectoría	30
5	Aprobación de solicitud	Rectoría	1
6	Atención de solicitud, revisión de presupuesto disponible	Dpto. de adquisiciones	30
7	Aprobación de presupuesto	Dpto. de adquisiciones	1
8	Aprobación de formato de requerimiento en el sistema	Cliente interno	0.5
9	Creación de requerimiento	Cliente interno	0.5
10	Atención de solicitud y de requerimiento.	Dpto. de compras	30
11	Atención de orden de compra	Proveedor	8
12	Recepción y alta de activos	Dpto. de recepción de envíos	1
13	Recepción de activos	Cliente interno	1

Tomando en cuenta la información del proceso actual, se tiene un tiempo aproximado de atención de solicitud de 155 min en transportación de documentos y 172,800 minutos (120 días) en la realización de las actividades en las dependencias dando un total de 172,955 minutos en la suma de ambos. En cuanto al costo total del transporte es de \$109.15 pesos.

Como se muestra en la **Tabla II**, cada dependencia y cada proceso conllevan tiempos variados lo cual puede deberse a factores diversos como la cantidad de solicitudes que procesan, al tiempo dedicado a la elaboración de la actividad, entre otros.

Con la digitalización de este proceso se busca crear una automatización para que permita el flujo de solicitudes en masa y evitar tiempos de traslados y costos relacionados a estos.

El mapeo del proceso físico facilita el crear un entorno digital de este para el cual se utilizarán las aplicaciones Forms, Excel, Outlook y Power Automate de la licencia tipo A1 de Microsoft, esto debido a que la universidad en donde se desarrolla la investigación cuenta con este tipo de licencia para sus empleados y alumnos brindando la facilidad del uso de estas aplicaciones y servicios y del directorio activo.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La digitalización del proceso se contempló únicamente en los procesos internos de la universidad, tomando en cuenta las rutas de transporte de la 1 a la 7 que se muestran en la **Tabla I** y de la actividad 1 a la 10 de la **Tabla II**. El proceso implicó primero utilizar una cuenta de correo educativo que tenía asignada la licencia A1 de Microsoft. Después se creó un formulario en Forms que incluyó los apartados que llevan las solicitudes. Luego se construyó una base de datos en Excel con los datos de las dependencias universitarias, los nombres de los encargados y los correos, para que se hiciera la validación de la información. Para automatizar el proceso se realizó un flujo de nube en Power Automate que se accionaba cada vez que alguien llenaba el formulario con una solicitud. En la **Figura 2** se muestra el mapeo del proceso digital.

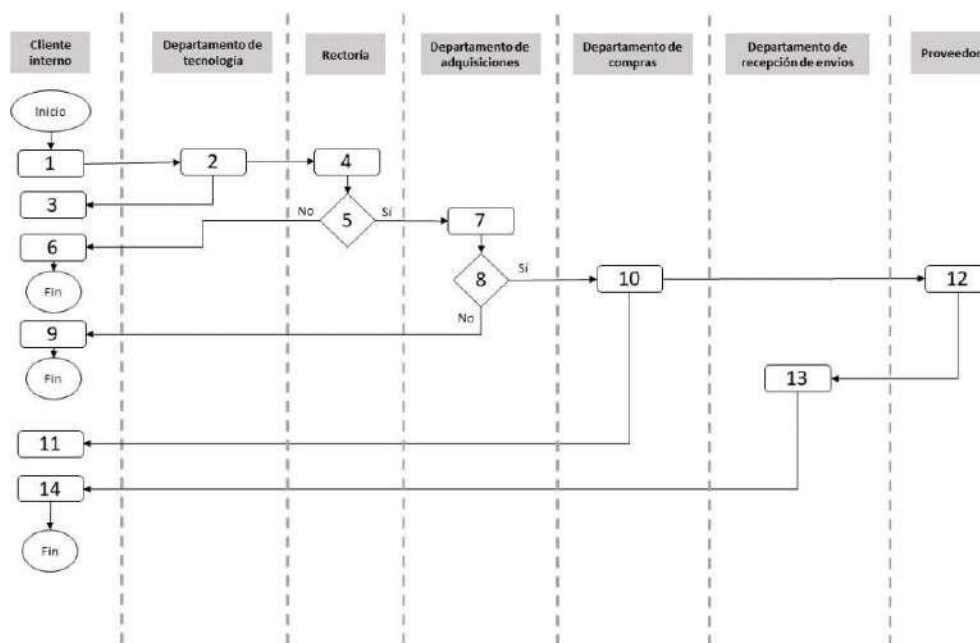


Figura 2. Mapeo del proceso digital de compra de activos tecnológicos.

En la **Tabla III** se detallan las actividades que se realizan en el proceso digital, en el cual todas las notificaciones y recepciones de solicitudes se realizan a través de Outlook.

Tabla III. Actividades realizadas con el acoplamiento del proceso digital para la compra de activos tecnológicos.

No. de actividad	Descripción	Dependencia	Tiempo (min)
1	Llenar el formulario	Cliente interno	5
2	Recepción de solicitud	Departamento de tecnología	5*
3	Notificación de atención de solicitud	Cliente interno	
4	Recepción de solicitud	Rectoría	
5	Aprobación de solicitud	Rectoría	
6	Notificación de rechazo de solicitud	Cliente interno	

7	Recepción de solicitud	Departamento de adquisiciones	
8	Aprobación de solicitud	Departamento de adquisiciones	
9	Notificación de rechazo de solicitud	Cliente interno	
10	Recepción de solicitud	Departamento de compras	
11	Notificación de atención de solicitud	Cliente interno	
12	Atención de orden de compra	Proveedor	11,520
13	Recepción y alta de activos	Departamento de recepción de envíos	1,440
14	Recepción de activos	Cliente interno	1,440

*La prueba realizada contempla un flujo continuo de trabajo teniendo aprobaciones directas.

La prueba da un resultado de 172,870 minutos (120 días y 70 minutos) generando una disminución de 85 minutos y, al considerar únicamente las rutas 8, 9 y 10 de la **Tabla I**, se tiene un costo de \$35.71 pesos, representando una diferencia de \$73.44 pesos respecto al costo del proceso físico. Estas disminuciones en porcentaje son de 0.05% en tiempo y 67.28% en costos. Tomando en cuenta que estos cambios se ven reflejados en la presente investigación dirigida al estudio de una solicitud, puede haber la posibilidad de un impacto significativo en solicitudes en masa.

CONCLUSIONES

Esta investigación muestra mejoras más significativas en costo que en tiempo, sin embargo, la implementación de la tecnología en este proceso puede conllevar a otras mejoras como disminuir tiempos de atención en las dependencias, generar visibilidad y trazabilidad en las solicitudes y un mejor aprovechamiento de los recursos.

REFERENCIAS

[2] Departamento de comunicaciones del Ejército de Tierra (2019), Sistemas autónomos y robóticos. Recuperado de https://ejercito.defensa.gob.es/reportajes/2019/77_autonomos_roboticos.html

[1] Gartner (2023), Digitalización. Recuperado de <https://www.gartner.com/en/information-technology/glossary/digitalization>

[3] Madakam, S., Holmukhe, R. M. & Jaiswal, D. K. The Future Digital Work Force: Robotic Process Automation (RPA). JISTEM - Journal of Information Systems and Technology Managements 2019; 16.

[4] Vera Carretero, G. Estudio del aumento de la operatividad de una unidad tipo grupo a través de la digitalización de procesos. 2019.

[5] Sharp, A. Workflow Modeling: Tools for Process Improvement and Applications Development, Norwood, MA: Artech House, Inc. 2009.



VII CONGRESO INTERNACIONAL DE
QUÍMICA E INGENIERÍA VERDE

EJE TEMÁTICO 13

ENERGÍAS ALTERNATIVAS Y EFICIENCIA ENERGÉTICA



VALORIZACIÓN DE LODOS DE AGUA RESIDUAL PARA LA PRODUCCIÓN DE BIODIÉSEL USANDO SOLVENTES EUTÉTICOS PROFUNDOS

VALORIZATION OF SEWAGE SLUDGE FOR THE PRODUCTION OF BIODIESEL USING DEEP EUTETIC SOLVENTS

Brayan Steven Moreno Caballero¹, José Julián Cano Gómez^{1*}, Mónica M. Alcalá-Rodríguez¹, Carlos Enrique Escárcega-González¹, Carlos Escamilla-Alvarado¹.

¹Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Departamento de Ingeniería Química, Ave. Universidad S/N, Cd. Universitaria, San Nicolás de los Garza N.L. México, C.P. 66455.

* jose.canogmz@uanl.edu.mx

RESUMEN. El biodiésel se produce principalmente a partir de aceites vegetales. Sin embargo, esto implica altos impactos económicos y ambientales debido al uso de cultivos energéticos. Los lodos de agua residual (LAR) son residuos que contienen hasta un 60% de grasas. Esto permite el uso de LAR para la producción de biodiésel. Para ello se utilizan procesos de esterificación y transesterificación usando catalizadores como H₂SO₄ y KOH, respectivamente. Estos catalizadores tienen desventajas como altos tiempos de reacción 9 h y una difícil separación al final de la reacción. Los solventes eutécticos profundos (DES) son catalizadores alternativos para producir biodiésel debido a que promueven reacciones simultáneas de esterificación y transesterificación, se separan fácilmente al final de la reacción y son de origen renovable. En este trabajo se sintetizaron tres DESs, usando ChCl como HBA y tres HBDs: ácido toluenosulfónico (PTSA), ácido oxálico (OA) y ácido cítrico (CA). Los DESs se usaron como catalizadores para producir biodiésel usando grasa de LAR y metanol. Se varió la cantidad de DES entre 0.05 y 0.4 (mol DES/mol FFA) para estudiar su efecto en la reacción. Se produjo biodiésel con rendimientos máximos de 97.01, 59.74 y 23.10% usando ChCl:PTSA, ChCl:OA y ChCl:CA respectivamente, con tiempos máximos de reacción de 4h (ChCl:PTSA) y 6 h (ChCl OA y ChCl:OA). El rendimiento de la reacción mostró depender principalmente de la viscosidad y la acidez de los DESs.

Palabras clave: Biodiésel, solventes eutécticos, esterificación.

ABSTRACT. Biodiesel is mainly produced from vegetable oils. However, this involves high economic and environmental impacts due to the use of energy crops. Sewage sludge (SS) is waste that contains up to 60% fats. This allows the use of SS for biodiesel production. For this purpose, esterification and transesterification processes are used using catalysts such as H₂SO₄ and KOH, respectively. These catalysts have disadvantages such as high reaction times 9 h and difficult separation at the end of the reaction. Deep eutectic solvents (DES) are alternative catalysts to produce biodiesel because they promote simultaneous esterification and transesterification reactions, are easily separated at the end of the reaction and are of renewable origin. In this work, three DESs were synthesized, using ChCl as HBA and three HBDs: toluenesulfonic acid (PTSA), oxalic acid (OA) and citric acid (CA). The DESs were used as catalysts to produce biodiesel using LAR fat and methanol. The amount of DES was varied between 0.05 and 0.4 (mol DES/mol FFA) to study its effect on the reaction. Biodiesel was produced with maximum yields of 97.01, 59.74 and 23.10% using ChCl:PTSA, ChCl:OA and ChCl:CA respectively, with maximum reaction times of 4h (ChCl:PTSA) and 6 h (ChCl OA and ChCl:OA). The reaction yield was shown to depend mainly on the viscosity and acidity of the DESs.

Keywords: Biodiesel, eutectic solvents, esterification.

INTRODUCCIÓN

Las materias primas para la producción de biodiésel son principalmente aceites vegetales (aceites de coco, palma, soya, entre otros) y en menor medida grasas animales (grasa de res, pollo, cerdo y pescado). Sin embargo, la desventaja de estas materias primas radica en el costo económico, la sostenibilidad ambiental y la seguridad alimentaria [1]. Por esta razón el uso de materias primas alternativas como las grasas obtenidas a partir de residuos de industrias como los rastros, los restaurantes y las plantas de tratamiento de agua residual representan una opción viable, ya que están disponibles en grandes cantidades, tienen costos casi nulos y no generan afectaciones a la seguridad alimentaria. Los lodos de agua residual (LAR) son desechos de las plantas de tratamiento. Actualmente, su disposición y almacenamiento representan aproximadamente un 50 % de los costos operativos de las plantas. Hasta ahora, no se ha hallado un método económicamente viable y ambientalmente sostenible para su aprovechamiento [2]. Los LAR contienen alrededor de 60% en grasas [3], al tratarse de un residuo no poseen valor comercial y son producidos en grandes cantidades. Dada esta situación, se perfilan como una materia prima alternativa para la fabricación de biodiésel. Su uso no solo fomentaría una producción más sostenible, sino también reduciría los gastos asociados con su disposición. La producción de biodiésel a partir de lodos de agua residual involucra varios pasos. Comienza con la extracción de las grasas, generalmente usando solventes orgánicos como el hexano, lo que puede tener efectos negativos en la sostenibilidad. Estas grasas contienen principalmente ácidos grasos libres (FFA) y triglicéridos (TG), requiriendo dos tipos de procesos para obtener biodiésel. El primero es la esterificación, que convierte los ácidos grasos libres en ésteres metílicos de ácido graso (biodiésel). Luego, se lleva a cabo la transesterificación para convertir los triglicéridos no esterificados en biodiésel. Estos procesos comúnmente emplean catalizadores homogéneos como el ácido sulfúrico (esterificación) y el hidróxido de potasio (transesterificación). Los catalizadores homogéneos usados en la producción de biodiésel presentan problemas de separación, no se pueden reutilizar y promueven reacciones secundarias de saponificación, reduciendo el rendimiento [4]. Para superar estos inconvenientes, los catalizadores heterogéneos, como el óxido de calcio (CaO), ofrecen una alternativa. Logran rendimientos superiores al 90%, se separan fácilmente, son reutilizables y se obtienen de fuentes renovables como la cáscara de huevo [5]. Sin embargo, el CaO es susceptible a la desactivación por la exposición al CO₂ y agua del ambiente, por lo que requiere ser activado mediante calcinación con cada uso, también es susceptible a la formación de jabones en presencia de FFA. Recientemente se ha propuesto otro tipo de catalizadores para la producción de biodiésel, conocidos como solventes eutécticos profundos (DES). Los DES son mezclas eutécticas de dos compuestos puros que forman redes estables mediante asociaciones de enlace de hidrógeno [6]. Usualmente, los DESs están compuestos por un aceptor de hidrógeno, comúnmente sales de haluros (cloruro de colina (ChCl), acetato de colina (ChAc), bromuro de metil trifenil fosfonio (MTPB), entre otros) y un donador de enlaces de hidrógeno (aminas, alcoholes, ácidos carboxílicos, entre otros). Estos compuestos representan una opción como sustitutos de solventes orgánicos volátiles en diversas aplicaciones industriales, esto debido a su origen natural, bajo costo, sencilla preparación y alta capacidad de solvatación [7]. Los componentes de los DES pueden ser modificados con el fin de adaptarlos para aplicaciones específicas. Los DES pueden usarse como catalizadores para la producción de biodiésel al incluir un ácido como donante de enlace de hidrógeno, como es el caso del DES bromuro de tetraoctilamonio (TOAB): ácido p-toluenosulfónico (PTSA). Este DES se empleó como catalizador para la producción de biodiésel, logrando un rendimiento del 94.9% después de 5 h de reacción. Esto se debe principalmente a que el DES mejora el contacto entre las fases de metanol y aceite, acelerando la velocidad de reacción interfacial debido a su efecto

como agente activo en la superficie catiónica [6]. La ventaja principal de este proceso radica en que el uso de DES permite tiempos de reacción más cortos (entre 0.5 y 5 horas) en comparación con el uso de catalizadores convencionales como el ácido sulfúrico (entre 6 y 8 horas) [8]. En esta investigación se evaluaron tres diferentes DES: ácido cloruro de colina: ácido p-toluenosulfónico (ChCl: PTSA), ácido cloruro de colina: ácido oxálico (ChCl:OA) y ácido cloruro de colina: ácido cítrico (ChCl: CA) como catalizadores para la producción de biodiésel a partir de lodos de aguas residuales. El objetivo es determinar si estos catalizadores pueden promover reacciones simultáneas de transesterificación y esterificación, permitiendo reducir el tiempo de reacción y lograr una producción de biodiésel más limpia en comparación con el proceso convencional de dos pasos (esterificación-transesterificación).

METODOLOGÍA

Se sintetizaron tres DES, usando ChCl como HBA y tres diferentes HBD: ácido Tolueno sulfónico (PTSA), ácido oxálico (OA) y ácido cítrico (CA) usando el método de Abbott et al. [9]. Por otra parte, el porcentaje de ácidos grasos libres (%FFA) de la grasa extraída de los lodos de agua residual se midió mediante el método de titulación (AOAC 942.15). Una vez determinado el valor inicial de %FFA, se realizaron los experimentos de la **Tabla I** según la metodología propuesta por Moreno-Caballero et al [10]. Se varió la cantidad de DES para evaluar sus efectos sobre el rendimiento de la reacción.

Tabla I. Experimentos de producción de biodiesel variando la cantidad de DES.

DES	Temp. (°C)	Tiempo (h)	Metanol (mol _{met} /mol _{FFA})	DES (mol _{DES} /mol _{FFA})
ChCl:PTSA	60	3	10	0.05 a 0.3
ChCl:OA	60	3	15	0.1 a 0.4
ChCl:CA	60	3	15	0.1 a 0.4

Como el biodiésel es el producto de la esterificación de los FFA contenidos en la grasa, el rendimiento de cada experimento se evaluó midiendo la disminución del %FFA como se muestra a continuación:

$$Rendimiento = \left(1 - \frac{\%FFA_{producto\ de\ reacción}}{\%FFA_{grasa}}\right) \times 100 \quad \text{Ec. 1}$$

Finalmente se obtuvo el perfil de ésteres de ácidos grasos del biodiésel obtenido mediante cromatografía de gases (AOAC 969.33).

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

El rendimiento de biodiésel para los experimentos con ChCl: PTSA se muestra en la **Figura 1**. El rendimiento aumenta en relaciones molares de DES de 0.05 a 0.1 donde alcanza el máximo de 97.01% y para proporciones de DES superiores a 0.1 el valor de rendimiento disminuye. Por otra parte, la **Figura 2** muestra el rendimiento de la reacción usando ChCl: OA. El rendimiento aumenta para relaciones molares de DES de 0.1 a 0.2 hasta alcanzar un máximo de 59.74% y para relaciones molares de DES superiores a 0.2 el rendimiento se reduce a 51.79%. Finalmente, la **Figura 3** muestra el rendimiento de los experimentos realizados con ChCl: AC, el rendimiento muestra el mismo comportamiento que ChCl: OA pero con un rendimiento máximo del 23.1% a 0.2 (mol DES/mol FFA). El comportamiento de los tres sistemas se debe a que un exceso de DES en la reacción puede aumentar la

viscosidad del medio de reacción, dificultando la transferencia de masa entre la grasa y el metanol y reduciendo el rendimiento [6].

