



Universidad Popular Autónoma del Estado de
Puebla

Centro Interdisciplinario de Posgrados

Investigación y Consultoría

Doctorado en Ingeniería Mecatrónica

“Diseño de un Sistema Mecatrónico Aplicable al
Proceso de Síntesis por Biorreducción para la
Obtención de Nanopartículas Metálicas”

Tesis para obtener el grado de
Doctor en Ingeniería Mecatrónica

Presenta

Marcos Bedolla Hernández

Asesor de tesis

Dra.en C. Genoveva Rosano Ortega

Puebla, México

2015



UPAEP – Secretaría General

Dirección General de Apoyos Académicos

Dirección del Centro de Recursos para el Aprendizaje y la Investigación.

Biblioteca Central - **Karol Wojtyla**

Tesis Digitales Restricciones de uso:

DERECHOS RESERVADOS ©

PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de textos, imágenes, gráficas, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente de donde la obtuvo mencionando el autor o autores involucrados en el documento.

Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

H. Puebla de Zaragoza a 05 de noviembre de 2015

A QUIEN CORRESPONDA:

Por este conducto me permito informar a ustedes que la **tesis de grado de doctor en Ingeniería Mecatrónica del M. en C. Marcos Bedolla Hernández** con matrícula no. 21200015, titulada “Diseño de un Sistema Mecatrónico Aplicable al Proceso de Síntesis por Biorreducción para la Obtención de Nanopartículas Metálicas”, bajo mi dirección **está terminada y cumple con los requisitos necesarios**. Por lo anterior, espero que pueda presentar su examen de grado de doctor a la brevedad posible.

En espera de su respuesta, reciba mis más altas y distinguidas consideraciones.

Quedo de ustedes para cualquier información adicional,

ATENTAMENTE



Dra. en C. Genoveva Rosano Ortega
Catedrática-Investigadora del Decanato de
Ciencias Biológicas
Tel. (222) 229 94 00 Ext. 7963
e-mail: genoveva.rosano@upaep.mx

Ccp. Interesado.

UPAEP

21 Sur 1103
Barrio de Santiago
Puebla, Pue. México
C.P. 72410

Tel: 01 (222) 229 9400
Fax: 01 (222) 2 32 5251
01 800 224 2200
www.upaep.mx

DEDICATORIAS

A Dios nuestro señor, quien permite que las cosas sucedan en el momento indicado, no antes, no después, sino cuando tenga que pasar.

A Mireya mi Esposa, la mujer que comparte mi vida, quien me ha apoyado incondicionalmente y en todos los aspectos a lo largo de estos años de estudio; porque sin ella, esto no sería posible.

A mis Hijas Ariadna y Maritza por todo el cariño y alegría que dan a mi existir. Sé que han sacrificado mucho por apoyarme, pero juntos hemos llegado a la meta, esto es para ustedes princesitas.

A mis padres, el Sr. Elías Bedolla y la Sra. Josefina Hernández, por toda su confianza, apoyo y tiempo dedicado a mí en esta aventura académica; gracias por estar siempre a mi lado.

Especialmente a mi hermano Jorge, porque sin importar lo ocupado que este siempre tiene tiempo para mí. Gracias carnal por ser mi mentor y guía, pero sobre todo por ser mi mejor amigo.

A la otra parte de mi familia, el Sr. Esteban Pérez y la Sra. Otilia Carrillo, mis suegros; quienes han sido parte fundamental en el accionar familiar para poder realizar este proyecto de vida.

A todas las personas que quiero y que siempre me han apoyado ...

AGRADECIMIENTOS

A Dios nuestro señor por todas las bendiciones que me ha dado, por la fortaleza que en él siempre encuentro y por permitirme llegar a este punto de mi formación profesional. A la Virgen de Guadalupe y San Simeón por todos los favores recibidos.

A las instituciones académicas, Universidad Popular Autónoma del Estado de Puebla (UPAEP) e Instituto Tecnológico de Apizaco (ITA), por permitir el uso de sus instalaciones y equipos para la realización de la investigación.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) y al Programa para el Desarrollo Profesional (PRODEP), por el apoyo económico recibido en la etapa final de mis estudios doctorales.