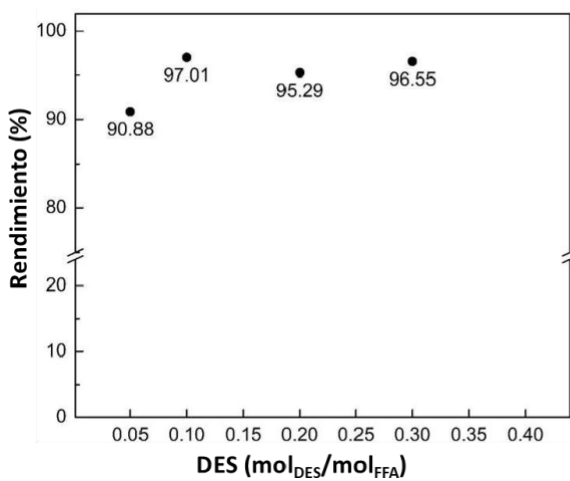


Figura 1. Rendimiento de biodiésel usando ChCl:PTSA

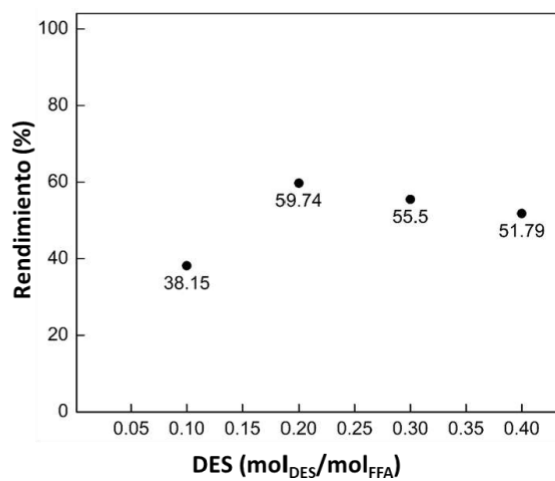


Figura 2. Rendimiento de biodiésel usando ChCl:OA

Para relacionar el rendimiento de la reacción con propiedades clave de los DES relacionadas con la transferencia de masa, se midió la viscosidad a 60°C. Los resultados indicaron que ChCl: PTSA tuvo la menor viscosidad, 79.93 mPa·s, seguido por el ácido oxálico con 309.32 mPa·s. Además, se realizó un análisis de HLB (Balance Hidrofílico-Lipofílico) mediante el método de Davies [11], para evaluar la naturaleza polar y no polar de los DESs. Los valores obtenidos fueron 7.91, 8.40 y 8.49 para ChCl: PTSA, ChCl: OA y ChCl: CA, respectivamente. Esto señala una característica hidrofílica/lipofílica en los tres DESs, siendo ChCl: PTSA el más inclinado hacia lo lipofílico, lo que facilita su solubilidad con la fase grasa en la reacción. Adicionalmente, la acidez de los HBDs se ha documentado en la literatura, destacando PTSA como el más ácido con un pKa de -2.8, seguido por OA (pKa: 1.25) y CA (pKa: 4.14) [12]. En resumen, el rendimiento más alto (97.01%) alcanzado con ChCl: PTSA se atribuye a su menor viscosidad, mayor carácter lipofílico y mayor acidez en comparación con ChCl: OA y ChCl: CA.

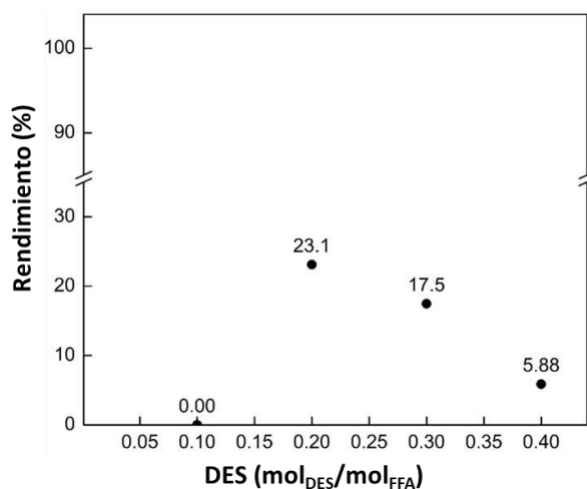


Figura 3. Rendimiento de biodiésel usando ChCl:CA

Las muestras obtenidas de los experimentos con ChCl: PTSA y ChCl: OA se caracterizaron mediante cromatografía de gases (AOAC 969.33) para obtener el perfil de ácidos grasos, estos perfiles fueron comparados con biodiésel obtenido con catalizadores tradicionales H₂SO₄-CaO como se muestra en la **Tabla II**. Los ésteres metílicos predominantes fueron palmitato, oleato, linoleato y estearato. Estos ésteres corresponden con la composición típica del biodiésel [64].

Tabla II. Perfil de ésteres de ácidos grasos de biodiésel producido usando diferentes catalizadores

Ester metílico	Biodiésel ChCl:PTSA (w)	Biodiésel ChCl:OA (w)	Biodiésel H₂SO₄-CaO (w)
Metil butirato	0.0014	0.0000	0.0033
Metil hexanoato	0.0000	0.0019	0.0043
Metil tridecanoato	0.0000	0.0000	0.0584
Metil undecanoato	0.0029	0.0037	0.0000
Metil miristato	0.0319	0.0344	0.0000
Metil palmitato	0.4030	0.4129	0.4279
Metil oleato	0.4135	0.2270	0.2689
Metil linoleato	0.1029	0.2054	0.0000
Metil estearato	0.0000	0.0000	0.1749
Metil araquidato	0.0103	0.0715	0.0000
Metil-gamma-Linolenato	0.0281	0.0229	0.0000
Metil tricosanoato	0.0060	0.0150	0.0399

w: fracción masa

CONCLUSIONES

El mejor rendimiento de biodiésel (97,01%) se obtuvo utilizando el DES de ChCl:PTSA a una relación molar de 0.1 mol_{DES}/mol_{FFA}. El rendimiento disminuyó con proporciones molares superiores a 0.1 mol_{DES}/mol_{FFA} debido a que la alta viscosidad de los DES aumenta la viscosidad del medio de reacción y disminuye la transferencia de masa.

La acidez del HBD mostró ser un factor determinante para la producción de biodiésel utilizando los DES como catalizadores, como se pudo apreciar el DES con el HBD más ácido obtuvo el mayor rendimiento.

El uso de ChCl:PTSA mostró una alta efectividad para la producción de biodiésel ya que permitió obtener un alto rendimiento (97.01%) en un tiempo de reacción de 3 horas, haciéndolo una opción más sustentable en comparación con los procesos convencionales que requieren de hasta 9 horas de reacción.

REFERENCIAS

- [1] Singh SP, Singh D. Biodiesel Production through the Use of Different Sources and Characterization of Oils and Their Esters as the Substitute of Diesel: A Review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 2010 ;14 : 200-216.
- [2] Mu D, Addy M, Anderson E, Chen P, Ruan R. A Life Cycle Assessment and Economic Analysis of the Scum-to-Biodiesel Technology in Wastewater Treatment Plants. *Bioresources Technology* 2016 ; 204 :89-97.
- [3] Cammarota MC, Freire DMG. A Review on Hydrolytic Enzymes in the Treatment of Wastewater with High Oil and Grease Content. *Bioresources Technology* 2006 ; 97 :2195-2210.
- [4] Lam MK, Lee KT, Mohamed AR. Homogeneous , Heterogeneous and Enzymatic Catalysis for Transesteri Fi Cation of High Free Fatty Acid Oil (Waste Cooking Oil) to Biodiesel : A Review. *Biotechnology Advances* 2010; 28:500-518.
- [5] Castellar G, Angulo E, Cardozo B. Transesterificación de Aceites Vegetales Empleando Catalizadores Heterogéneos. *Prospectiva* 2014; 12:90-104.
- [6] Liu Y, Yan H, Liu J, Dong W, Cao Z, Hu X, Zhou Z. Acidic Deep Eutectic Solvents with Long Carbon Chains as Catalysts and Reaction Media for Biodiesel Production. *Renewable Energy* 2020 ; 162 :1842-1853.
- [7] Kalhor P, Ghandi K. Deep Eutectic Solvents for Pretreatment, Extraction, and Catalysis of Biomass and Food Waste. *Molecules* 2019; 22:4012.
- [8] Troter DZ, Todorović ZB, Dokić-Stojanović DR, Stamenković OS, Veljković VB. Application of Ionic Liquids and Deep Eutectic Solvents in Biodiesel Production: A Review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 2016; 61:473-500.
- [9] Abbott AP, Boothby D, Capper G, Davie DL, Rasheed RK. Deep Eutectic Solvents Formed between Choline Chloride and Carboxylic Acids: Versatile Alternatives to Ionic Liquids. *Journal of the American Chemical Society* 2004; 126:9142-9147.
- [10] Moreno-Caballero BS. Effect of Metal Oxides on the Physicochemical Properties of Biodiesel Produced from Wastewater. Universidad Autónoma de Nuevo León, Tesis de maestría 2020.
- [11] Davies JT. A Quantitative Kinetic Theory of Emulsion Type. I. Physical Chemistry of the Emulsifying Agent. In: *Gas/Liquid and Liquid/Liquid Interfaces*. 2nd International Congress Surface Activity 1957; 42: 6-438.
- [12] Taysun MB, Sert E, Atalay FS. Physical Properties of Benzyl Tri-Methyl Ammonium Chloride Based Deep Eutectic Solvents and Employment as Catalyst. *Journal of Molecular Liquids* 2016; 223:845-852.

MODELACIÓN TERMODINÁMICA DE UN NOVEDOSO SISTEMA DE POLIGENERACIÓN CON UN ORC PARA LA PRODUCCIÓN ENERGÍA ELÉCTRICA, CALOR REVALORIZADO Y ENFRIAMIENTO

THERMODYNAMIC MODELING OF A NOVEL POLYGENERATION SYSTEM WITH AN ORC FOR THE PRODUCTION OF ELECTRICAL ENERGY, REVALUATED HEAT, AND COOLING

Javier Alejandro Hernández Magallanes^{1*}, Felipe Eduardo Segovia Ojeda¹, Sanal Kozhiparambil Chandran¹, Andrea Quetzalli Cerdán Pasarán¹.

¹Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Departamento de Ingeniería Química, Ave. Universidad S/N, Cd. Universitaria, San Nicolás de los Garza N.L. México, C.P. 66455.

*e-mail del autor de correspondencia/ e-mail correspondence autor:

javier.hernandezmg@uanl.edu.mx

RESUMEN. En este estudio se presenta una modelación termodinámica de un sistema de poligeneración modificado (MAHP) acoplado con un ciclo orgánico Rankine (ORC). El propósito consiste en aprovechar una fuente térmica alternativa-sustentable para generar electricidad, calor revalorizado y servicio de enfriamiento, simultáneamente. El sistema acoplado combina una bomba de calor tipo III, un sistema de refrigeración por absorción y un Ciclo Orgánico de Rankine (ORC). Se evaluaron diferentes fluidos de trabajo en el ORC (R123, R245fa, R600, R600a), encontrando que el R123 es el que produce más energía eléctrica. Se llevaron a cabo diversos análisis paramétricos para el estudio general, como el aumento bruto de temperatura (GTL), las relaciones de presión del sistema (RP), y las relaciones de flujo másico FR1 (mayor producción de energía eléctrica) y FR2 (mayor producción de enfriamiento). Los parámetros de desempeño η_{th} y η_{ex} fueron evaluados, alcanzando valores máximos de 0.40, y 0.49, respectivamente, para condiciones de operación con GTL de 40 °C, FR1 de 2.2-3.4 y FR2 de 0.1 a 0.8. Los resultados indican que el sistema compuesto puede generar hasta 6,000 kW de enfriamiento y 630 kW de electricidad. Además, al utilizar una fuente térmica sustentable (solar, geotermia, biomasa o calor residual industrial), se estima que el sistema propuesto podría evitar hasta 2,300 toneladas de CO₂ eq/año.

Palabras clave: Energías alternativas, poligeneración, procesos sustentables, ORC, eficiencia energética.

ABSTRACT. This study presents a thermodynamic modeling of an innovative polygeneration system (MAHP) coupled with an Organic Rankine Cycle (ORC). The purpose is to harness an alternative-sustainable thermal source for simultaneous electricity generation, valorized heat, and cooling service. The coupled system combines a modified heat pump, an absorption refrigeration system, and an Organic Rankine Cycle (ORC). Different working fluids were evaluated in the ORC (R123, R245fa, R600, R600a), with R123 being identified as the most efficient in electricity generation. Various parametric analyses were conducted for the overall study, such as gross temperature lift (GTL), system pressure ratios (RP), and mass flow rate ratios FR1 (for increased electricity generation) and FR2 (for enhanced cooling production). The performance parameters η_{th} and η_{ex} were evaluated, reaching maximum values of 0.40 and 0.49, respectively, under operating conditions of GTL at 40°C, FR1 ranging from 2.2 to 3.4, and FR2 from 0.1 to 0.8. The results indicate that the combined system can produce up to 6,000 kW of cooling and 630 kW of electricity. Moreover, by utilizing a sustainable thermal source (solar, geothermal, biomass, or industrial waste heat), the proposed system could potentially avoid up to 2,300 tons of CO₂ eq per year.

Keywords: Alternative energies, polygeneration, sustainable processes, ORC, energy efficiency.

INTRODUCCIÓN

Durante las últimas décadas, la economía mundial ha experimentado un rápido crecimiento, siendo el sector industrial uno de los principales impulsores. Sin embargo, este aumento en la producción ha traído consigo una creciente demanda de energía, lo que se traduce en mayores emisiones de CO₂ y un mayor consumo de recursos energéticos. Para abordar esta problemática, la investigación de fuentes alternativas como la energía eólica, solar, geotérmica y biomasa, junto con el enfoque en el uso eficiente de la energía, se ha vuelto fundamental. En este sentido, una de las opciones más prometedoras en las últimas décadas ha sido la recuperación de calor de desecho industrial [1]. Diversas industrias, como la de minerales no metálicos, metales no ferrosos, papel, química, petroquímica, hierro y acero, destacan por generar un alto nivel de calor residual [2]. En este contexto, se ha avanzado en la investigación y desarrollo de ciclos termodinámicos y bombas de calor que operan con fuentes de calor de desecho industrial de temperaturas entre 80 y 300 °C [3]. El objetivo principal radica en aprovechar esta energía desaprovechada para producir electricidad, enfriamiento y/o calefacción, ya sea mediante sistemas novedosos o combinaciones de sistemas individuales. Los sistemas de enfriamiento por absorción (o bombas de calor) han sido objeto de numerosos trabajos de investigación debido a su gran versatilidad en operación. Se han estudiado aspectos como la utilización de diversos fluidos de trabajo, mejoras en el ciclo termodinámico y modificaciones en componentes [4]. Estos sistemas se clasifican en tres tipos. Las bombas de calor tipo I generan enfriamiento suministrando energía calorífica de una fuente a temperatura más alta. Las bombas de calor tipo II, revalorizan la energía de temperatura media a alta mediante el proceso de absorción. Por último, la bomba de calor tipo III modificada (MAHP) combina los tipos I y II para producir energía eléctrica [5]. Otro sistema adecuado para operar con fuentes de calor de desecho industrial en diversos rangos de temperaturas es el Ciclo Orgánico de Rankine (ORC). La alta compatibilidad del ORC con diversas condiciones de operación y su simplicidad lo convierten en una opción preferida para la generación de energía eléctrica [6]. En el presente estudio, se propone un novedoso sistema de poligeneración que produce enfriamiento y energía eléctrica mediante la combinación de un sistema MAHP con un ORC. El objetivo principal de este sistema es lograr un uso más eficiente de la energía, ya que puede ser alimentado por fuentes de calor de desecho industrial y/o energías renovables. Con esta combinación, se busca aprovechar al máximo los recursos disponibles y reducir el impacto ambiental de las operaciones industriales.

METODOLOGÍA

El sistema propuesto de poligeneración consiste en la unión de tres subsistemas: una bomba de calor modificada (MAHP) [5], un ciclo de refrigeración por absorción tipo I, y un Ciclo Orgánico de Rankine (ORC) Regenerativo, tal como se muestra en la **Figura 1**. La bomba de calor modificada (MAHP) y el ciclo de refrigeración tipo I utilizan como fluido de trabajo la mezcla H₂O-LiBr como fluido de trabajo, mientras el ORC emplea R123. En general, el sistema es alimentado energéticamente por dos fuentes de calor, la primera a alta temperatura mayores a 120 °C (alimentada al generador de alta temperatura G_H), y la segunda a temperatura aproximadas a 70 °C (alimentada al generador de baja temperatura G_L). La expansión de la turbina emplea el máximo gradiente de presión del sistema para garantizar la mayor generación eléctrica (\dot{W}_{T1}). Por su parte, el evaporador a baja presión (E_L) es el componente que se encarga de proveer el servicio de enfriamiento. Finalmente, el calor revalorizado producido por la bomba de calor modificada (Q_{A_H}) se suministra al ORC regenerativo, el cual proveerá de mayor capacidad de generación de energía eléctrica (\dot{W}_{T2}).

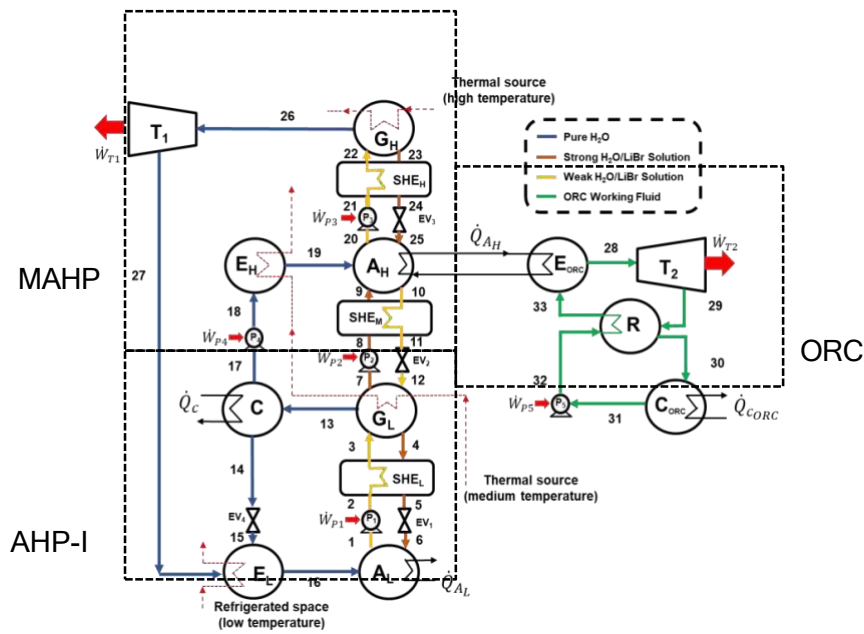


Figura 1. Sistema de poligeneración conformado por una bomba de calor modificada (MAHP), un ciclo de refrigeración tipo I (AHP-I), y un ORC regenerativo.

Respecto a los parámetros de rendimiento del sistema global, se calcula una eficiencia térmica (η_{th}) y una eficiencia exergética (η_{ex}). La η_{th} se define como la razón entre la salida de energía útil del sistema y el suministro de energía total de entrada. Por su parte, la η_{ex} representa la máxima energía que se puede obtener en forma de trabajo al pasar de un estado termodinámico arbitrario hasta las condiciones ambientales, ya que representa la degradación de la calidad de distintos tipos de energía [5].

$$\eta_{th} = \frac{\dot{W}_{T_1} + \dot{W}_{T_2} + Q_{E_L}}{Q_{G_H} + Q_{G_L} + Q_{E_H} + W_{P_1} + W_{P_2} + W_{P_3} + W_{P_4} + W_{P_5}} \quad \text{Ec. 1}$$

$$\eta_{ex} = \frac{W_{T_1} + W_{T_2} + Q_{E_L} \left(1 - \frac{T_o}{T_E}\right)}{Q_{G_H} \left(1 - \frac{T_o}{T_{G_H}}\right) + Q_{G_L} \left(1 - \frac{T_o}{T_{G_L}}\right) + Q_{E_H} \left(1 - \frac{T_o}{T_{E_H}}\right) + \sum W_P} \quad \text{Ec. 2}$$

Donde \dot{W}_{T_1} y \dot{W}_{T_2} representan el trabajo producido por las turbinas; Q_{E_L} es el calor de enfriamiento; Q_{G_H} , Q_{G_L} y Q_{E_H} representan la energía de activación o suministro por la fuente alternativa de energía (calor de desecho industrial); \dot{W}_{P_1} - \dot{W}_{P_5} representan la energía consumida por las bombas. Por su parte, T_{E_L} , T_{G_H} , T_{G_L} y T_{E_H} son las temperaturas correspondientes al equipo que indica su subíndice; y T_o es la temperatura ambiente (25 °C).