A la Dra. Genoveva Rosano Ortega, Directora de ésta tesis, por el conocimiento aportado y todo el tiempo dedicado a la dirección de éste proyecto.

Al Dr. Jorge Bedolla Hernández del Instituto Tecnológico de Apizaco (ITA) y al Dr. Pablo Samuel Schabes Retchkiman de la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), por la asesoría y adecuada orientación que me proporcionaron durante el desarrollo de la tesis.

Al personal académico del posgrado en Ingeniería Mecatrónica de UPAEP, la Dra. Rubí Salazar, nuestra coordinadora, la Dra. Genoveva Rosano, el Dr. Jorge Ascencio, Dr. Umapada Pal, el Dr. Casimiro, mis profesores; gracias por el conocimiento compartido pero sobre todo por su amistad.

Al Laboratorio Central de Microscopia (LACMIF) del Instituto de Física de la UNAM, particularmente al Arq. Diego Quiterio y al Fis. Roberto Hernández de por su apoyo y disposición para realizar las mediciones de microscopia y caracterización de nanopartículas.

A los investigadores que aportaron su tiempo y conocimiento para el desarrollo del proyecto, la Ing. Areli Munive quien estuvo al frente del proceso de síntesis en la UPAEP, al Dr. Mauricio Ortiz de la Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo por su valioso aporte en la medición y caracterización de muestras, al Dr. Alan Augusto Gallegos del Instituto Tecnológico de Apizaco por su apoyo para realizar la simulación y análisis computacional requerido en la tesis.

RESUMEN

El proyecto de investigación realizado, es una propuesta de desarrollo tecnológico, enfocada a los procesos de fabricación de materiales nanoestructurados, específicamente a la obtención de nanopartículas metálicas. Está basado en el estado del arte del método biológico de síntesis por biorreducción, para el caso particular del uso de biomasa como agente reductor, siendo este un método experimental de síntesis probado, de un solo paso, que puede realizarse a condiciones estándar de presión y temperatura y amigable con el medio ambiente.

Sin embargo, aun considerando las bondades señaladas, este método no ha sido utilizado fuera del laboratorio para la producción de nanopartículas, como es el caso de los métodos de síntesis físicos y químicos; por lo cual, la aportación central del presente trabajo de investigación tiene como objetivo el desarrollo de un sistema mecatrónico que sirva para realizar la síntesis por biorreducción de nanopartículas metálicas, tanto en el interior del laboratorio como fuera de él; contribuyendo así al avance en el estado del arte del método referido y proponiendo una alternativa para el escalamiento de la producción de nanopartículas a niveles comparables con los otros dos procesos de síntesis usados actualmente.

Para lograr lo mencionado en los párrafos anteriores, se realizó dentro del proyecto de investigación un estudio detallado del método de síntesis por biorreducción; lo cual, permitió entender el mecanismo de formación de las nanopartículas durante desarrollo de la síntesis inducida, determinar los equipos que se utilizan para realizarla, definir las principales variables que intervienen en la síntesis y que condicionan el tamaño y las propiedades de las nanopartículas resultantes; pudiendo así, establecer los rangos de valores para variables del proceso como el pH, la concentración de la biomasa, la concentración de la sal metálica y la temperatura de nucleación y crecimiento, además de los parámetros de operación de los equipos involucrados; logrando con esto establecer los valores necesarios de variables y parámetros que den como resultado la síntesis por diseño de nanopartículas con tamaño y propiedades específica.

Para el desarrollo del sistema mecatrónico, en su fase de diseño y validación, se empleó además de la información obtenida del proceso de síntesis, sistemas computacionales de modelado y análisis; los cuales facilitaron el establecer la relación entre las variables de síntesis y los parámetros de operación facilitando la integración de éstos en un sistema completo que realice la síntesis inducida por biorreducción. Para el caso del modelado y análisis de las nanopartículas se utilizó el software comercial *Materialstudio* 5.5 y modelado, análisis y ensamble virtual del sistema se usó el software *Solidworks* 2014.