Todas las temperaturas de **Ec. 2** están en unidades absolutas. Además, se determina el parámetro de toneladas CO₂ eq. evitadas/año. Este parámetro indica las toneladas de CO₂ que se evitaron mediante la energía eléctrica que produce el sistema propuesto de forma sustentable.

$$\text{ton CO}_2 \frac{\text{eq. evitadas}}{\text{año}} = W_{\text{neto}} * F_{\text{CO}_2 \text{eq.}} \quad \text{Ec. 3}$$

Donde \dot{W}_{neto} tiene unidades de kW y $F_{\text{CO2eq.}} = 0.423$ ton CO₂ eq. evitadas/kW. El modelamiento termodinámico del sistema se llevó a cabo con el software Engineering Equation Solver (EES) tomando en cuenta las siguientes suposiciones: a) el sistema se encuentra en equilibrio termodinámico y en estado estacionario, b) las pérdidas de energía calorífica hacia los alrededores y las pérdidas por fricción no son consideradas, c) las válvulas de expansión se consideran isoentálpicas durante el proceso, d) las eficiencias isoentrópicas de las bombas, las turbinas e intercambiadores son de 0.80, 0.85, y 0.70 respectivamente. Para el modelamiento termodinámico del sistema global propuesto se resuelven los balances de materia y energía en cada componente y partiendo de las suposiciones anteriores. A continuación, se muestran las ecuaciones fundamentales de los balances de materia y energía, respectivamente.

$$\sum \dot{m}_{in} = \sum \dot{m}_{out} \quad \text{Ec. 4}$$

$$0 = Q - W + \sum \dot{m}_m h_{in} - \sum \dot{m}_m h_{out} \quad \text{Ec. 5}$$

Para la modelación termodinámica del ciclo propuesto se consideraron diversos parámetros como condiciones iniciales de simulación, tomando para T_{GL} , T_C , T_{GH} , valores de 70, 30 y 120 °C, respectivamente, y para \dot{m}_R como 1 kg/s.

RESULTADOS Y DISCUSIONES

Para el estudio general se hicieron diversos análisis paramétricos, poniendo especial énfasis en el aumento bruto de temperatura (GTL), las relaciones de flujo másico FR1 (caso de mayor producción de energía eléctrica) y FR2 (caso de mayor producción de enfriamiento). En la **Figura 2** se muestra la variación de la energía revalorizada GTL_H respecto a los rendimientos térmicos y exergéticos globales del sistema de poligeneración propuesto.

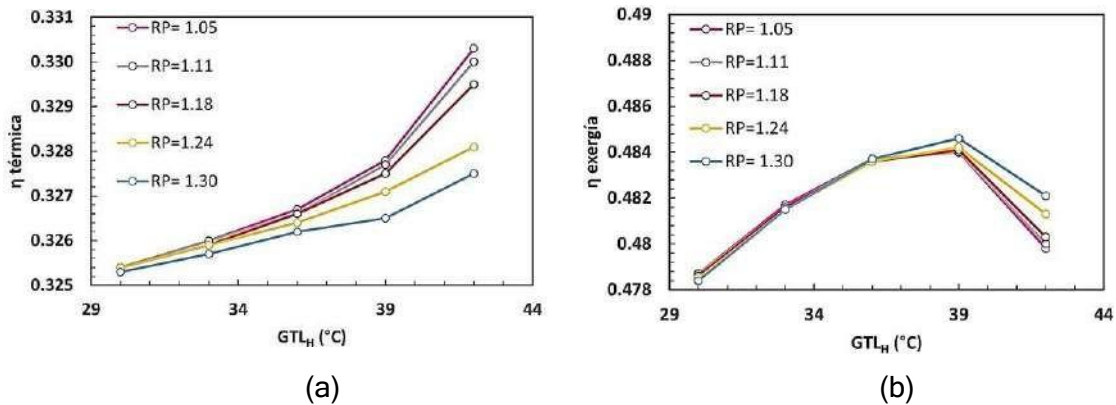


Figura 2. Efecto de la variación de GTL_H sobre los parámetros de desempeño a) η_{th} , b) η_{ex} . (FR1= 3.15, FR2=0.53).

El GTL_H representa la energía útil y revalorizada por el MAHP para mejorar la producción secundaria de energía eléctrica (la energía térmica que se produce en el A_H y que se suministra en el ORC). Por tanto, como era de esperar, el rendimiento global η_{th} aumenta a medida que se incrementa la demanda de revalorización de energía (a mayores GTL_H). Este comportamiento creciente se observa en todas las condiciones. El sistema de poligeneración se ve favorecido debido al aumento de \dot{W}_{T2} en la turbina del ORC, como se muestra en la **Figura 1** y se describe

en la **Ec. 1**. Sin embargo, el rendimiento η_{ex} no presenta un comportamiento constante y creciente, ya que alcanza su punto máximo a $39\text{ }^{\circ}\text{C}$ de GTL_H , con un valor de 0.484. Este máximo en el rendimiento del sistema de poligeneración significa que, al incrementar la energía de revalorización, también aumentan las cargas térmicas de suministro, lo que afecta inversamente los coeficientes de desempeño (ver denominadores en **Ec. 1** y **Ec. 2**). Así, se identifican las condiciones óptimas de operación que generan la mejor relación de energía entregada por cada unidad de energía suministrada. En las condiciones establecidas, el sistema de poligeneración alcanza valores de η_{th} entre 0.325 y 0.330, y valores de η_{ex} entre 0.479 y 0.484, con un GTL_H máximo de $42\text{ }^{\circ}\text{C}$. En la **Figura 3** se muestra el efecto de la relación de flujos másicos FR_1 y FR_2 sobre los parámetros de desempeño del sistema. Es importante destacar que la variación de FR_1 mejora la producción de energía eléctrica en el sistema global al aumentar el flujo másico de refrigerante (\dot{m}_{26}) en \dot{W}_{T1} , mientras que FR_2 aumenta el flujo másico de refrigerante (\dot{m}_{14}) para mejorar la capacidad de enfriamiento (Q_{EL}) del sistema de poligeneración.

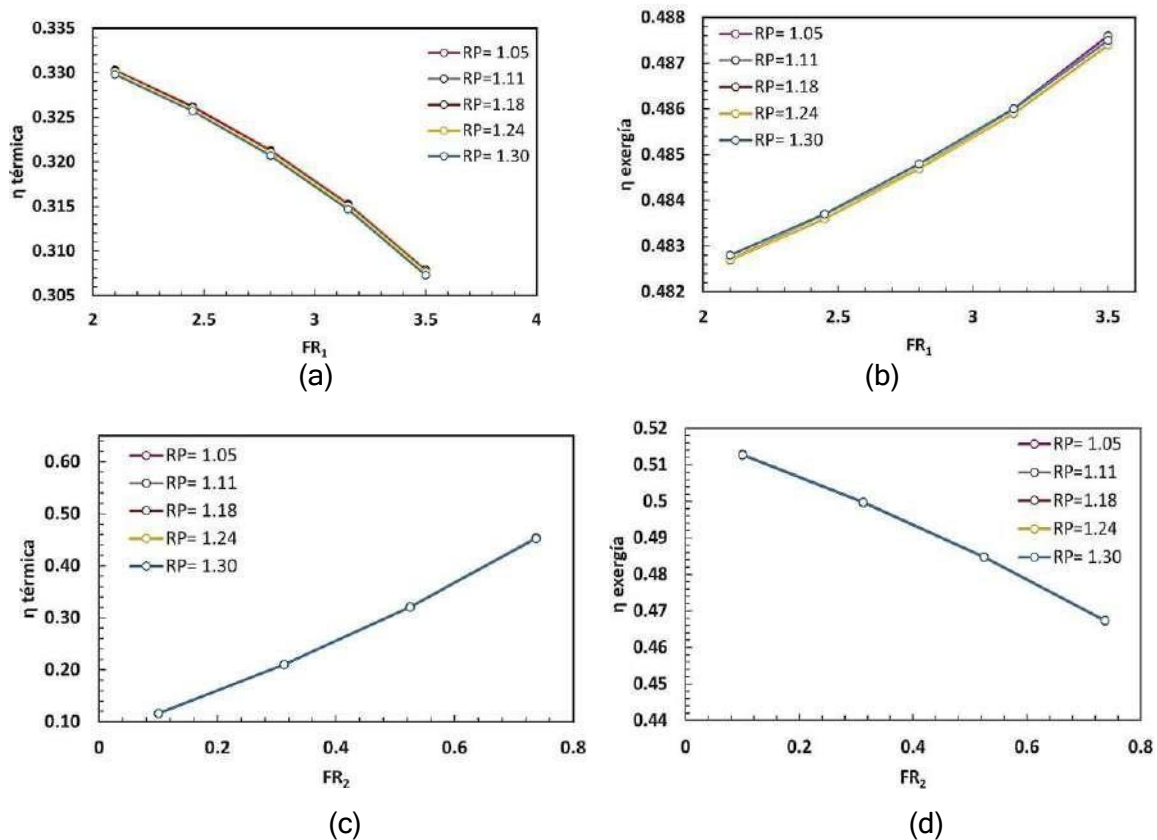


Figura 3. Efecto de las variaciones de FR_1 (a-b) y FR_2 (c-d) sobre los parámetros de desempeño, η_{th} , y η_{ex} . $GTL_H = 39\text{ }^{\circ}\text{C}$.

Las **Figuras 3a** y **3b** muestran que la variación del parámetro FR1 es prácticamente independiente de la relación de presiones RP del sistema. En cuanto a la eficiencia térmica (η_{th}), se observa una tendencia decreciente al aumentar los valores de FR1 desde 2 hasta 3.6. Esta disminución en η_{th} se debe a que el incremento en la producción de energía eléctrica no compensa la reducción en la capacidad de enfriamiento (Q_{E_L}) que ofrece el sistema. Por otro lado, la eficiencia exergética (η_{ex}) se beneficia al aumentar los trabajos producidos por las turbinas, ya que la energía eléctrica tiene mayor calidad que la energía térmica. Por ende, la eficiencia exergética global del proceso muestra un comportamiento creciente lineal, alcanzando su valor máximo cuando FR1 está cerca de 3.5, con un valor de η_{th} de 0.4875. En cuanto a las **Figuras 3c** y **3d**, se observa que el aumento en FR2 tiene un impacto significativo en la eficiencia térmica del proceso, aumentando de 0.10 a 0.42 en el rango de FR2 de 0.10 a 0.75, respectivamente. Sin embargo, la eficiencia exergética disminuye de 0.51 a 0.46 en este mismo rango de operación de FR2. Esto implica que se sacrifica la eficiencia en el proceso para favorecer la producción de enfriamiento. Es importante destacar que la influencia del parámetro FR2 es limitada, ya que valores cercanos a 1 llevarían al sistema de poligeneración fuera de su rango de operación.

CONCLUSIONES

En esta investigación se presenta un innovador sistema de poligeneración que utiliza fuentes de energía sustentable para generar electricidad, enfriamiento y calefacción. Este sistema se caracteriza por combinar una bomba de calor avanzada (MAHP) con un Ciclo Orgánico de Rankine (ORC) para potenciar la producción de energía eléctrica. El refrigerante R123 se utilizó en el ORC, lo que permitió alcanzar mejores valores en los parámetros de desempeño. El estudio general incluyó diversos análisis paramétricos, destacando el aumento bruto de temperatura (GTL) y las relaciones de flujo másico FR1 (para mayor producción de energía eléctrica) y FR2 (para mayor producción de enfriamiento). Los resultados de los estudios paramétricos revelaron que mayores relaciones de flujo FR1 mejoran los coeficientes exergéticos del sistema de poligeneración, al aumentar la producción de energía eléctrica en todo el proceso. Por otro lado, altos valores de FR2 favorecen la producción de enfriamiento, mejorando la eficiencia térmica global, mientras que valores bajos priorizan la generación de energía eléctrica en las turbinas. El sistema de poligeneración ofrece versatilidad para adaptarse a diversos propósitos prácticos. Según la modelación termodinámica, este sistema compuesto puede generar hasta 6,000 kW de enfriamiento y 630 kW de electricidad. Además, se estima que el sistema propuesto tiene la capacidad de evitar hasta 2,300 toneladas de CO₂ eq/año al utilizar fuentes térmicas sustentables como solar, geotermia, biomasa y calor residual industrial. Así, se presenta una solución novedosa y alternativa que emplea energías renovables para mejorar la eficiencia energética de los procesos y reducir las emisiones de efecto invernadero asociadas a sistemas convencionales.

REFERENCIAS

- [1] E. Garofalo, M. Bevione, L. Cecchini, F. Mattiussi, and A. Chiolerio. Waste Heat to Power: Technologies, Current Applications, and Future Potential. *Energy Technology* 2020 8(11).
- [2] L. Miró, S. Brückner, and L. F. Cabeza. Mapping and discussing Industrial Waste Heat (IWH) potentials for different countries. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 2015, 51, 847-855.
- [3] W. Chen, Z. Huang, and K. J. Chua. Sustainable energy recovery from thermal processes: a review. *Energy, Sustainability and Society* 2022, 12(1).
- [4] A. Alimgazin, G. Merzadinova, I. Sultanguzin, Y. Yavorovsky, A. Bartenev, and A. Berguzinov. Prospects for the use of absorption cooling and heating technologies to improve the energy efficiency of various facilities in the Republic of Kazakhstan. *AIP Conference Proceedings*, 2022.
- [5] J. A. Hernández-Magallanes, L.A. Domínguez-Inzunza, S. Lugo-Loredo, K. C. Sanal, A. Cerdán-Pasarán, S. Tututi-Avila, L. I. Morales. Energy and Exergy Analysis of a Modified Absorption Heat Pump (MAHP) to Produce Electrical Energy and Revaluated Heat. *Processes* 2022, 10, 1567.
- [6] R. Loni, G. Najafi, E. Bellos, F. Rajaei, Z. Said, and M. Mazlan. A review of industrial waste heat recovery system for power generation with Organic Rankine Cycle: Recent challenges and future outlook. *Journal of Cleaner Production* 2021, 287.

Películas delgadas de ZnO/Al/Ag en aplicaciones fotocatalíticas y fotoelectroquímicas para obtención de Hidrógeno

Películas delgadas de ZnO/Al/Ag en aplicaciones fotocatalíticas y fotoelectroquímicas para obtención de Hidrógeno

Gilbert Ortiz Rabell^{1*}, Isaías Juárez-Ramírez¹, María Rocío Alfaro Cruz^{1, 2}

¹Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ingeniería Civil, Departamento de Ecomateriales y Energía, Ciudad Universitaria, San Nicolás de los Garza, Nuevo León, C.P. 66455, México.

² CONACYT-Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ingeniería Civil, Departamento de Ecomateriales y Energía, Ciudad Universitaria, San Nicolás de los Garza, Nuevo León, C.P. 66455, México

*e-mail del autor de correspondencia/ e-mail correspondence autor: gilbertortizrabell@gmail.com

RESUMEN.

La síntesis de sistemas bimetalicos de ZnO/Al/Ag depositadas sobre sustrato de vidrio se llevó a cabo mediante la combinación con el método sol-gel y spin-coating. Las películas se caracterizaron por diferentes técnicas como XRD, UV-Vis, SEM, AFM y EIS. También se realizaron ensayos fotocatalíticos y fotoelectroquímicos para analizar el comportamiento de las películas y el efecto proporcionado por los elementos metálicos Al y Ag en el ZnO. Los resultados mostraron que las películas con elementos bimetalicos tienen un comportamiento mejorado en términos de transferencia de carga observada en la celda PEC, donde se obtuvieron valores de hasta 0,8 mA/cm² para ZnO/80/20. De hecho, esta película produce la mayor cantidad de hidrógeno alcanzando los 53 μmol de H₂ después de 3 horas de reacción debido a la sinergia presentada por los elementos metálicos, lo que aumenta la velocidad de transporte de electrones debido a la mayor vida útil y la rápida velocidad de difusión de los electrones en el electrodo, pero también disminuye la capa de agotamiento permitiendo que los electrones tengan que viajar una distancia menor antes de reaccionar. En conclusión, Al y Ag mejoran las propiedades fotoactivas de ZnO formando sistemas bimetalicos que en la proporción correcta mejoran la transferencia de carga y reducen la recombinación del par electrón-hueco favoreciendo la producción de hidrógeno y la generación de fotocorriente.

Palabras clave: Películas delgadas, semiconductores, Celda PEC y Producción de hidrógeno.

ABSTRACT.

The synthesis of bimetallic systems of ZnO/Al/Ag deposited on glass substrate was carried out by the combination of sol-gel and spin-coating methods. The films were characterized by different techniques such as XRD, UV-Vis, SEM, AFM and EIS. Photocatalytic and photoelectrochemical tests were also carried out to analyze the behavior of the films and the

effect provided by the metallic elements Al and Ag in the ZnO. The results showed that films with bimetallic elements have an improved behavior in terms of charge transfer observed in the PEC cell, where values of up to 0.8 mA/cm^2 were obtained for ZnO/80/20. In fact, this film produces the highest amount of hydrogen reaching $53 \mu\text{mol}$ of H_2 after 3 hours of reaction because of the synergy presented by the metallic elements, which increases the electron transport rate due to the longer service life and fast diffusion rate of the electrons at the electrode, but also diminish the depletion layer allowing that electrons will have to travel a smaller distance before reacting. In conclusion, Al and Ag improve the photoactive properties of ZnO forming bimetallic systems which in the correct proportion enhances the charge transfer and reduces the electron-hole pair recombination favoring hydrogen production and photocurrent generation.

Keywords: *Thin Films, Semiconductors, PEC Cell, and Hydrogen Production.*

INTRODUCCIÓN

La energía solar es una alternativa a la solución del problema existente en la demanda energética a nivel global si se hace un aprovechamiento adecuado. Se prevé que el consumo mundial de energía aumente un 28 % de 575 cuatrillones de unidades térmicas británicas (Btu) en 2015 a 736 cuatrillones de Btu en 2040 [1]. La recolección del 0,04% de la energía solar para producir 50 TW será suficiente para satisfacer la demanda mundial de energía. Uno de los enfoques efectivos y limpios para la producción de energía limpia es la división del agua impulsada por la energía solar, donde se liberan gases de hidrógeno (H_2) y oxígeno (O_2) [2]. Durante este proceso, la luz solar se absorbe utilizando un semiconductor adecuado que produce pares electrón-hueco ($e^- h^+$). Los huecos y los electrones se separan y se utilizan en la oxidación de H_2O para producir gases de oxígeno e hidrógeno, respectivamente. En comparación con otros combustibles fósiles, el H_2 puede producir una alta eficiencia siendo su combustible positivo para el medio ambiente [3]. Se han empleado diferentes semiconductores en aplicaciones PEC. Para garantizar una división de agua eficiente, un semiconductor adecuado debe tener una banda prohibida adecuada ($<2,5 \text{ eV}$) y una buena conductividad [4]. Sin embargo, encontrar un semiconductor que cumpla con estas dos condiciones es un desafío en la ciencia contemporánea actual [5]. Los materiales a base de ZnO son fotocatalizadores favorables para la producción fotocatalítica de hidrógeno debido a su bajo precio, no toxicidad, alta actividad y estabilidad química. Además, el ZnO se puede aplicar ampliamente a dispositivos fotovoltaicos, fotodegradación de contaminantes, reactivos antibacterianos, dispositivos electrocrómicos y sensores de gas [6-12]. Sin embargo, la amplia banda prohibida del ZnO (alrededor de $3,3 \text{ eV}$) conduce a una baja utilización de la luz visible, baja eficiencia de transferencia de carga y rápida recombinación del par electrón-hueco que también reducen su eficiencia cuántica fotocatalítica [13]. Para aumentar la actividad fotocatalítica del ZnO, se han hecho muchos esfuerzos para modificar/decorar los materiales semiconductores a base de ZnO. Se sabe a partir de la literatura que algunos de metales en semiconductores mejoran la absorción de luz visible, el movimiento mejorado de cargas y se han abordado aspectos mecánicos detallados que favorecen una mejor eficiencia fotocatalíticas [14,15]. Sin embargo, no se han realizado muchos estudios donde se utilice el uso de más de un metal noble simultáneamente en un semiconductor como por ejemplo ZnO. Según los informes de la literatura, muchos semiconductores bimetalicos en los que dos tipos diferentes de metales están presentes en la misma partícula, exhiben propiedades ópticas, catalíticas y electrónicas únicas [16]. Esta propiedad única lo diferencia de sus contrapartes monometálicas [17,18]. Por lo tanto, se espera que la

actividad fotocatalítica de ZnO, mejore con un sistema bimetalico, como AL/Ag [19]. En particular la Ag que se ha demostrado en sistemas binarios que sirve como sitios activos, facilita la captura de electrones fotoinducidos del semiconductor y luego reducir el H₂O de manera efectiva [20], lo que da como resultado una separación eficiente de las cargas fotogeneradas y una actividad fotoelectroquímica mejorada. En el proceso de fotorreacción, la plata sirvió como metal noble que puede evitar la corrosión e interactuar con la luz solar en la región visible e infrarroja [17,21]. Se observa que la plata (Ag) es un buen candidato para formar un nivel aceptor superficial en ZnO, lo que lo hace adecuado para diversas aplicaciones ópticas y fotocatalíticas. Las ventajas del dopaje con Ag incluyen una mejor distribución de la carga superficial, la aceptación de la banda de conducción (CB) formada durante la fotorreacción cuando se irradia con luz ultravioleta y la baja recombinación del par electrón-hueco fotogenerados [17,22,23]. Por otro lado, los metales de transición (Al, Cu, Ni, Ag, Co) muestran mejores propiedades que son adecuadas para aplicaciones fotocatalíticas, ya que estos metales tienen un radio iónico casi similar al ZnO [24,25]. El Aluminio ha sido el elemento dopante más utilizado debido a su pequeño radio iónico y bajo costo de material. Las estructuras con Al se utilizan en placas conductoras transparentes debido a su alta conductividad óptica y transparencia en la región visible [26,27]. La sustitución de iones Zn²⁺ por Al³⁺ en la red de ZnO mejora la conductividad eléctrica a través del aumento de portadores de carga donde se reporta que la concentración de electrones aumenta de 10¹⁶ a 10²¹ cm⁻³ [28,29,30]. Ambos metales se escogieron también ya que favorecen la formación de materiales bimetalicos en ZnO, debido a la diferencia de radios iónicos y electronegatividad lo que puede converger en una sinergia que mejorara las propiedades de absorción de luz y movimiento de cargas en las películas lo que tributara en una alta eficiencia fotocatalítica [13]. Además, se utilizó el método sol-gel para la síntesis de las películas de ZnO y las películas bimetalicas de ZnO/Al/Ag, debido a la facilidad de modificar las condiciones experimentales. Además, este método implica baja temperatura y puede cubrir un área grande. Así como, el cambio de parámetros como la concentración de los precursores y dopantes, la temperatura, el tiempo de envejecimiento, etc., mejoran las propiedades finales de las películas [17,31,32]. En esta investigación se sintetizaron con éxito películas de ZnO y películas bimetalicas de ZnO/Al/Ag, para la evaluación fotocatalítica de hidrógeno. También se analizaron los efectos de los radios iónicos en las películas, la transferencia y acumulación de cargas en una celda PEC.

METODOLOGÍA

Síntesis de los materiales.

La solución precursora de ZnO se preparó mezclando una solución 0.75 M de acetato de zinc (J.T. BAKER, 99.4%) con 0.03 M de dietanolamina (Sigmo-Aldrich, 98%) en 50 ml de etanol (Vetec, 99.8%). Ésta se mantuvo en agitación durante 2h a 70 °C para lograr una completa disolución de los reactivos, y posteriormente se pasó a envejecer 24 h antes del depósito. Para la preparación de las heterouniones se utilizó AgNO₃ (Fermont, 99.9%) y AlNO₃ (Fermont, 99.9%) en una solución de acetato de zinc en 50 ml de etanol y dietanolamina. De igual modo, la solución obtenida se mantuvo en agitación constante 70°C durante 2h, y posteriormente se puso en reposo 24 h previa al depósito. Se prepararon soluciones con diferentes concentraciones de los elementos metalicos, donde la primera solución fue de 80% de Aluminio y 20% de plata, la segunda fue de 50% para ambos y la tercera fue de 20% de Aluminio y 80% de Plata. Las soluciones precursoras fueron depositadas sobre sustratos de vidrio conductor ITO (Indium Tin Oxide, A = 2 cm²) por el método de spin coating para realizar la caracterización fotoelectroquímica y para las pruebas fotocatalíticas se depositaron sobre vidrio no conductor con un área de 18.75 cm² (MTI Corporation, VC-100PA). Primero, un volumen aproximado de 1 ml de solución se dejó caer sobre el vidrio conductor; posteriormente, se hizo girar a 2800 rpm durante 20s para

homogenizar la distribución de la solución sobre el sustrato y finalmente se pasó a darle un tratamiento térmico a 500 °C por 3h.

Caracterización de las películas.

El análisis de las propiedades estructurales de los sustratos se obtuvo por difracción de rayos X, donde se utilizó el equipo PANalytical Empyrean diffractometer. Las condiciones operacionales para el estudio fueron 40 kV y 40 mA, haciendo barridos en un intervalo de 10 a 70 grados en 2 theta, con un tamaño de paso de 0.02° por minutos, con una radiación de 1.5406 Å (0.1541 nm). Para el estudio de las propiedades ópticas se usó el espectrofotómetro UV-Vis (*Agilent Technologies, Cary 5000 UV-Vis-NIR*) en un rango de 200 a 800 nm de longitud de onda. Para medir los espectros de reflectancia difusa se utilizó una esfera integradora (Esfera de Ulbricht). La energía de banda prohibida (E_g) de las muestras fue determinada por la función de Kubelka-Munk. La superficie topográfica de las películas delgadas fue estudiada por microscopia de fuerza atómica AFM (*Nanosurf NaioAFM in contact mode*) cada muestra fue medida en un área de 3x3 μm , donde para cada escaneo se obtuvieron imágenes de 256 x 256 puntos. Para la caracterización fotoelectroquímica se usó un potenciostato-galvanostato (*AUTOLAB PGSTAT302N*). Las mediciones se realizaron en una celda electroquímica de tres electrodos; se usó un contra-electrodo de Pt, un electrodo de referencia de Ag/AgCl 0.5 KCl, y como electrodo de trabajo las películas de ZnO y ZnO/Al/Ag obtenidas, todo en un electrolito de NaOH a 0.1 M. Se usó una lámpara como simulador solar (Newport, Xenon de 450W, 66921). Se realizaron pruebas de cronoamperometría a un potencial de 1.23 V vs RHE, las curvas de Mott-Schottky se corrieron en un intervalo de -0.1V a 0.5 V vs RHE y el diagrama de Nyquist en 1.2 V vs RHE.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Se confirmó la estructura cristalina de las películas de ZnO y ZnO/Al/Ag mediante los difractogramas de DRX que se muestran en la Figura 1. Todas las películas presentan picos característicos del difractograma de ZnO con estructura cristalina hexagonal, los cuales coinciden con la tarjeta (01-079-0208) [17,18]. Los ángulos 31.91, 34.46, 36.30, 56.76 y 68.09 grados, pertenecen a los planos (100), (002), (101), (110) y (201), respectivamente [18,33].

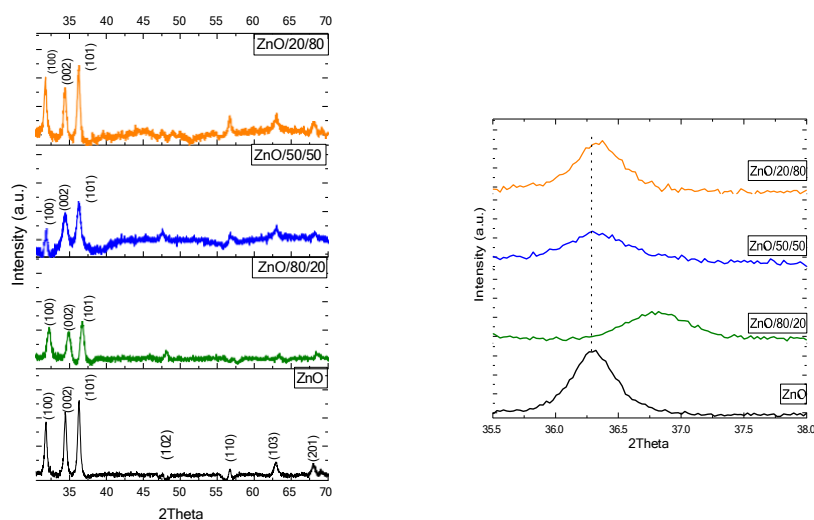


Figure 1. a) Patrón DRX de ZnO y ZnO/Al/Ag. (b) Patrones de DRX ampliados del pico (101) con desplazamiento respecto a ZnO.

El pico (101) se desplaza ligeramente hacia ángulos mayores respecto a la película de ZnO, en las películas con Al/Ag, siendo las películas ZnO/80/20 la que presenta mayor corrimiento [33,34,33,35,17,18,13,33,36,37]. La Tabla 1 muestra parámetros calculados a partir de los difractogramas de las películas.

Tabla I. DRX Parámetros.

Films	Cristalline Size (D) (101)	Angle (101)	Dislocation Density (nm) ⁻²	FWHM	Cell Parameters	
ZnO	20.38	36.30	0.00259	0.413	3.2450	5.204
ZnO/80/20	13.96	36.81	0.00513	0.594	3.2438	5.197
ZnO/50/50	15.48	36.32	0.00417	0.520	3.2426	5.199
ZnO/20/80	20.15	36.34	0.00246	0.427	3.2461	5.201

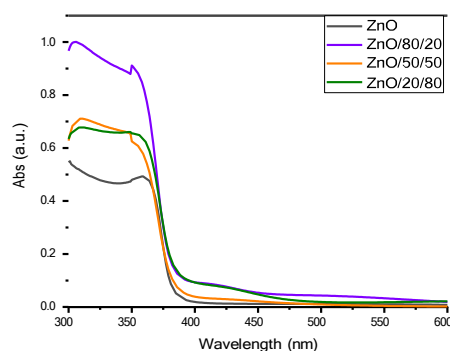


Figura 2. UV-Vis de ZnO y ZnO/Al/Ag.

La capacidad de absorción de luz de un catalizador es un parámetro muy importante que influye en la actividad fotocatalítica. Por lo tanto, se midieron los espectros de absorción de reflectancia difusa UV-vis de ZnO y ZnO/Al/Ag. La Figura 2. muestra que la absorción de luz de las muestras dopadas con iones metálicos es notablemente mejorada, en comparación con ZnO, tanto en la región de luz UV como visible. Siendo la película de ZnO/80/20 la que presenta mejores resultados tanto en la región UV como en el espectro visible desplazándose hasta el borde de absorción del amarillo, esto podría ser muy beneficioso para mejorar la actividad fotocatalítica de los materiales [13,17,39,40].

La imagen del microscopio de fuerza atómica (AFM) es muy útil para caracterizar la morfología y la rugosidad de la superficie a través de la raíz cuadrada media (RMS) y para determinar el tamaño del grano. Las Figuras 3 muestra respectivamente las imágenes de AFM ZnO/Al/Ag en sus respectivas concentraciones ZnO/80/20, ZnO/50/50 y ZnO/20/80. A partir de estas imágenes, se confirma una vez más que las características morfológicas de la superficie cambian con la concentración de elementos metálicos [42]. En la película ZnO/80/20, la rugosidad aumenta y el valor de rugosidad para las películas delgadas es de 12.93 nm [43].

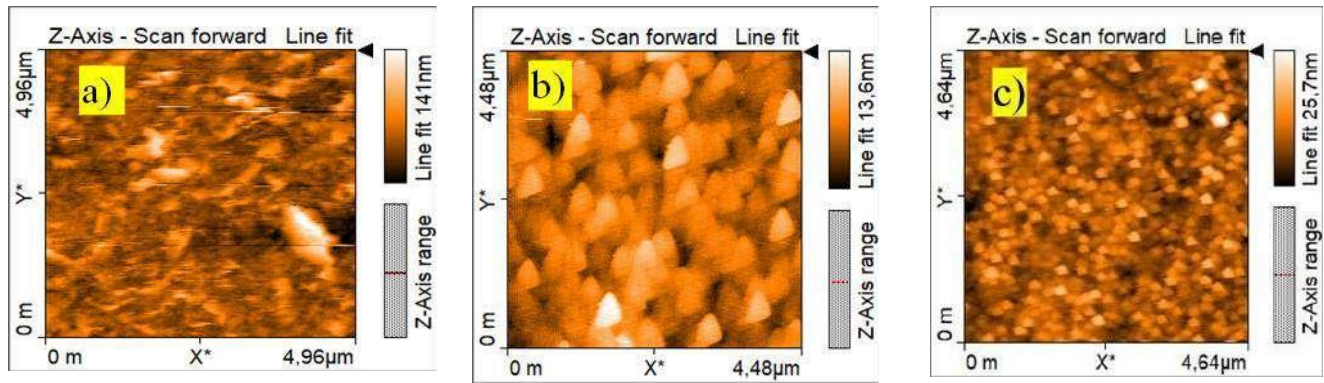


Figura 3. AFM de ZnO/Al/Ag a) ZnO/80/20, b) ZnO/50/50 y c) ZnO/20/80.

La Figura 4a muestra la espectroscopia de impedancia electroquímica la cual es una técnica bien conocida que se utiliza para estudiar el proceso de transferencia de carga en la interfaz semiconductor/electrolito. Los espectros de impedancia electroquímica (diagramas de Nyquist) para los electrodos de ZnO/Al/Ag. Los diagramas de Nyquist de los electrodos de ZnO y ZnO/Al/Ag mostraron sistemáticamente curvas de semicírculos con sus diámetros cambiando al variar la cantidad de Al/Ag [44].

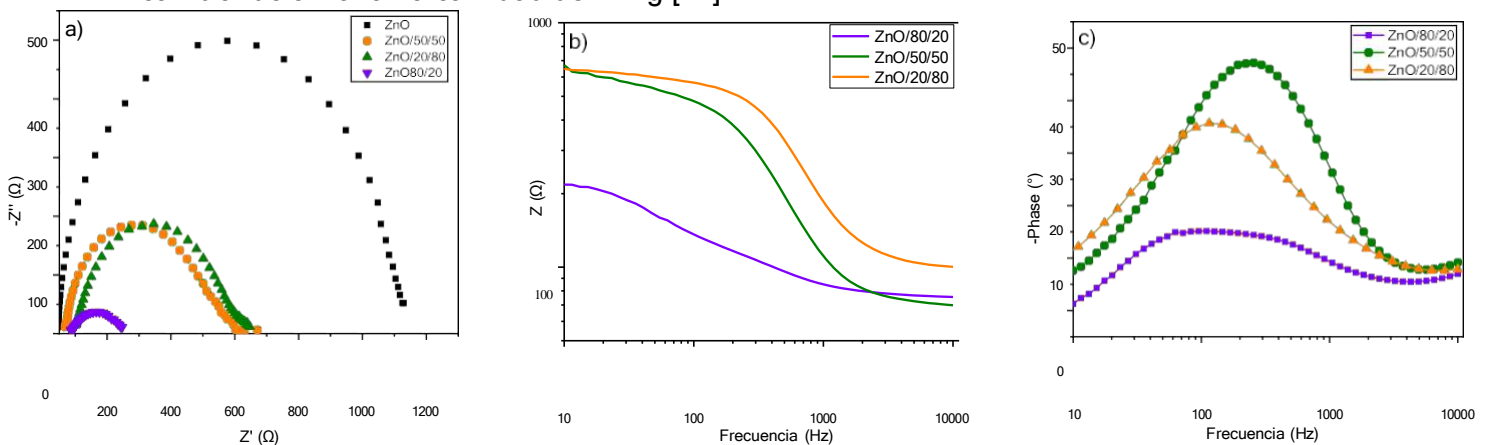


Figura 4. a) Nyquist plot de ZnO/Al/Ag y b) diagrama de bode.

Considerando el diagrama de Bode Modulus Figura 4b, la impedancia $|Z|$ presenta un comportamiento decreciente en bajas frecuencias en función de la frecuencia logarítmica, seguido de una línea constante en todo el rango de altas frecuencias. Está claro que, en el límite de baja frecuencia (10 Hz), la impedancia $|Z|$ ha disminuido significativamente en la película ZnO/80/20, con las demás películas. Se puede percibir un comportamiento similar en el gráfico del ángulo de fase (Figura 4c) frente a la frecuencia logarítmica. Por otro lado, como se ilustra en la Figura 5c, la magnitud del ángulo de fase permanece constante en la vecindad de $10-50^\circ$, con un pequeño cambio hacia frecuencias más bajas, el cambio de las magnitudes del ángulo de fase y el desplazamiento de los picos pueden tener su origen en la dispersión de frecuencia y la fácil transferencia de carga, respectivamente en ZnO/80/20. La disminución del módulo $|Z|$ así como el cambio de ángulo de fase en su pico máximo, puede originar una mayor movilidad de portadores, reduciendo la resistencia de la transferencia de carga en la película ZnO/80/20 [45,46]. De lo anterior y para apoyar los resultados anteriores en cuanto a transferencia de portadores de cargas, se puede estimar a partir del pico de frecuencia máxima la vida útil de los electrones para todas las muestras

$\tau_e = 1/2\pi f_{max}$ [46,47], donde f_{max} es la frecuencia máxima de los picos de frecuencia media en los diagramas de fase de Bode Figura 4c. El alto valor de τ_e sugiere que los electrones tienen una vida útil más larga y una tasa de difusión rápida en el electrodo. el valor de vida útil más alto de los electrones se obtiene para la película ZnO/80/20, 2 ms, para ZnO/50/50 y ZnO/20/80 0.6 ms y 1 ms respectivamente. Este comportamiento puede explicarse por el hecho de que la película ZnO/80/20 tiene una buena estructura cristalina con una adecuada cantidad de elementos de Al y Ag, lo que es útil para aumentar la tasa de transporte de electrones, lo que a su vez mejora la transferencia de carga. El arreglo en ZnO/80/20 hace que los electrones se transmitan mejor del electrodo de trabajo al contraelectrodo con una transferencia de carga rápida, lo que conduce a una menor recombinación superficial que mejorará la actividad fotocatalítica [48].

Se realizaron mediciones de Mott-Schottky (M-S) en las películas de ZnO y ZnO/Al/Ag para investigar las propiedades electrónicas de las películas en la zona capacitiva entre el material y el electrolito. La Figura 5 muestra que las pendientes de las curvas fueron todas positivas, lo que indica que todas las películas son de tipo-*n*, también se observó como la pendiente se va haciendo más pequeña en las películas de ZnO/Al/Ag, siendo ZnO/80/20 la película con pendiente menor. La densidad de portadores y los potenciales de banda plana se estimaron utilizando la ecuación $N_D = (2/q * \epsilon * A^2 * \epsilon_0) [d(1/C^2)/dv]^{-1}$ [5,49], Donde: q -representa la carga del electrón, ϵ -representa la permitividad el material. ϵ_0 -representa la permitividad eléctrica en el vacío y A es el área superficial del electrodo. El elemento diferencial en la ecuación representa el valor de la pendiente tangente a la recta en la Figura 5.