ÍNDICE

No.	Título de tema o subtema	Pag.
	Resumen.....	<i>i</i>
	Índice.....	<i>ii</i>
	Lista de tablas.....	<i>iv</i>
	Lista de figuras.....	<i>vi</i>
	Capítulo 1. Introducción	1
1.1	Establecimiento de la oportunidad.....	1
1.2	Justificación del estudio.....	4
1.2.1	Nanopartículas.....	4
1.2.2	Procesos para la fabricación de nanopartículas.....	5
1.2.3	Proceso de biorreducción utilizando biomasa de lirio acuático.....	6
1.3	Objetivo central de la tesis.....	8
1.4	Alcances y limitaciones.....	9
1.5	Preguntas de investigación.....	10
1.6	Impacto esperado.....	10
1.7	Organización del estudio.....	11
1.8	Estructura de la tesis.....	11
	Capítulo 2. Revisión del estado del arte	14
2.1	Estado del arte.....	14
2.1.1	Síntesis por biorreducción y su viabilidad para la producción de nanopartículas metálicas.....	15
2.1.2.	Dispositivos y equipos utilizados en el método de síntesis por biorreducción....	19
2.1.3.	Simulación numérico computacional.....	20
2.2	Discusión del estado del arte.....	22
	Capítulo 3. Fundamentación teórica	24
3.1	Mecanismo de formación de las nanopartículas.....	25
3.2	Enzimas presentes en el lirio acuático.....	27
3.3	Procedimiento para la obtención de nanopartículas mediante el método de síntesis por biorreducción.....	28
3.4	La simulación atomística aplicada al análisis y desarrollo de materiales.....	30
3.5	Propiedades de interés.....	33
3.5.1	Propiedades mecánicas.....	34
3.5.2	Propiedades eléctricas/electrónicas.....	38
3.6	Aspectos de diseño para el desarrollo de equipos aplicables al método de síntesis por biorreducción.....	46
	Capítulo 4. Metodología	49
4.1	Relación entre el objeto y tipo de estudio de la investigación.....	50
4.2	Metodología propuesta.....	51
4.3	Alcances, estrategias y acciones.....	53
4.4	Perspectiva.....	55
	Capítulo 5. Desarrollo	56
5.1	Introducción.....	56
5.2	Descripción general del proceso de diseño.....	57

5.3	Análisis del proceso de síntesis por biorreducción.....	58
5.4	Búsqueda de soluciones.....	62
5.4.1	Selección de componentes y equipos.....	62
5.4.2	Variables de diseño.....	65
5.5	Instalación o ensamble del sistema.....	71
5.5.1	Elaboración de modelos CAD para cada componente.....	72
5.5.2	Ensamble del sistema.....	75
5.6	Formación al personal en la mejora.....	76
5.7	Comprobación (validación).....	76
5.7.1	Simulación y análisis computacional del sistema mecatrónico.....	77
5.7.2	Simulación y análisis computacional de nanopartículas.....	78
5.8	Aplicación.....	85
5.8.1	Determinación de parámetros requeridos para la elaboración de recubrimientos superficiales nanoestructurados a base de cromo.....	86
5.8.2	Elaboración de los modelos atomísticos.....	88
	Capítulo 6. Presentación y discusión de resultados	91
6.1	Resultados del análisis del proceso.....	91
6.1.1	Diagrama de secuencia resultante.....	91
6.1.2	Tipo de biomasa.....	94
6.2	Resultados de la búsqueda de soluciones.....	95
6.2.1	Sistema propuesto.....	95
6.2.2	Caso de estudio.....	98
6.3	Resultados del ensamble del sistema mecatrónico.....	100
6.3.1	Pruebas de movimiento.....	101
6.3.2	Resistencia de los componentes a las cargas aplicadas.....	102
6.3.3	Producción.....	104
6.3.4	Manejo de residuos.....	105
6.4	Resultados de validación del proceso (caso de aplicación).....	107
6.4.1	Cálculo de la dureza superficial.....	107
6.4.2	Cálculo de la resistencia al desgaste.....	109
	Capítulo 7. Conclusiones	112
7.1	Conclusiones generales.....	113
7.2	Conclusiones del desarrollo del proyecto.....	113
7.3	Recomendaciones y trabajos futuros.....	115
	Contribuciones originales.....	117
	Referencias bibliográficas.....	119
	Anexos	
	Evidencia de la productividad académica resultado del proyecto de tesis	