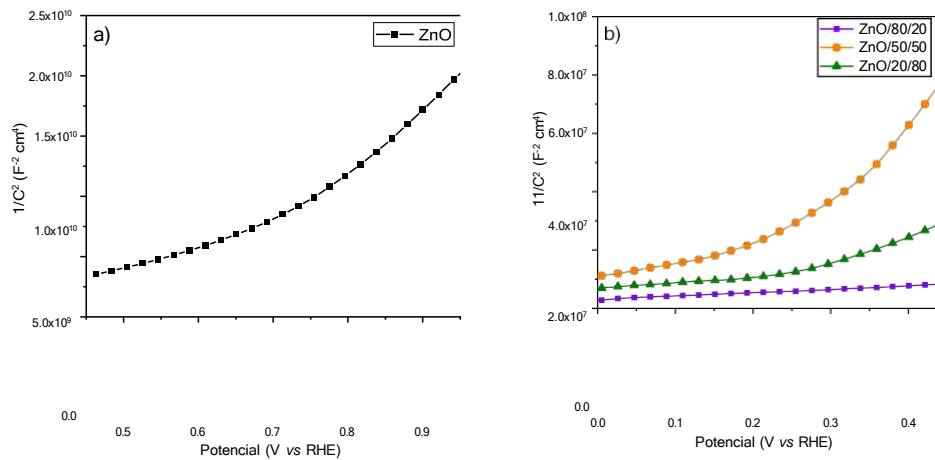


Figura 5. Curvas de Mott-Schottky de ZnO y ZnO/Al/Ag.

El potencial de banda plana de las películas de ZnO, ZnO/80/20, ZnO/50/50 y ZnO/20/80 se obtuvo como 0,5, -0,1, 0,05 y 0,1 V vs RHE, respectivamente. Las densidades de donantes fueron 5.4×10^{18} , 2.7×10^{21} , 2.7×10^{20} y $7.6 \times 10^{20} cm^{-3}$ para ZnO, ZnO/80/20, ZnO/50/50 y ZnO/20/80 respectivamente (Tabla II). Hubo un aumento en dos órdenes en la densidad de donadores para a ZnO/80/20 en comparación con ZnO. Este aumento en N_D y el cambio negativo del potencial de banda plana E_{FB} pueden llevar a la mejora en la fotocorriente en la película ZnO/80/20. La conductividad mejorada podría haber conducido aún más a la transferencia de electrones superficiales, reduciendo la recombinación de electrones y huecos, favoreciendo así un potencial de inicio bajo [50,51].

Tabla II. Densidad de donadores y Flat band.

Películas	Flat band E_{FB} (V)	Densidad de donadores N_d (cm^{-3})	Longitud de Debye nm
ZnO	0.50	5.4×10^{18}	1.60
ZnO/80/20	-0.10	2.7×10^{21}	0.07
ZnO/50/50	0.05	2.7×10^{20}	0.20
ZnO/20/80	0.10	7.6×10^{20}	0.13

Como se muestra en la Figura 6, se determinaron las mediciones de cronoamperometría en función de densidad de fotocorriente y tiempo ($J-t$) de las películas en condiciones de iluminación cortada (luz solar simulada, 100 mW/cm^2) a un voltaje aplicado de 1.23 V vs RHE . Todas las muestras produjeron fotocorriente estable en el tiempo que se corrió la prueba (300 s). La película delgada de ZnO tiene una densidad de fotocorriente de 0.1 mA/cm^2 . Las densidades de fotocorriente más altas se obtuvieron para la película de ZnO/80/20 siendo de 0.8 mA/cm^2 , las películas de ZnO/50/50 y ZnO/20/80 tuvieron densidades de fotocorrientes de 0.15 mA/cm^2 y 0.2 mA/cm^2 respectivamente.

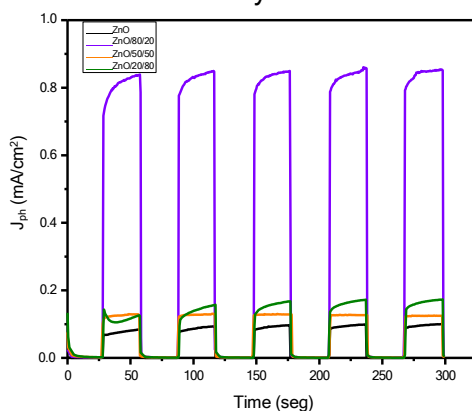


Figura 6. Densidad de fotocorriente de las películas ZnO/Al/Ag en función del tiempo.

La respuesta de fotocorriente mejorada en las películas de ZnO/Al/Ag especialmente en ZnO/80/20 es probable debido a una mejor absorción de luz en los sistemas bimetalícos demostrado por las pruebas de UV-Vis, donde el efecto de Ag produce una mayor absorción en el espectro visible y una disminución del *band-gap*. Lo anterior se puede apoyar por la presencia de un tamaño de cristalito más pequeño en ZnO/80/20, lo que favorece el desempeño fotocatalítico de las películas y la formación de áreas en las películas con mayores sitios activos que lo favorecen [19,44]. A esta concentración de Al/Ag adecuada, el aluminio y la plata han formado pequeñas esferas en la red de ZnO y, en consecuencia, no hay dispersión de ambas en ZnO. Dado que la función de trabajo de la Plata y Aluminio es menor que la afinidad electrónica del ZnO, esto crea un campo eléctrico en la interfaz ZnO/Al/Ag lo cual contribuye a la separación del par electrón-hueco. Por lo tanto, la probabilidad de recombinación disminuye seguida de una alta incidencia a la luz. La Figura 7 muestra la producción fotocatalítica de hidrogeno para las diferentes concentraciones de Al/Ag siendo la película de ZnO/Al/Ag la que mejor resultado presentó

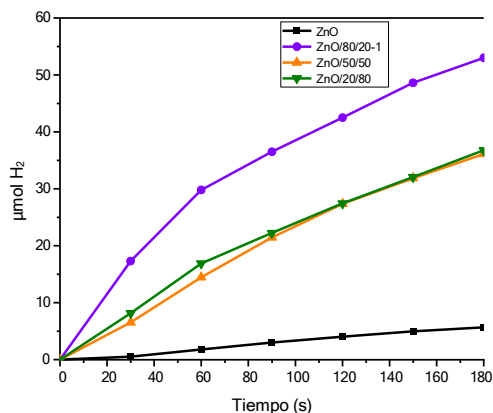


Figura 7. Actividad fotocatalítica de producción de H₂ de ZnO y ZnO/Al/Ag.

CONCLUSIONES

De acuerdo con los resultados obtenidos, se encontró que la unión de Ag y Al, en películas de ZnO, permite la formación de películas semiconductoras. La formación de las películas fue identificada mediante DRX, donde se pudo observar la obtención de las estructuras cristalinas de todas las películas de ZnO y ZnO/Al/Ag; además, se encontró una disminución del tamaño de cristal en ZnO/Al/Ag respecto al ZnO. Se determinó que la película ZnO/Al/Ag, preparada por el método de Sol-Gel, presenta valores de E_g ligeramente menor al ZnO puro. Las películas de ZnO/Al/Ag, presentaron granos de forma esférica y mayor rugosidad mostrada en las micrografías de AFM. Se determinó que la película ZnO/Al/Ag presentó mejor transferencia de carga y baja resistencia, así como un aumento en la densidad de donadores en la interfase semiconductor/electrolito. Esto fue evidenciado mediante la caracterización fotoelectroquímica, a través de la voltamperometría cíclica, Nyquist y cronoamperometría. Se encontró que las películas ZnO/Al/Ag presentaron una mayor producción de hidrógeno vía fotocatalisis, en comparación con la película de ZnO. Este resultado se asocia con la presencia de una mayor cantidad de sitios activos provocados por la especie metálica. A su vez, Ag y Al actúan como un captador de electrones, disminuyendo la recombinación, tal y como se estimó por análisis fotoelectroquímico.

REFERENCIAS

- [1] Meng, J., et al. (2020). Journal of environmental management 268: 110701.
- [2] Qiu, Y., et al. (2014). Nano letters 14(4): 2123-2129.
- [3] Wheeler, D. A., et al. (2012). Energy & Environmental Science 5(5): 6682-6702.
- [4] Tsege, E. L., et al. (2016). Journal of Physics and Chemistry of Solids 98: 283-289.
- [5] Nyarige, J. S., et al. (2022). Nanomaterials 12(3): 366.
- [6] Gao, Q., et al. (2019). International Journal of Hydrogen Energy 44(16): 8011-8019.
- [7] She, P., et al. (2020). ACS Applied Materials & Interfaces 12(20): 23356-23362.
- [8] Nie, Y.-C., et al. (2018). Applied Catalysis B: Environmental 227: 312-321.
- [9] Noman, M. T., et al. (2019). Environmental Science and Pollution Research 26(4): 3262-3291.

- [10] Noman, M. T., et al. (2019). *Environmental Science and Pollution Research* 26(4): 3262-3291.
- [11] Chen, X. and S. S. Mao (2007). *Chemical Reviews* 107(7): 2891-2959.
- [12] Giampiccolo, A., et al. (2019). *Applied Catalysis B: Environmental* 243: 183-194.
- [13] Chen, D., et al. (2022). *International Journal of Hydrogen Energy* 47(18): 10250-10260
- [14] Hirakawa, T. and P. V. Kamat (2005). *Journal of the American Chemical Society* 127(11): 3928-3934.
- [15] Wen, Y., et al. (2011). *Nanoscale* 3(10): 4411-4417.
- [16] Sakai, T. and P. Alexandridis (2006). *Chemistry of Materials* 18(10): 2577-2583.
- [17] Rabell, G. O., et al. (2021). *Materials Science in Semiconductor Processing* 134: 105985.
- [18] Rabell, G. O., et al. (2022). *International Journal of Hydrogen Energy* 47(12): 7770-7782.
- [19] Ortiz Rabell, G., et al. (2022). *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry* 433: 114185.
- [20] Alkahlout, A., et al. (2014). "Synthesis and characterization of aluminum doped zinc oxide nanostructures via hydrothermal route."
- [21] Singh, O., et al. (2012). *Tagungsband*: 1009-1011.
- [22] Wang, P., et al. (2014). *The Journal of Physical Chemistry C* 118(17): 8891-8898.
- [23] Liu, Z., et al. (2017). *Solar Energy Materials and Solar Cells* 161: 46-51.
- [24] Kim, K., et al. (2012). *Nanoscale research letters* 7(1): 1-7.
- [25] Kumar, S., et al. (2016). *Journal of Materials Science: Materials in Electronics* 27(2): 2166-2173.
- [26] Cebulla, R., et al. (1998). *Journal of Applied Physics* 83(2): 1087-1095.
- [27] Vanaja, A., et al. (2016). *Indian Journal of Science and Technology* 9(12): 87013.
- [28] Kumar, B. and S.-W. Kim (2012). *Nano Energy* 1(3): 342-355.
- [29] Musat, V., et al. (2004). *Surface and Coatings technology* 180: 659-662.
- [30] Tyona, M., et al. (2018). *J Mater Phys Chem* 6: 9-16.
- [31] Villa Gómez, Katherine; et al. (2013). *Universitat Autònoma de Barcelona. 1 recurs electrònic* (186 p.). ISBN 9788449039799. Departament de Química.
- [32] Kothhao, K., et al. (2018). *MRS Advances* 3(36): 2129-2136
- [33] Patra, K. K. and C. S. Gopinath (2016). *ChemCatChem* 8(20): 3294-3311.
- [34] Ajala, F., et al. (2018). *Applied Surface Science* 445: 376-382.
- [35] D.R. Lide., et al. (2012) *Ionic radii in crystals*, in *CRC handbook of Chemistry and physics*, eds. W.M. Haynes and D.R. Lide, CRC Press/Taylor and Francis, Boca Raton, FL.
- [36] Wang, L., et al. (2015). *Journal of Alloys and Compounds* 623: 367-373.
- [37] Nethaji, P. and P. S. Kumar (2022). *Chemical Engineering Research and Design* 178: 356-368.
- [38] Ahmad, M., et al. (2013). *Current Applied Physics* 13(4): 697-704.
- [39] W.S. Hong, L.C. De Jonghe, X. Yang, M.N. Rahaman, *Reaction sintering of ZnO-Al₂O₃*, *J. Am. Ceram. Soc.* 78 (1995) 3217-3224.
- [40] Yahmadi, B., et al. (2020). *Nanomaterials* 10(8): 1507.
- [41] Gallardo, O. A. D., et al. (2012). *Rsc Advances* 2(7): 2923-2929.
- [42] Carrasco-Jaim, O. A., et al. (2020). *International Journal of Hydrogen Energy* 45(16): 9744-9757.
- [43] K. Kothhao, et al. *MRS Advances* 3 (36) (2018) 2129-2136.
- [44] S.S. Patil, et al. *J. Nanoparticle Res.* 16 (11) (2014) 2717.
- [45] Rajasekaran, M., et al. (2020). *Materials Research Express* 7(3): 036412.
- [46] Ngaffo, F. F., et al. (2007). *Applied Surface Science* 253(15): 6508-6511.
- [47] Dridi, D., et al. (2018). *Journal of Materials Science: Materials in Electronics* 29(10): 8267-8278.

- [48] Li, M., et al. (2014). *Journal of Materials Chemistry A* 2(19): 6727-6733.
- [49] Xi, L., et al. (2012). *Nanoscale* 4(15): 4430-4433.
- [50] Karyaoui, M., et al. (2020). *Inorganic Chemistry Communications* 119: 108114.
- [51] Landolsi, Z., et al. (2020). *Journal of Materials Science: Materials in Electronics* 31(23): 20753-20773.



VII CONGRESO INTERNACIONAL DE
QUÍMICA E INGENIERÍA VERDE

EJE TEMÁTICO 14

DESARROLLO SOSTENIBLE



Recubrimiento a base de desecho de poliuretano de la industria del calzado The coating is based on polyurethane waste from the footwear industry

Alba Yosselyn Urias Sandoval¹; Juan Carlos Alvarez Zeferino^{1,2}; Perla Xochitl Sotelo Navarro^{1,2,3*}

¹ Escuela Militar de Ingenieros, Av. Industria Militar 261, Lomas de San Isidro, 53960 Naucalpan de Juárez, Edo. de Méx.

² Área de Tecnologías Sustentables, Universidad Autónoma Metropolitana, Av. San Pablo 180, Col. Reynosa Tamaulipas, Alcaldía Azcapotzalco, C.P. 02200, México

³ IxM Investigadora por México CONACYT-Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN, Doctorado Transdisciplinario en Desarrollo Científico y Tecnológico para la Sociedad, Apdo. Postal 14-740, 07000, CDMX, México.

*Autor para correspondencia: perla.sotelo@cinvestav.mx

RESUMEN. El poliuretano (PU) es uno de los plásticos más usados y se utiliza en diversas aplicaciones, tales como aislantes, recubrimientos, adhesivos, entre otros, su versatilidad se debe a que los reactivos utilizados en su síntesis son muy variados, permitiendo un gran número de opciones de mezclado. Por otra parte, la fabricación de suelas para calzado es base de PU y se generan desechos los cuales son susceptibles de ser reciclados para disminuir su impacto ambiental. Este trabajo tuvo como objetivo la búsqueda e implementación de una técnica factible para el reciclado de desecho de PU. Se eligió la síntesis de un recubrimiento para evitar la corrosión de metales, la metodología consistió en tres etapas: obtención del poliuretano residual, evaluar diferentes concentraciones de recubrimiento y, por último, realizar pruebas de funcionamiento en diferentes materiales, como el acero, cerámica y madera. El PU residual fue obtenido de la industria de fabricación de botas, posteriormente se llevó a cabo una funcionalización y posteriormente se evaluaron diferentes concentraciones de poliuretano funcionalizado (PUF) para elaborar el recubrimiento (5, 15, 30 y 50 % respectivamente), el resto se formuló con una resina epóxica. Se determinó la densidad y viscosidad del recubrimiento. El recubrimiento se aplicó superficialmente sobre placas de acero al carbono aplicándolo con brocha, creando una capa fina, y se realizaron pruebas de corrosión por cámara salina. Los mejores resultados se presentaron al utilizar el 30 % de PUF. Los resultados obtenidos muestran que es posible obtener un recubrimiento utilizando PUF y resina epóxica, con ello se obtienen buenas propiedades físicas y mecánicas, se adhirió con facilidad al acero y el recubrimiento no se despega del material, de tal forma que la superficie queda protegida del ambiente, aumentando el tiempo de vida del material. El recubrimiento presenta beneficios en el aspecto económico y ambiental.

Palabras clave: desechos, poliuretano, reciclado, recubrimiento, síntesis.

ABSTRACT. Polyurethane (PU) is one of the most widely used plastics in various applications, such as insulators, coatings, and adhesives. Its versatility is because the reagents used in its synthesis vary, allowing many mixing options. On the other hand, the manufacture of soles for footwear is based on PU, and waste is generated, which can be recycled to reduce its environmental impact. This work had as an objective the search and implementation of a feasible technique for recycling PU waste. The synthesis of a coating was chosen to prevent the corrosion of metals; the methodology consisted of three stages: obtaining the residual polyurethane, evaluating different coating concentrations and, finally, performing performance tests on different materials, such as steel, ceramics, and wood. The residual PU was obtained from the boot manufacturing industry, later a functionalization was carried out, and later, different concentrations of functionalized polyurethane (PUF) were evaluated to make the coating (5, 15, 30 and 50%, respectively); the rest were formulated with an epoxy resin. The density and viscosity of the coating were determined. The coating was superficially applied on carbon steel plates by brushing, creating a thin layer, and salt spray corrosion tests were performed. The best results were presented when using 30% PUF. The results obtained show that it is possible to obtain a coating

using PUF and epoxy resin; with these good physical and mechanical properties obtained, it adhered easily to the steel, and the coating does not detach from the material in such a way that the surface is protected from the environment, increasing the lifetime of the material. The coating presents benefits in the economic and environmental aspects.

Keywords: waste, polyurethane, recycling, coating, synthesis

INTRODUCCIÓN

La contaminación ambiental causada por los residuos plásticos se ha incrementado en los últimos años, debido a sus múltiples usos en la vida cotidiana, sin embargo, hoy en día existen iniciativas para implementar una cultura del reciclaje y disminuir el impacto al ambiente, a través de industrias, programas ambientales y universidades.

De acuerdo con datos estadísticos realizados por la Organización de las Naciones Unidas (ONU), el consumo global de plásticos en el 2015 fue de 300 millones de toneladas, de los cuales solo el 9% fue reciclado y el 12% incinerado [1].

El poliuretano es un termoplástico del tipo poliéster blando del cual está hecho la suela de las botas. El (PU) consiste en secuencias rígidas de isocianatos y secuencias flexibles de poliéster o poli éteres. Las propiedades pueden variar en función de la naturaleza de las cadenas flexibles, de la naturaleza de las cadenas rígidas, de la longitud de estas. La importancia del material PU es que cuenta con una estructura entrecruzada reversible a través de los enlaces del tipo puente de hidrógeno, lo que le otorga la ventaja de poder ser procesados mediante, fundido y solución, además de que pueden ser reciclados [2].

En los últimos años el poliuretano se ha convertido en un material popular, debido a que al usarse como aislante térmico contribuye al ambiente reduciendo las emisiones de gas de efecto invernadero, fomenta la eficiencia energética, no tiene problemas con enfriar o calentar así que al usarse se obtiene un empleo de electricidad con un ahorro de hasta 80 %. Se puede decir que el uso del poliuretano al no necesitar tanta energía disminuye el uso de las plantas eléctricas, ya que mantienen la temperatura que necesitan, con esto el ritmo de trabajo disminuye y bajan los niveles de CO₂ permitiendo que el costo que se invierte en el aislamiento compense con creces el gasto energético inicial. Entonces se puede afirmar que al usar poliuretano se promueve una construcción sostenible, trabajando en conjunto con la naturaleza, para que ésta no se vea afectada [3].

La aplicación de poliuretano como impermeabilizante o aislante, es relativamente rápido a comparación de otros, además de esto, el poliuretano se ha popularizado por la gran gama de uso alrededor del mundo, como por ejemplo en el interior de los refrigeradores, sillas, carros, esponjas, aislantes térmicos, zapatos impermeabilizantes, entre otros [4].

Para la elaboración de la bota en la industria del calzado se destacan las máquinas de inyección de suela directa a corte, la cual trabaja con polioliol, isocianato, y reticulante, los cuáles al combinarse se convierte en poliuretano (PU). En la producción de la bota se desperdicia PU, la fábrica evaluada tiene un desperdicio aproximado de 300 kg por mes. El desecho de PU se tira en contenedores sin ninguna clasificación y no se cuenta con un sistema de reciclado para dicho plástico, la inyección del poliuretano en la bota dura aproximadamente 15 segundos, el poliuretano se solidifica en menos de un minuto y se corta alrededor de la bota la rebaba de poliuretano lo que genera un gran desperdicio.

Este trabajo planteó aprovechar los residuos del poliuretano (PU) que se utiliza para la fabricación de la bota, así como sus propiedades para crear un polímero semi-interpenetrado (semi-IPN) con la finalidad de utilizarlo como recubrimiento en acero al carbono e incrementar la vida útil de este material ante la corrosión. De tal forma, se permitirá reciclar el PU y fomentar una cultura en el reciclaje dentro de las instalaciones de la fábrica de calzado.

METODOLOGÍA

El desperdicio de PU en la fabricación de la bota fue el material que se utilizó en este trabajo de investigación, ya que se elimina en los depósitos de basura sin ningún tipo de tratamiento, a pesar de la importancia que en la actualidad se le debe de dar al cuidado al ambiente.

Se llevó a cabo la funcionalización del PU que consistió en generar el grupo funcional alcohol primario en el benceno de la cadena polimérica, se llevó a cabo mediante la reacción de formaldehído y la sal de Lewis cloruro de aluminio ($AlCl_3$). En un vaso de precipitado de 50 mL, se agregaron 5 mL de tetrahidrofurano (THF) anhidro, 1 g de PU, 3.65 mL de formaldehído y 1 g de cloruro de aluminio ($AlCl_3$). El vaso de precipitado se colocó en la parrilla a $100^\circ C$., con agitación continua. Después de aproximadamente 20 minutos, se retiró el vaso de precipitado. Finalmente, el polímero se dejó enfriar a temperatura ambiente por 24 horas. El producto final se identificó por espectroscopia FTIR, designándolo a partir de ahora como poliuretano funcionalizado (PUF).

Se formuló el recubrimiento de polímero semi-interpenetrado (semi-IPN) para lo cual se usaron los siguientes reactivos: el poliuretano funcionalizado (PUF), resina epóxica (RE), 4,4-Diaminodifenilmetano y THF, como el polímero lineal, resina entrecruzada, agente de curado y como solvente, respectivamente.

Se establecieron cuatro proporciones a evaluar con PUF, RE, amina y el solvente. A continuación, se muestra la tabulación con las cantidades establecidas para obtener 1 g de recubrimiento en cada formulación (**Tabla I**). Para dichos cálculos se utilizaron las ecuaciones y los cálculos estequiométricos de [5]. Para los estudios de aplicación en acero y corrosión las placas fueron elaboradas de un acero de bajo contenido de carbono del tipo AISI – 1018, las dimensiones de las probetas de prueba se presentan en la **Figura 1**.

Tabla I. Proporciones del recubrimiento

Proporción PUF-RE	PUF (g)	RE (g)	Amina (g)	THF (mL)
50-50 %	0.50	0.50	0.27	1
30-70 %	0.30	0.70	0.27	1
15-85 %	0.15	0.85	0.27	1
5-95 %	0.05	0.95	0.27	1

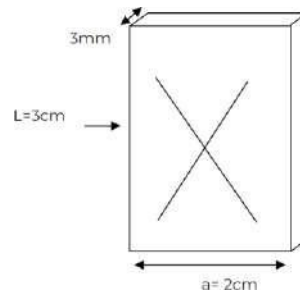


Figura 1. Dimensiones de las placas de acero

Previamente a la aplicación del recubrimiento, las placas se lijaron en el laboratorio de materiales, así mismo se desengrasaron con acetona y posteriormente se dejaron en el desecador por 1 día. Se prepararon placas por triplicado de cada una de las combinaciones de recubrimiento, a fin de tener suficientes para las evaluaciones. El recubrimiento se aplicó con brocha con el fin de que quedara lo más homogénea posible de forma que se obtuvo una capa fina y uniforme, las placas fueron colocadas en una mufla a $70^\circ C$ por dos horas.

Para determinar la debilidad de los recubrimientos protectores, se realizan ensayos, uno de ellos es el ensayo de corrosión: las muestras se exponen a un medio corrosivo, esta exposición puede ser continua o intermitente, la solución que más se emplea es la salina a diferentes concentraciones de cloruro de sodio (NaCl), la cual simula atmósfera marina [6]. En los ensayos de esta investigación se utilizó una concentración del 3 % en masa. Previo a la prueba de corrosión acelerada, se les realizó una hendidura en la película en forma de aspa, asegurando que traspasara y penetrara bien el metal. La prueba se realizó sumergiendo las placas en la

solución salina, se realizaron 5 ciclos equivalentes a 120 horas, llevando a cabo el registro de corrosión cada 24 horas. Se midió la corrosión en el aspa, una cruz marcada en las placas como referencia, con una regla la distancia máxima y mínima de extensión del aspa en una hoja milimétrica se realizaron las medidas de la extensión de la corrosión.

La determinación de las características del recubrimiento se llevó a cabo mediante diferentes técnicas, se utilizó la espectrofotometría por transformada de Fourier para la identificación analítica de los grupos funcionales, la viscosidad, densidad y el peso molecular.

Se definió el precio comercial de 1 kg de recubrimiento con base en el costo y cantidad de reactivos utilizados tanto para la funcionalización como para la formulación del recubrimiento, no se cuantificaron costos indirectos como los recursos utilizados.

RESULTADOS

Las características de la funcionalización fueron obtenidas de la unión covalente del grupo alcohol primario del benceno de la cadena polimérica. La formación del PUF fue líquida/sólida, es decir se obtuvo una pasta viscosa, la cual presentó un aspecto denso respecto al poliuretano sólido y rígido que se tenía en un inicio.

Las proporciones de recubrimiento presentaron características tanto físicas como mecánicas similares, el tiempo de curado para los recubrimientos fue el mismo (2 horas a 70° C), la aplicación del recubrimiento fue en este caso con brocha, sin embargo, se podría aplicar de igual manera por inmersión, dependiendo del acabado que se busque obtener.

Los sistemas de recubrimientos anticorrosivos y protectores son importantes para garantizar la funcionalidad y durabilidad de algunos materiales, esta investigación se centró en el comportamiento del acero frente a la corrosión, se evaluó en medio acelerado, utilizando una solución salina de cloruro de sodio, el grado de adherencia sobre la placa se determinó de manera cualitativa, mediante la aplicación del recubrimiento sobre la placa de acero, los resultados demostraron el efecto protector de las concentraciones evaluadas, presentando comportamientos similares frente el medio corrosivo, sin embargo las concentraciones de 50 y 30 % tuvieron una adherencia satisfactoria (Milano, 2017). En la tabla 2, se muestran la extensión de pérdida de adherencia del recubrimiento en las placas de acero con diferente concentración de PUF, donde se puede apreciar que las placas con mayor pérdida fueron la de 5 y 15 %, con 45 y 36 mm respectivamente, mientras que las de 30 y 50 % tuvieron 25 y 21 mm, con lo que se puede deducir que, entre menor concentración de PUF, existe en el recubrimiento hay una mayor corrosión en el material.

El resultado de la evaluación de la adherencia según la Norma ASTM D165-8 [7], se expone con base en la valoración del crecimiento de la herrumbre en el aspa según la **Figura 2**. La placa con 70%RE-30% PUF, es la que presentó mejor adhesión, ya que el aspa no tuvo un gran crecimiento de corrosión, el poliuretano funcionalizado influye en los tiempos de corrosión sobre el metal.

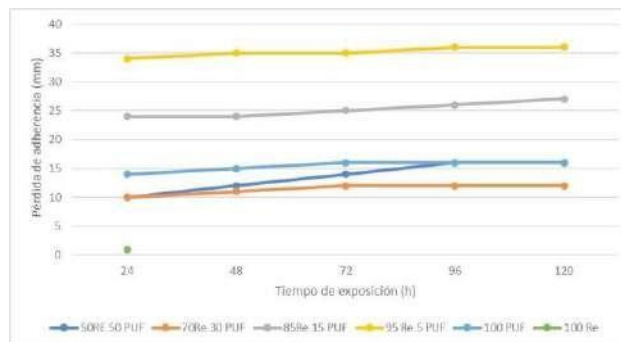


Figura 2. Pérdida de la adherencia del recubrimiento en las placas

De las muestras de concentraciones descritas con anterioridad, se observó que la de mejor rendimiento en ambiente salino fue la placa con recubrimiento 70% resina epóxica y 30% PUF, puesto que obtuvo una mejor adherencia al acero, una mejor respuesta ante la corrosión y presentó un menor avance de herrumbre en el aspa, como se observa en la **Figura 3**.

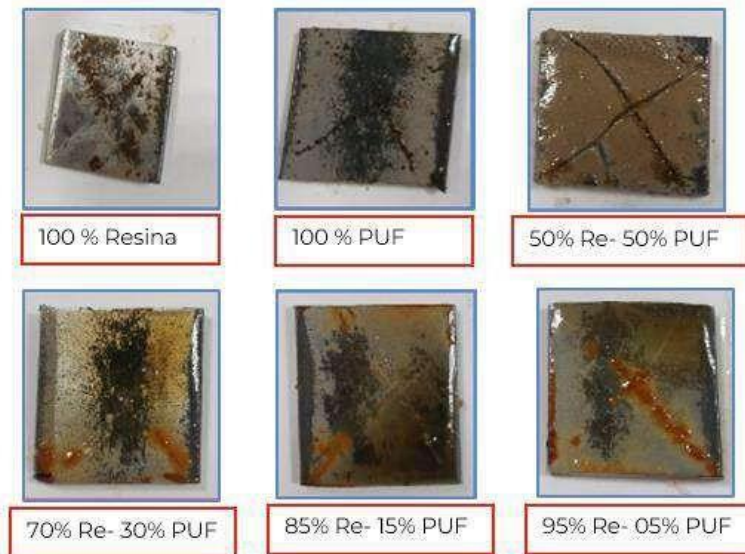


Figura 3. Placas después del ambiente salino a diferentes concentraciones de PUF

La estructura química del poliuretano (PU) y el poliuretano funcionalizado (PUF) se realizó por espectroscopia FTIR (**Figura 4**), se puede observar que hay una banda ancha adicional en 3428 cm^{-1} que corresponde al enlace del grupo hidroxilo de un alcohol primario C-OH. Esto confirma que la funcionalización del poliuretano se llevó a cabo.

El recubrimiento de 30 % que fue el que presentó mejor adherencia y menor corrosión de la placa tiene las siguientes propiedades físicas: color, marrón; viscosidad $0.05297\text{ Pa}\cdot\text{s}$; textura sólida/líquida.

En la funcionalización de este proyecto con las cantidades utilizadas se obtuvieron 25 g de PUF, por lo que realizando cálculos de los reactivos utilizados se obtuvo un total de 300 pesos por kilo de PUF. Para formular el recubrimiento con 30 % de PUF, el cual presentó los mejores resultados se obtuvieron los cálculos de los costos por cada gramo, resultando un total de 583 pesos por kilo de recubrimiento.

Comparando el costo del recubrimiento comercial con respecto al elaborado en este proyecto se aprecia que cuesta 3 veces menos elaborar el recubrimiento utilizando el poliuretano residual lo que además de contribuir con el ambiente, puede reducir gastos en la compra de recubrimientos para las estructuras de las instalaciones

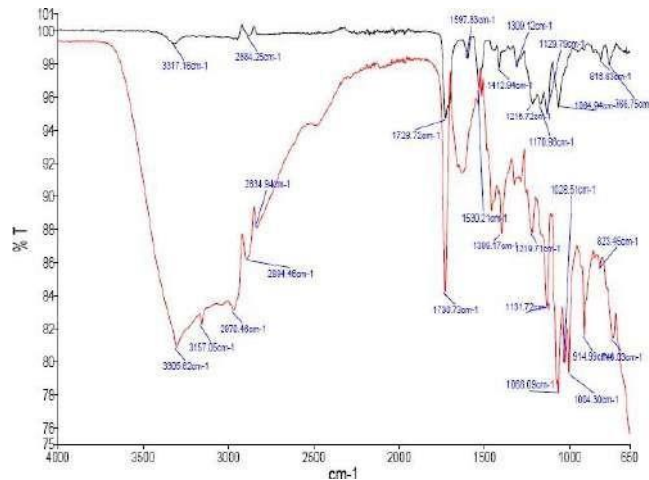


Figura 4. Espectro IR de PU y PUF

CONCLUSIONES

La funcionalización del poliuretano se obtuvo mediante la relación (1:1:3 resina epóxica, poliuretano (PU), formaldehído), y el grupo hidroxilo del alcohol primario fue confirmado por espectroscopia FTIR. La formulación 70:30 % de resina epóxica-poliuretano funcionalizado (PUF), mostró las mejores propiedades de anticorrosión. De acuerdo con los estudios de corrosión acelerada, se obtuvo que, a 120 horas de exposición en la cámara salina, el área de corrosión se presenta en menor área que en las demás formulaciones, el porcentaje de corrosión fue de 20 % para este caso, comparado con 27, 45, 60, para las que contenían 50, 15 y 5 % de recubrimiento respectivamente.

El recubrimiento mostró ser una alternativa viable para el recubrimiento de metal acero al carbono. Permitiendo a la industria tener un proceso para crear su propio recubrimiento a base de poliuretano residual y con esto evitar desecharlo sin aprovechamiento alguno.

El recubrimiento de poliuretano mostró tener propiedades adhesivas con la cerámica, lo que abre un campo para otra investigación con el mismo desecho de material obtenido de la fábrica de calzado. La comparación del precio de un recubrimiento comercial al elaborado en el proyecto es factible, con un precio final de 583 pesos mexicanos por kilogramo de recubrimiento a diferencia de la compra comercial el cual cuesta 1,729 por kg, se logra un ahorro de 1100 pesos aproximadamente, además también se le da un uso a un residuo dándole un valor agregado al producto, aunque hay que considerar los gastos indirectos asociados.

REFERENCIAS

- [1] ONU. Plásticos de un solo uso. Organización Internacional de las Naciones Unidas, Medio ambiente. 2018
- [2] Espinoza M P A. Estudio para el desarrollo de compuestos de poliéteruretano termoplástico (TPU)-Hidroxiapatita (HA) para su posible uso en implantes ortopédicos: Procesabilidad y propiedades mecánicas. Centro de Investigación en Química Aplicada, CIQA. México. Tesis de maestría 2017.
- [3] Asociación de la Industria del Poliuretano Rígido, AIPUR (Abril 2023). Poliuretano Rígido. Hospitecnia. <https://www.construnario.com/catalogo/asociacion-de-la-industria-del-poliuretano-rigido#>.
- [4] Ganim EI. Análisis de una vivienda eficiente y sustentable. Universidad Nacional de Mar del Plata. Facultad de Ingeniería Tesis doctoral 2017.
- [5] Arvizu DE. Síntesis de un recubrimiento sustentable para acero al carbono a base de resina epóxi-poliestireno. Escuela Militar de Ingenieros. Tesis de Licenciatura 2020.
- [6] Pelayo RL. Corrosión marina en estructuras offshore. Escuela Superior de Náutica. Universidad de Cantabria. España. Tesis de licenciatura 2018.
- [7] ASTM D165-8. "Standard Test Method for Evaluation of Painted or Coated Specimens Subject to Corrosive Environments. USA. 2016.

GESTIÓN DE LOS RESIDUOS PELIGROSOS BIOLÓGICOS EN UNA INSTITUCIÓN DE EDUCACIÓN SUPERIOR DEL NORESTE DE MEXICO.

MANAGEMENT OF BIOHAZARDOUS WASTES AT A HIGHER EDUCATION INSTITUTION IN NORTHEASTERN MEXICO.

Ramírez Castillo Aldo Isaac ^{1*}, Pensado Montejó Guillermo G. ¹, Carrillo Ibarra Carmen C. ¹, Loera Téllez Paola ¹, Hernández Ramos Juan M. ², Ramírez Lara Evangelina ³, López Chuken Ulrico ⁴, Maldonado-Muñiz M ⁵.

1 Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Departamento de Medio Ambiente y Seguridad, Av. Universidad S/N, Cd. Universitaria, C.P. 66455, San Nicolás de los Garza, Nuevo León, México.

2 Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Subdirección de Planeación y Operaciones, San Nicolás de los Garza, N. L., México, C.P. 66455.

3 Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Secretaría de Sustentabilidad, Av. Universidad S/N, Cd. Universitaria, C.P. 66455, San Nicolás de los Garza, Nuevo León, México

4 Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Centro de Investigación en Biotecnología y Nanotecnología, Universidad Autónoma de Nuevo León, Monterrey, N.L., México.

5 Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Biológicas, Departamento de Ecología, Programa Maricultura, Av. Universidad S/N, Cd. Universitaria, C.P. 66455, San Nicolás de los Garza, Nuevo León, México.

e-mail correspondencia: aldo14castillo@gmail.com; aldo.ramirezst@uanl.edu.mx

Resumen

La Facultad de Ciencias Químicas (FCQ) de la Universidad Autónoma de Nuevo León (UANL), ubicada en el noreste de México, diseñó e integró un programa para el correcto manejo de los Residuos Peligrosos Biológicos Infecciosos (RPBIs), considerando la Norma NOM-087-SEMARNAT-SSA1-2002, además de los requisitos contemplados en la Ley General para la Gestión Integral de los Residuos (LGPGIR, 2023). Con el objetivo de analizar la eficacia del manejo del programa durante el periodo comprendido en los años 2020 al 2022, se realizó un análisis retrospectivo y estadístico de los datos generados, considerando el tipo y cantidad de RPBIs y se calculó la cantidad generada por área en la Institución de Educación Superior (IES) en toneladas por área ($t a^{-1}$).

La generación total promedio fue de 2.8, 2.3 y 2.6 t para los años 2020, 2021 y 2022, respectivamente, sin embargo, a pesar del incremento de las actividades en las áreas generadoras el análisis estadístico no mostró cambios significativos ($p=0.975$), dado que en el 2022, se regresó a la normalidad posterior a la pandemia ocasionada por la COVID-19, aunque es importante resaltar que la prevención de la generación nunca se dejó de realizar a través de una correcta gestión de insumos dentro de la institución, así como la capacitación a alumnos y personal trabajador.

Por otra parte, la generación por área fue estimada considerando solo la cantidad de laboratorios activos en el periodo, debido a que el proceso de la pandemia limitó significativamente el desarrollo de las actividades por lo que no fue posible considerar la cantidad de alumnos y personal en el análisis. Finalmente, del total de 13 áreas generadoras, se obtuvo una cantidad promedio de RPBIs de 2.6 t generados durante el periodo de análisis.

Palabras clave: Clasificación, Generación, Gestión integral, Programa ambiental, Residuo Peligroso Biológico Infeccioso.