LISTA DE TABLAS

Tabla No.	Título de la tabla	Pag.
Tabla 1.1	Estimación de la producción de nanopartículas en el mercado industrial proyectada al año 2020.....	5
Tabla 1.2	Organización de la investigación por etapas y tiempos estimados para su realización.....	11
Tabla 2.1	Materia orgánica y sal metálica utilizadas para la síntesis de nanopartículas metálicas por biorreducción.....	15
Tabla 2.2	Efectos de la variación de parámetros que intervienen en la síntesis inducida de nanopartículas metálicas.....	17
Tabla 2.3	Principales técnicas de caracterización para nanopartículas metálicas sintetizadas por biorreducción.....	18
Tabla 2.4.	Equipos y dispositivos utilizados en métodos propuestos de síntesis por biorreducción.....	19
Tabla 3.1	Sales metálicas propuestas para la obtención de NPs.....	30
Tabla 3.2	Estructura cristalina básica para metales.....	33
Tabla 3.3	Valores de la superficie de Resonancia de Plasmón (SPR) para las diferentes nanopartículas consideradas.....	46
Tabla 4.1	Relación entre el objeto y tipo de estudio de la investigación.....	50
Tabla 4.2	Tipo de estudio para cada fase de la investigación.....	52
Tabla 4.3	Alcances, estrategias y acciones considerados para la investigación.....	54
Tabla 5.1	Relación entre metodología y aspectos de diseño.....	57
Tabla 5.2	Principales operaciones realizadas dentro de la etapa de síntesis inducida.....	60
Tabla 5.3	Comparación de operaciones y secuenciación.....	61
Tabla 5.4	Equipos y dispositivos utilizados en métodos propuestos de síntesis por biorreducción.....	63
Tabla 5.5	Equipos y especificaciones a utilizar en el diseño del sistema mecatrónico de síntesis por biorreducción para la obtención de nanopartículas metálicas.....	64
Tabla 5.6.	Equipos y dispositivos propuestos para el diseño del sistema.....	65
Tabla 5.7.	Variables identificadas para el diseño del sistema mecatrónico para síntesis de nanopartículas metálicas por biorreducción.....	66
Tabla 5.8	Concentraciones máximas de sustrato recomendadas para síntesis de nanopartículas metálicas.....	69
Tabla 5.9	Elementos de fijación, conexión y sujeción utilizados para el ensamble del sistema mecatrónico.....	74
Tabla 5.10	Parámetros de red para la elaboración de modelos de celda unitaria de CoNPs y AgNPs.....	80
Tabla 5.11	Estructura y grupo espacial para las CoNPs y AgNPs.....	78
Tabla 5.12	Comparación de datos geométricos de la celda unitaria para CoNPs.....	80
Tabla 5.13	Comparación de datos geométricos de la celda unitaria para AgNPs.....	82
Tabla 5.14	Parámetros de red de nanopartículas de cromo (Cr(0)), óxido de cromo (Cr ₂ O ₃) y carburo de cromo (Cr ₃ C ₂).....	85
Tabla 5.15	Tamaño característico de las nanopartículas de cromo utilizados para recubrimientos.....	87
Tabla 5.16	Parámetros para síntesis por diseño de nanopartículas de Cr.....	88
Tabla 5.17	Valores de parámetros de red optimizados y su comparación contra datos de referencia.....	89

Tabla 5.18	Valores de las constantes elásticas calculados mediante simulación.....	90
Tabla 5.19	Valores del módulo volumétrico (B) y el módulo de corte (G).....	90
Tabla 6.1	Tiempo utilizado para realizar síntesis de nanopartículas metálicas por diferentes métodos.....	93
Tabla 6.2	Biomasa utilizada con mayor frecuencia en biosíntesis.....	94
Tabla 6.3	Valores recomendados para realizar síntesis por biorreducción de nanopartículas metálicas utilizando biomasa extraída de lirio acuático (<i>Eichhornia crassipes</i>).....	97
Tabla 6.4.	Condiciones para la síntesis de nanopartículas por biorreducción utilizando biomasa como agente reductor.....	99
Tabla 6.5	Resultados de la verificación de movimientos.....	101
Tabla 6.6	Masa acumulada a desplazar por los componentes móviles del sistema mecatrónico.....	102
Tabla 6.7	Análisis de la fuerza máxima soportada por los elementos móviles del sistema.....	104
Tabla 6.8	Cantidad y tamaño promedio de AgNPs para las muestras seleccionadas.....	105
Tabla 6.9	Determinación de la variación de dureza superficial para recubrimientos a base de nanopartículas de cromo.....	108
Tabla 6.10.	Valores de H/E de diferentes nanopartículas propuesta para elaborar recubrimientos superficiales.....	110

LISTA DE FIGURAS

Figura No.	Título de la figura	Pag.
Figura 3.1	Representación esquemática de la síntesis de nanopartículas mediante plantas o extractos de plantas.....	26
Figura 3.2	Lirio acuático (<i>Eichhornia crassipes</i>).....	28
Figura 3.3	Protocolo para síntesis de nanopartículas metálicas utilizando plantas y sus extractos.....	30
Figura 3.4	Modelo sencillo de bandas de energía.....	39
Figura 3.5	Modelos sencillos de bandas de energía: (a) de un metal, (b) de un aislante, y (c) de un semiconductor.....	39
Figura 3.6	Distribución de Fermi-Dirac para varias temperaturas.....	42
Figura 3.7	Comportamiento de un sólido como conductor en función de la EF.....	43
Figura 3.8	Contexto de nivel de Fermi para un semiconductor.....	43
Figura 4.1	Metodología utilizada para el desarrollo de la investigación.....	51
Figura 5.1	Etapas de síntesis inducida para la obtención de nanopartículas metálicas en el proceso de síntesis por biorreducción utilizando lirio acuático.....	59
Figura 5.2	Síntesis de nanopartículas a partir de plantas y extractos.....	63
Figura 5.3	Valor óptimo de pH para la actividad enzimática.....	67
Figura 5.4	Valores de pH para síntesis de nanopartículas metálicas.....	68
Figura 5.5	Efecto de la concentración del sustrato sobre la formación de nanopartículas.....	69
Figura 5.6	Temperatura óptima para la actividad enzimática.....	70
Figura 5.7	Esquema de la disposición de componentes para elaborar el ensamble del sistema mecatrónico.....	73
Figura 5.8	Esquema de la disposición de componentes para elaborar el ensamble del sistema mecatrónico (elaboración propia).....	75
Figura 5.9	Movimientos y trayectorias a realizar por el sistema mecatrónico.....	77
Figura 5.10	Pasos necesarios para simulación molecular.....	79
Figura 5.11	Modelos de celda unitaria para (a) CoNPs y (b) AgNPs.....	80
Figura 5.12	Pasos de optimización. (a) CoNPs (b) AgNPs.....	81
Figura 5.13	Valores óptimos para la estructura optimizada de (a) CoNPs y (b) AgNPs.....	82
Figura 5.14	Algoritmo de simulación.....	83
Figura 5.15	Configuración y ejecución del módulo CASTEP.....	84
Figura 6.1	Diagrama de secuencia de operaciones para la automatización del proceso de biorreducción para la síntesis inducida de nanopartículas metálicas.....	92
Figura 6.2	Diagrama esquemático del sistema mecatrónico para síntesis de nanopartículas metálicas por biorreducción.....	96
Figura 6.3	Esquema general del efecto de manipulación de las variables de diseño para el control sobre el tamaño de nanopartículas sintetizadas utilizando el sistema mecatrónico propuesto.....	98
Figura 6.4	Modelo completo del sistema mecatrónico para síntesis de nanopartículas metálicas por biorreducción.....	100
Figura 6.5	Cálculo de la masa del cabezal oscilante.....	103
Figura 6.6	Cálculo de la masa del tubo de ensayo.....	103

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN

1.1 ESTABLECIMIENTO