Abstract

The Facultad de Ciencias Químicas (FCQ) from the Universidad Autónoma de Nuevo León (UANL), it is located in northeastern of Mexico. There are designed and integrated a program for management of Biohazardous Wastes (BW) into account standards and requirements of NOM-087-SEMARNAT-SSA1-2002, and the Ley General para la Gestión Integral de los Residuos (LGPGIR, 2023). The type and amount of RPBI's data generated by this program from 2020 to 2022 was analyzed, for measure the effectiveness of management program, as well as the amount generated by area in the Higher Education Institution (HEI) represented in $t\ y^{-1}$ was obtained.

The total generation was 2.8, 2.3 y 2.6 t for 2020, 2021 y 2022 years, respectively. These data no showed significance difference ($p=0.975$), which could be attributed to the increase of activities in the institution, after recovery of pandemic period caused by COVID-19. Although it is important to emphasize that the prevention of the generation was never stopped through the correct management of supplies within the institution, as well as the training of students and workpeople.

The generation by area, where was determined for active laboratories since it was not possible to consider the number of students and personnel, due to the pandemic process was significantly limited for development of the activities. A total of 2.6 t of BW from 13 of generating areas, were generated during the analysis period.

Introducción.

En México, la NOM-087-SEMARNAT-SSA1-2002, plantea criterios en cuanto a la identificación y clasificación de los Residuos Peligrosos Biológicos Infecciosos (RPBIs), teniendo como objetivo principal la protección a la salud y al ambiente. Esta norma oficial mexicana definió a estos residuos como aquellos materiales generados durante los servicios de atención médica que contengan agentes biológico-infecciosos y que puedan causar efectos nocivos a la salud y al ambiente. Lo anterior acorde a la Ley General para la Prevención y Gestión Integral de los Residuos (LGPGIR) y a lo establecido en la Acta de 1988 para el rastreo de residuos médicos, contemplada por la Agencia de Protección al Ambiente de los Estados Unidos de América [1,2]. Adicional a lo considerado por autores a nivel mundial donde la definición, características de generación y peligrosidad son muy similares [3,4].

La generación de RPBIs, no sólo puede atribuirse al sector industrial o domestico sino también a las Instituciones de Educación Superior (IES), situación que obliga a observar los requerimientos normativos que esto involucra, dado que en México la responsabilidad legal por el manejo integral y la gestión de los residuos corresponde a quien los genera y, podría tener implicaciones legales si sus preceptos no se cumplen [5,6], razón por la cual, la implementación de programas ambientales relacionados a la gestión, incluyendo a los RPBIs resulta importante en toda institución, incluyendo a las de giro educativo [7,8]. Ante esta situación de compromiso social y responsabilidad por parte de las instituciones en relación cuidado de la salud, el medio ambiente y, en cumplimiento con el marco jurídico y las autoridades competentes, la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Autónoma de Nuevo León (FCQ-UANL) diseñó e implementó en 2008 un programa ambiental para los residuos generados en los laboratorios [7], siendo este actualizado a través de la observación de preceptos y requerimientos contemplados en las leyes y normas antes mencionadas. Incluyendo así dentro de su programa ambiental el manejo y gestión integral de los RPBIs, promoviendo de esta manera el cuidado del medio ambiente y creando una conciencia en la población estudiantil y trabajadora de esta Institución de Educación Superior (IES). Es importante resaltar que la FCQ-UANL actualmente forma parte el Programa Nacional de Auditorías Ambientales (PNAA) administrado por la Procuraduría Federal de Protección al Medio Ambiente (PROFEPA), que es el organismo facultado para vigilar el cumplimiento ambiental por parte de las instituciones dentro del territorio nacional.

Descrito lo anterior, en ese trabajo de investigación se muestra una evaluación del desempeño del programa ambiental antes descrito, para ello se muestran los resultados sobre la cuantificación de la generación de RPBlS de manera anual ($t a^{-1}$) en la FCQ-UANL, además de una comparativa estadística de la generación total de los RPBlS por año ($t a^{-1}$), un análisis estadístico para conocer si la generación presenta una variación significativa debido a la agrupación por semestres académicos homólogos enero-junio y julio-diciembre 2020, 2021 y 2022 para cada laboratorio ($kg sem^{-1}$), y por último, una verificación para conocer si la clasificación de los RPBlS es correcta conforme a la normativa aplicable.

Metodología.

El presente estudio de investigación se compone de un análisis estadístico y retrospectivo sobre el tipo, cantidad de RPBlS generados en las diferentes áreas de la FCQ-UANL durante los años 2020 al 2022. Se condensaron las cantidades semestrales y anuales reportadas en bitácoras de generación facilitadas por el departamento de medio ambiente y seguridad de la IES. La estimación de la generación anual promedio en toneladas ($t a^{-1}$) para cada tipo de RPBlS de las cantidades generadas en 13 laboratorios fue calculada y se determinó la cantidad de generación por año ($t a^{-1}$) y semestres académicos homólogos ($kg sem^{-1}$). Posteriormente, se realizó un análisis de comparación de medias ANOVA de una vía y un post hoc Tukey ($p < 0.05$) para determinar si existen diferencias entre cantidad de generación por año y se llevó a cabo un análisis de correlación no paramétrica Spearman ($p < 0.05$), para conocer si existe o no un efecto sobre la cantidad de la generación debido a la agrupación por semestres académicos homólogos enero-junio y julio-diciembre 2020, 2021 y 2022 para cada laboratorio ($kg sem^{-1}$). Los análisis estadísticos fueron realizados utilizando el paquete estadístico SPSS IBM versión 17.

Los tipos de RPBlS contemplados fueron todos los incluidos en la normatividad mexicana aplicable (NOM-087-SEMARNAT-SSA1-2002), los cuales son clasificados en 5 tipos y descritos bajo el código de identificación BI (Biológico Infeccioso) y nombrados como BI1, cultivos y cepas; BI2, objetos punzocortantes; BI3, patológicos; BI4, residuos no anatómicos; BI5, sangre; dichos residuos están debidamente registrados por parte de la FCQ-UANL ante la Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales (SEMARNAT), que es la dependencia federal que se encarga de regular la gestión en materia de residuos peligrosos en México.

Resultados y discusión.

En la **Figura 1** se reporta la generación anual promedio en toneladas ($t a^{-1}$) de cada uno de los tipos de RPBlS, en donde se observa el siguiente comportamiento: Cultivos y cepas (BI1) > No anatómico (BI4) > Sangre (BI5) > Punzocortantes (BI2) > Patológicos (BI3). Este comportamiento de generación fue similar durante los tres años considerados en el análisis y se puede atribuir a que los residuos tipo BI1 son producto de las actividades relacionadas con la microbiología en los cuales se utiliza gran cantidad de medios de inoculación de microorganismos en cajas petri que posteriormente son desechadas, mientras que el tipo BI4 que son los segundos en orden de generación son derivados del uso de materiales en actividades médico asistenciales como toma de muestras de sangre o materiales impregnados con algún fluido biológico. Es importante destacar que los laboratorios que presentaron la mayor generación fueron el laboratorio de microbiología médica y microbiología de alimentos. La distribución porcentual de la generación anual promedio previamente reportada en $t a^{-1}$, muestra que los cultivos y cepas fue el tipo de RPBlS con una mayor generación, representando un 84.1% de generación, seguido de los No anatómico con un 12.1%, posteriormente Sangre con un 1.9%, Punzocortantes con un 1.8% y los Patológicos con un 0.1%. Finalmente, el promedio de generación anual en el periodo analizado fue de $0.2 t Lab^{-1} a^{-1}$.

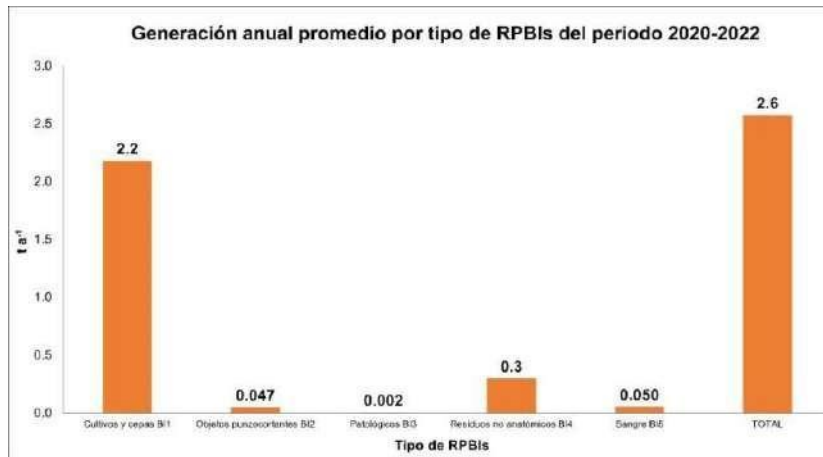


Figura 1. Generación anual promedio en toneladas generadas para cada RPBlS ($t a^{-1}$).

Es importante mencionar que estos tipos de laboratorios realizan actividades diversas y con diferentes enfoques por lo que son clasificados como de tipo académico, investigación y de servicio externo, con los que se logra atender desde el sector educativo, industrial y al público en general, dado que estos últimos cuentan con diferentes acreditaciones en materia de análisis en materia de aguas, residuos, clínicos, microbiológicos, ambientales y de alimentos. La variación en las cantidades generadas, que aunque fue poco significativa, tiene que ver con la situación derivada de la pandemia COVID-19 generado por el SARS-CoV-2, dado que la actividad académica se vio detenida a partir del segundo trimestre del 2020 cuando se decretó la emergencia sanitaria y se llevó a cabo un confinamiento de los centros de trabajo considerados como no esenciales; mientras que en el 2021 se trató de retornar de manera escalonada y con aforos limitados en un 30-50%, en donde se consideró a las actividades académicas, reactivando mediante brigadas de trabajo que tuvieron que acatar todas las medidas sanitarias establecidas por el gobierno federal, local y de las propia institución educativa; otro factor que pudo afectar de manera significativa la generación, fue la demanda de servicios medico asistenciales solicitados durante este periodo de emergencia sanitaria, como pruebas de antígenos, análisis microbiológicos y clínicos, por mencionar algunos. El decremento en la generación de RPBlS durante 2020 a2022 no fue significativo, pero pudo ser atribuido principalmente al paro forzado por la situación de emergencia sanitaria derivada de la pandemia COVID-19. La **Figura 2** muestralos valores de generación por año para cada uno de los tipos RPBlS.

Durante el proceso de análisis de datos, se pudo determinar que la generación del año 2021 presento una disminución de $0.4 t a^{-1}$ respecto a 2020, lo cual se atribuye principalmente al paro de actividades por parte de la IES durante la pandemia ocasionada por la COVID-19 como se mencionó anteriormente y que fue retomando sus actividades durante el 2022 en donde se pudo observar que se presentó un ligero aumento de $0.2 t a^{-1}$ respecto al 2021, periodo en el que el retorno a la normalidad fue decretado por las autoridades federales en materia de atención a la emergencia sanitaria en México.

De un total de 13 laboratorios o áreas generadoras, se obtuvo una cantidad promedio de RPBlS generados en el periodo de análisis de $2.6 t a^{-1}$. La generación per cápita no fue posible determinarla, dado que durante el segundo trimestre del 2020 se suspendió toda actividad académica, así como en 2021, en donde la cantidad de aforo fue muy fluctuante, oscilando entre el 30-50% lo que no permitió correlacionar este indicador de manera adecuada. Se logro realizar una comparativa de la generación total de los RPBlS en semestres académicos homólogos cursados en la FCQ-UANL, esto con el fin de analizar el comportamiento general que presentaron este tipo de residuos.

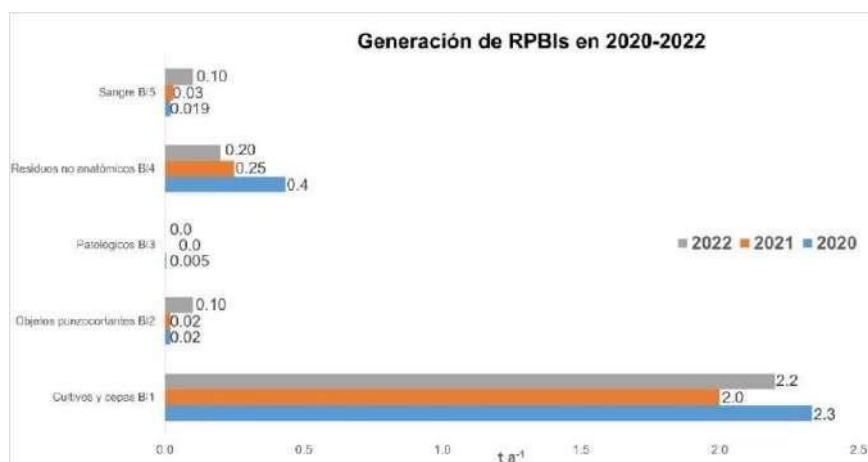


Figura 2. Cantidades anuales generadas por tipo de RPBI expresadas en t a⁻¹.

La **Figura 3** muestra la comparativa existente entre los semestres enero-junio durante el periodo de análisis 2020-2022. En el caso del semestre enero-junio se puede observar que el comportamiento de generación general del total de los tipos de RPBI fue hacia la baja, presentando valores de 1.5 t sem⁻¹ para 2020, 1.3 t sem⁻¹ en 2021 y finalmente 1.2 t sem⁻¹; lo cual se debe a diversos factores que influyen en el comportamiento de generación, principalmente los sociales, como lo fue la situación de emergencia sanitaria y el confinamiento obligado, así como la reducción de actividades, presencia de alumnado y personal trabajador en los laboratorios, sin embargo los cambios mostrados no fueron estadísticamente significativos y el coeficiente de Spearman fue de 0.065, para lo cual demuestra una correlación positiva muy baja entre los semestres homólogos.

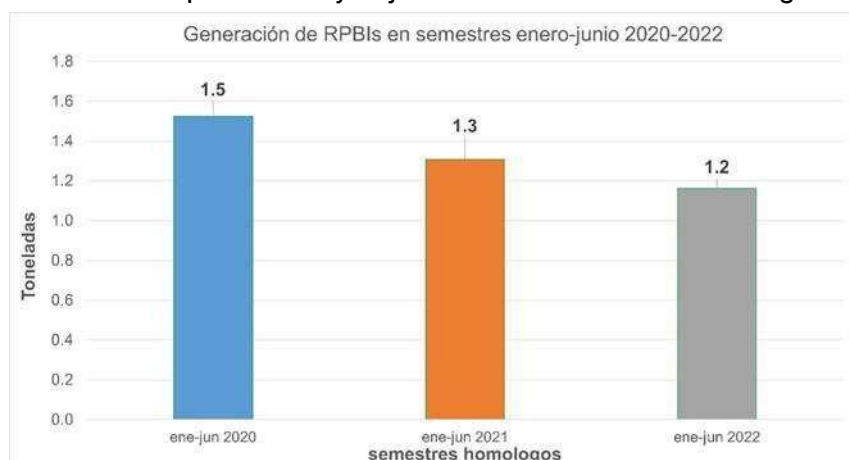


Figura 3. Comparativa de generación semestres enero-junio 2020-2022 expresada en t sem⁻¹ (F=0.53, p= 0.949).

En la **Figura 4** podemos observar los datos comparativos de los semestres cursados en julio-diciembre 2020-2022. Se puede apreciar que la generación del periodo semestral de 2020 a 2021 solo disminuyo 0.1 t sem⁻¹ a⁻¹, mientras que el comportamiento de 2021 a 2022 presento un aumento de 0.5 t sem⁻¹ a⁻¹, lo que pudo deberse al retorno total de las actividades durante el último año analizado, dado que en 2021 la actividad académica y laboral en la FCQ-UANL se fue realizando de manera paulatina y por medio de la implementación de aforos y brigadas escolares en los laboratorios de enseñanza e investigación, sin embargo los cambios mostrados no fueron estadísticamente significativos.

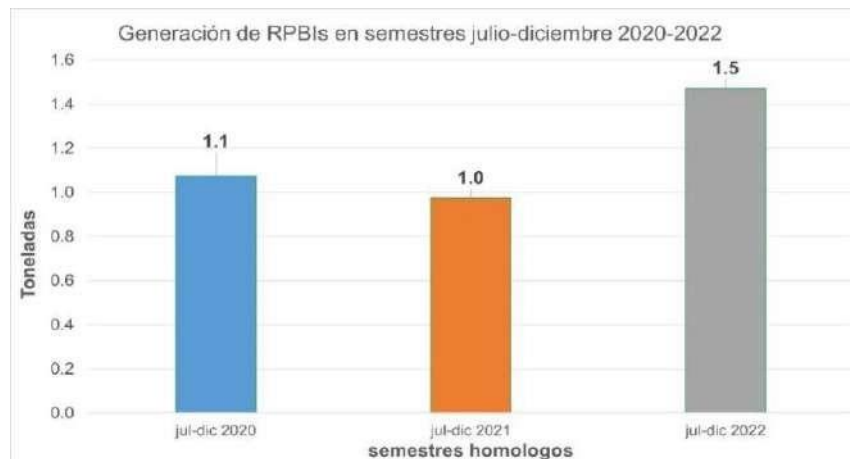


Figura 4. Comparativa de generación semestres julio-diciembre 2020-2022 expresada en t sem⁻¹ (F=0.113, p= 0.893).

Conclusiones.

La generación de los RPBl ha presentado un comportamiento similar entre años y semestres homólogos, no presentando diferencias estadísticamente significativas, aunque con tendencia a la reducción, lo cual se atribuye a la pandemia ocasionada por la COVID-19. Lo anterior se puede considerar como positivo en cuanto al impacto que pueden generar estos residuos por su alta peligrosidad. La FCQ-UANL al implementar este programa ambiental, cumple con la normativa vigente en México; dado lo anterior, ha sido distinguida en 6 períodos consecutivos con el certificado de calidad ambiental del PNAA administrado por la PROFEPA, logrando sustentar de manera continua dicho reconocimiento. El correcto funcionamiento del programa ambiental pone de manifiesto que las IES, además de contribuir en la formación de nuevas generaciones con una visión hacia el cuidado del medio ambiente, contribuyen al desarrollo sostenible de sus países al implementar este tipo de acciones dentro de su estructura organizacional y académica.

Referencias.

- [1] LGPGIR, 2023. Ley General para la Prevención y Gestión Integral de los Residuos. Diario Oficial de la Federación, México.
- [2] United States Environmental Protection Agency (USEPA), disponible en: <<https://archive.epa.gov/epawaste/nonhaz/industrial/medical/web/html/tracking.html>> (accesado en abril de 2023).
- [3] Mugabi, B., S. Hattingh, and S. Chima. 2018. "Assessing Knowledge, Attitudes, and Practices of Healthcare Workers Regarding Medical Waste Management at a Tertiary Hospital in Botswana: A Cross-Sectional Quantitative Study." *Nigerian Journal of Clinical Practice* 21 (12): 1627-38. https://doi.org/10.4103/njcp.njcp_270_17.
- [4] Mohammed, Lamia, Raghad Sanyi, and Izzat Al-Rayahi. 2019. "Gender Differences in the Management of Hazardous Biological Material in Medical Teaching Laboratories." *Journal of Bioscience and Applied Research* 5 (4): 495-500. <https://doi.org/10.21608/jbaar.2019.115567>.
- [5] LGEEPA. 2023. Ley General del Equilibrio Ecológico y la Protección al Ambiente. Diario Oficial de la Federación, México.
- [6] LFRA, 2023. Ley Federal de Responsabilidad Ambiental. Diario Oficial de la Federación, México.
- [7] Ramírez Lara, E., De la Rosa, J. R., Ramírez Castillo, A. I., Cerino-Córdova, F. de J., López Chuken, U. J., Fernández Delgadillo, S. S., & Rivas-García, P. (2016). A comprehensive hazardous waste management program in a Chemistry School at a Mexican university. *Journal of Cleaner Production*, 142, 1486-1491. <http://doi.org/10.1016/j.jclepro.2016.11.158>
- [8] Gallardo, A., Carlos, M., & Renau, M. (2016). The determination of waste generation and composition as an essential tool to improve the waste management plan of a university. *Waste Management*, 53, 3-11. <http://doi.org/10.1016/j.wasman.2016.04.013>

ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD DE UN ANÁLISIS DE CICLO DE VIDA DE CUBREBOCAS REUTILIZABLE

SENSITIVITY ANALYSIS OF A LIFE CYCLE ANALYSIS OF REUSABLE FACE MASK

Ana Laura Tecorralco Bobadilla^{1*}, Alethia Vázquez Morillas¹, Perla Xochitl Sotelo Navarro^{1,2}, Griselda González Cardoso¹

¹Área de Tecnologías Sustentables, Universidad Autónoma Metropolitana, Av. San Pablo 180, Col. Reynosa Tamaulipas, Alcaldía Azcapotzalco, C.P. 02200, México, al2203802502@azc.uam.mx

²IxM Investigadora por México CONAHCYT - CINEVESTAV -DCTS, Av. Instituto Politécnico Nacional 2508, San Pedro Zacatenco, Gustavo A. Madero, 07360 Ciudad de México, CDMX
**e-mail del autor de correspondencia: al2203802502@azc.uam.mx*

RESUMEN. En México, en 2020 algunas empresas incursionaron en la producción de cubrebocas reutilizables con el fin de cumplir con la alta demanda que tenía la población por adquirir este equipo de protección personal, ya que su uso era recomendado para evitar el contagio del virus SARS-CoV-2. El incremento de la producción de cubrebocas propició el aumento de consumo de materias primas, así como la generación de residuos. Mediante un análisis de ciclo de vida, a través de la metodología ReCiPe, se determinó que la etapa de producción es la que tiene la mayor contribución al impacto ambiental, debido principalmente al uso de un compuesto antibacterial que se aplica en una proporción de 10 % en masa con respecto a la tela empleada. Con base en lo anterior, se consideró relevante evaluar la viabilidad de disminuir la cantidad de materiales empleados en la fabricación sin afectar la función principal. El objetivo de este trabajo fue determinar el efecto en el análisis de ciclo de vida del aumento o disminución del antibacterial a base de sal de plata utilizado. Se realizó la evaluación en el software SimaPro 9.3.0.3, donde, se estableció el uso al 5 y 15 % de antibacterial respecto al peso de la tela. Las categorías en las que se observa mayor variación en el impacto son la escasez de recursos minerales, la ecotoxicidad de agua marina, la ecotoxicidad de agua dulce y la toxicidad humana no cancerígena; en promedio hay una disminución de 50 % de impacto al usar el antibacterial al 5 % respecto al peso de la tela además de no afectar la función principal del cubrebocas reutilizable.

Palabras clave: *impacto ambiental, antibacterial, cambio climático, ReCiPe, SimaPro*

ABSTRACT. In Mexico, in 2020, some companies began the production of reusable face masks to meet the high demand for this personal protective equipment, as its use was recommended to prevent the spread of the SARS-CoV-2 virus. The increase in the production of face masks led to an increase in the consumption of raw materials and the generation of waste. In addition, through a life cycle analysis, it was found that the production stage is the one that has the greatest contribution in 18 impact categories of the ReCiPe methodology. This is mainly related to using an antibacterial compound, based on silver salts, currently applied in a 10% to the fabric (w/w). It is relevant to assess the feasibility of reducing the number of materials used in the manufacture without affecting the main function. In this context, the goal of this work is to assess the effect on the life cycle analysis of the increase or decrease of the applied antibacterial. The evaluation was carried out in the software SimaPro 9.3.0.3, where the use of 5 and 15 % antibacterial with respect to the weight of the fabric was compared. The categories in which the greatest variation in impact is observed are the scarcity of mineral resources, seawater ecotoxicity, freshwater ecotoxicity and non-carcinogenic human toxicity. On average, there is a 50 % reduction in impact when using the

antibacterial at 5 % with respect to the weight of the fabric, not affecting the main function of the reusable face mask.

Key words: *environmental impact, antibacterial, climate change, ReCiPe, SimaPro*

INTRODUCCIÓN

En 2020 algunas empresas incursionaron en la producción de cubrebocas reutilizables, con el fin de abastecer la alta demanda de este equipo de protección personal, esto como consecuencia de la propagación del virus responsable de la enfermedad COVID-19, lo que también provocó gran generación de este residuo.

Es importante cuantificar los impactos ambientales generados por los cubrebocas a través de un Análisis de Ciclo de Vida (ACV) de toda su cadena de valor, con el fin de determinar las áreas de mejora durante la etapa de mayor contribución negativa del producto [1]

También es importante efectuar un análisis de sensibilidad para tener una descripción completa de los datos del sistema, así como la calidad requerida de estos, el cual ilustre las consecuencias de la implementación de los distintos escenarios [2]. El análisis de sensibilidad de acuerdo con la norma ISO 14044 consiste en un proceso sistemático que estima los efectos sobre el resultado de un estudio con base en las opciones elegidas aplicada a métodos y datos, lo que permite encontrar diferencias significativas entre diferentes alternativas estudiadas [3].

EL objetivo de este trabajo fue evaluar el análisis de sensibilidad del análisis de ciclo de vida de un cubrebocas reutilizable aplicado al principal producto que mostró tener el efecto más significativo en el ACV que fue el uso de antibacterial a base de sales de plata.

METODOLOGÍA

Derivado del análisis de ciclo de vida de un cubrebocas reutilizable, se determinó que la etapa de producción es la que genera la mayor cantidad de impactos ambientales. Se evaluó en el software SimaPro 9.3.0.3 la etapa de producción con metodología ReCiPe 2016 v1.1 versión jerárquica para conocer las contribuciones correspondientes a las entradas y salidas de esta etapa.

De acuerdo para este análisis, se determinó que el antibacterial HeiQ Viroblock NPJ03 tiene la mayor contribución en el análisis de ciclo de vida, por lo que se hizo el análisis a esta entrada para conocer el efecto en los impactos ambientales. El fabricante aplica el antibacterial en una proporción de 10 % respecto al peso de la tela, sin embargo, el fabricante del HeiQ Viroblock NPJ03 establece un rango de recomendación de uso entre 5 y 15 % respecto al peso de tela, por lo que, en el análisis de sensibilidad se consideró estos porcentajes para observar los efectos.

Se evaluó de nuevo con el software SimaPro 9.3.0.3 con metodología ReCiPe 2016 v1.1 versión jerárquica para conocer las diferencias respecto al cálculo base.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Se observa en la Figura 1 que en la etapa de producción la principal aportación al impacto ambiental está asociada al uso del reactivo HeiQ Viroblock NPJ03, mismo que de acuerdo con la descripción en el ICV, se utiliza como agente de recubrimiento para protección bacteriana y que está preparado principalmente con sales de plata. Asociado al uso de este antibacterial es posible que influya en 81.1 % la deshidratación del gas natural que se utiliza en alguna etapa del proceso de obtención de este reactivo.

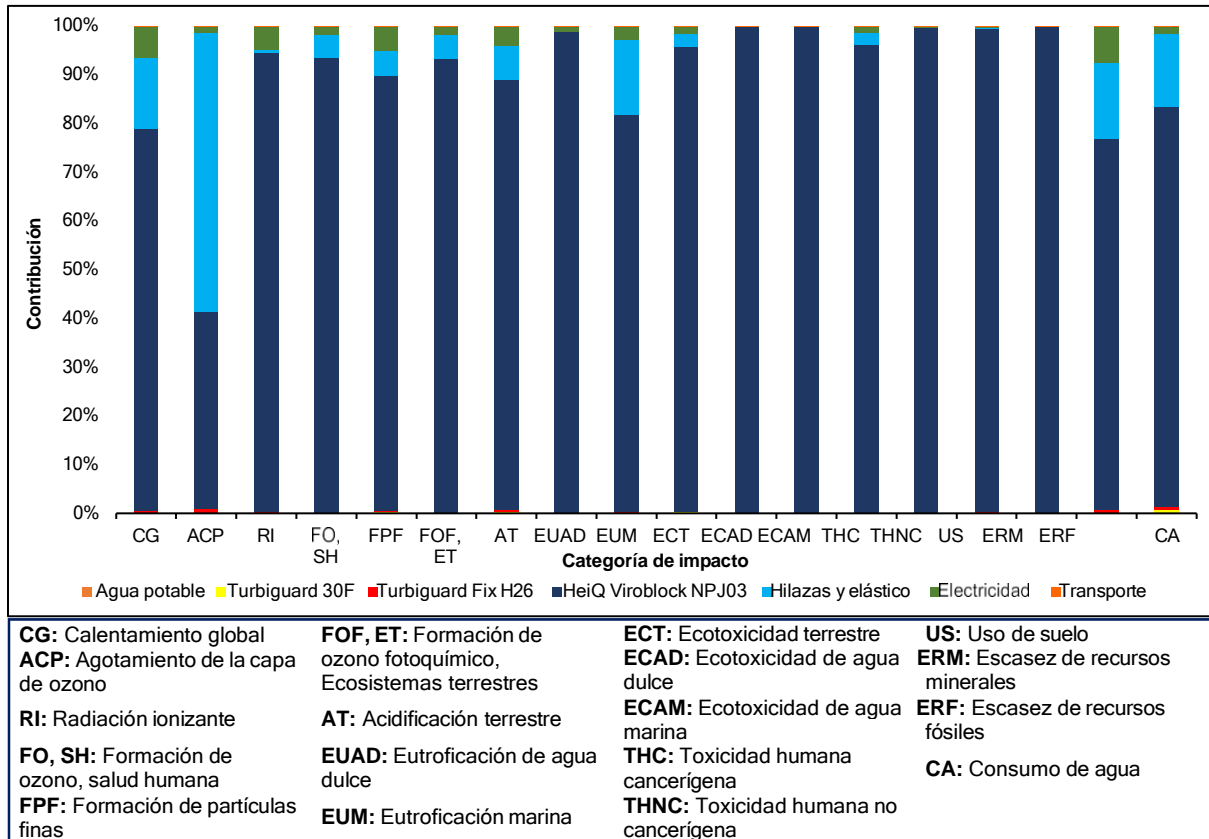


Figura 1. Contribución de las entradas y salidas de la subetapa de producción en las dieciocho categorías de impacto

La plata es utilizada como antibacterial por sus propiedades naturales biocidas, por este motivo tiene un uso en diferentes industrias, como en la ortodoncia, la alimenticia para purificar el agua, entre otras [4]. Sin embargo, su toxicidad al ser humano aún está en estudio, ya que de acuerdo con la forma de exposición (oral, inhalación, vía sistémica o contacto) y el tiempo podrían presentarse diferentes efectos tóxicos [5].

El HeiQ Viroblock NPJ03 es la entrada que tiene la mayor contribución y de acuerdo a la aplicación de cambio porcentual de uso sobre el cubrebocas se observan los resultados del análisis de sensibilidad en la Figura 2.

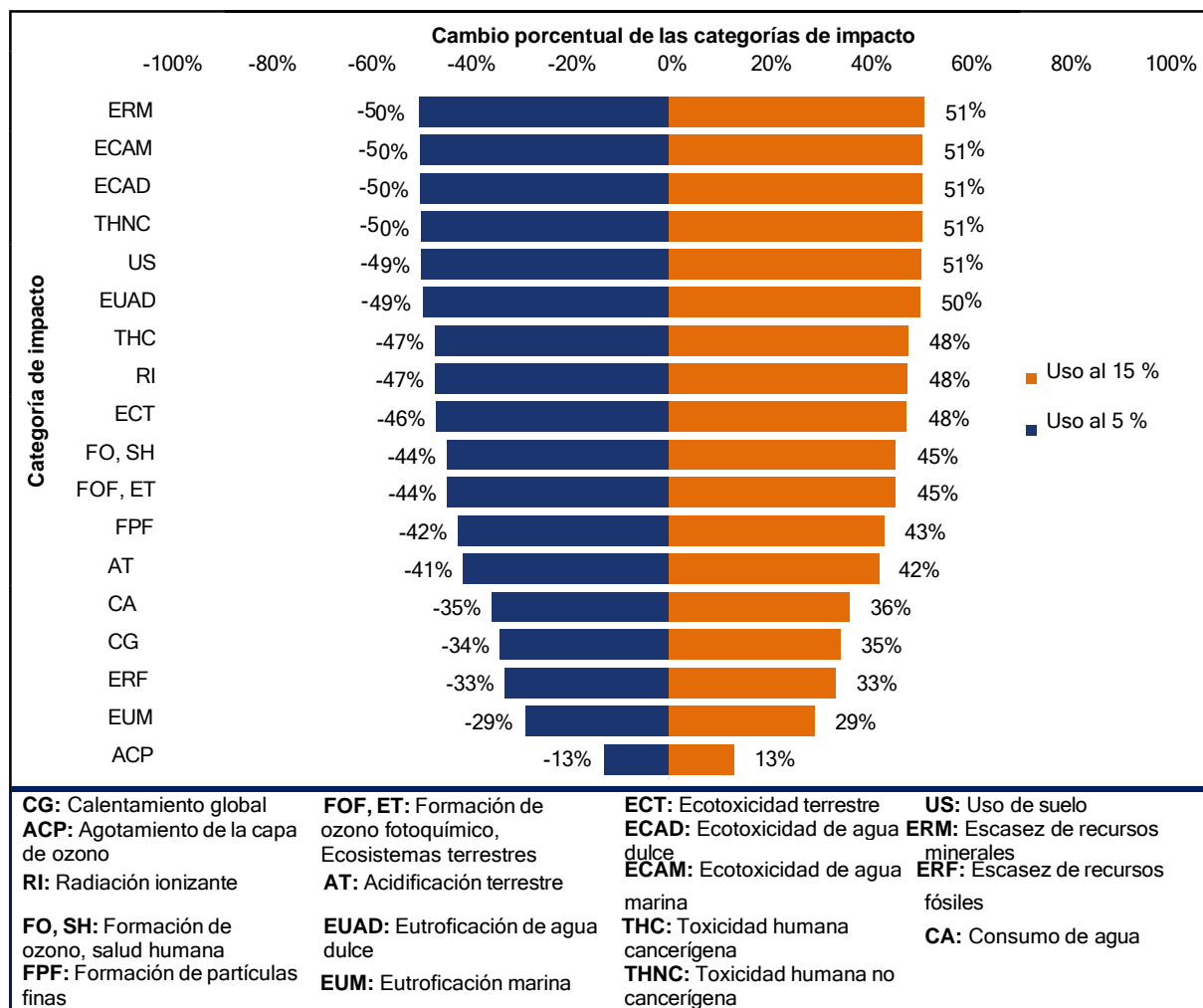


Figura 2. Análisis de sensibilidad de cubrebocas desechables

Las categorías que presentarán mayor variación en el impacto son la escasez de recursos minerales, la ecotoxicidad de agua marina, la ecotoxicidad de agua dulce y la toxicidad humana no cancerígena, las cuales presentan en todo el ciclo de vida en promedio 50 % de diferencia más o menos según el caso de aplicación del reactivo.

También, se observa que las que tienen menor variación son agotamiento de la capa de ozono y eutroficación marina con 13 y 29 % respectivamente. Podría asumirse como evidente que al aumentar o disminuir una variable en un porcentaje los impactos disminuirán o aumentarán en forma proporcional, sin embargo, este análisis permite vislumbrar que no es el caso y por ende se hace importante realizar los análisis de sensibilidad que permitan establecer conclusiones precisas y se evidencien diferencias significativas en las opciones evaluadas.

En la normalización de ACV se observó que las categorías más afectadas son ecotoxicidad de agua dulce y ecotoxicidad de agua marina, mismas que este análisis de sensibilidad muestra una reducción del 50 % de los impactos si se disminuye en 5 % la aplicación del antibacterial, lo que podría contribuir a mejorar el comportamiento ambiental al normalizar los resultados del ACV.

Es importante mencionar que con este análisis de sensibilidad se observó que al reducir la cantidad de agente antibacterial se reducen los impactos ambientales sin afectar la función principal del cubrebocas reutilizable y que se encuentra la principal variable de afectación dentro de los estándares de aplicación establecidos por el fabricante del antibacterial. Además, que esto contribuirá en la economía del proceso ya que se gastara menos antibacterial.

Existen en el mercado diferentes mezclas antibacteriales como el óxido de zinc y óxido de cobre [6] o radiación ultravioleta [7], sin embargo, se tendría que realizar nuevamente un ACV, análisis de sensibilidad y un estudio económico para saber la viabilidad de alguno de ellos.

Es importante mencionar que, de realizar modificaciones en el proceso del ciclo de vida, es importante recalcular los impactos ambientales para observar los cambios en los resultados.

CONCLUSIONES

La categoría de impacto de ecotoxicidad de agua dulce es la que presenta el principal impacto ambiental, seguido de la ecotoxicidad marina y la toxicidad humana cancerígena, mismos que pueden disminuir al aplicar 5 % menos de antibacterial en los cubrebocas desechables estudiados.

En el proceso de producción del cubrebocas reutilizable se puede suplir el uso de sustancias químicas como agentes antimicrobianos por otros reactivos y realizar un ACV para evaluar si existe la viabilidad de que tengan menos efectos negativos al ambiente. Lo que evidencia con el análisis de sensibilidad es que reduce un 50 % de impacto al disminuir en un 5 % el uso del antimicrobiano en la mayoría de las categorías de impacto.

Es posible vislumbrar los cambios significativos en una variable por medio de un análisis de sensibilidad.

REFERENCIAS

- [1] Wei, A., Lee L., Ren E., Neo K., Khoo Z., Yeo Z., Tan Y. S., Chng S., Yan W., Lok B. K., Sze J., y Low C. Life cycle assessment of single-use surgical and embedded filtration layer (EFL) reusable face mask. *Resour Conserv Recycl*, vol. 170, núm. September 2020, p. 12, 2021.
- [2] IMNC, Instituto Mexicano de Normalización y Certificación A. C. 2008. NMX-SAA-14044-IMNC-2008. Gestión ambiental - Análisis del ciclo de vida - Requisitos y directrices. p. 68.
- [3] International Organization for Standardization. 2006. ISO 14044 - Environmental management - Life Cycle Assessment - Requirements and Guidelines.
- [4] Williams B. C., Plata a nanoescala para el control de infecciones. *Nursing (Ed. española)*, vol. 32, núm. 1, pp. 59-60, ene. 2015.
- [5] del Rocío, Coutiño E. M., Lagunes L. Ávila, y Helguera O. Arroyo. Las nanopartículas de plata: mecanismos de entrada, toxicidad y estrés oxidativo", *Revista de Educación Bioquímica (REB)*, vol. 36, núm. 2, pp. 39-54, 2017.
- [6] Bolaina-Lorenzo E., Puente-Urbina B. A., Espinosa-Neira R., Ledezma A., Rodríguez-Fernández O. y Betancourt-Galindo R. A simple method to improve antibacterial properties in commercial face masks via incorporation of ZnO and CuO nanoparticles through chitosan matrix. *Mater Chem Phys*, vol. 287, p. 126299, ago. 2022.
- [7] Ye, Shengjun, Yiheng Li, Haibao Huang, Yanbin Xu, Shaoping Du, Fenlong Wan, Ruijie Xie, Pingli Huang, Biyuan Liu, Tao Dong, Zhili He, y Dennis Y. C. Leung. Fast and deep disinfection for face masks recycle using vacuum ultraviolet irradiation. *J Clean Prod*, vol. 368, p. 133221, sep. 2022.



QUÍMICA E INGENIERÍA VERDE PARA LA SUSTENTABILIDAD

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN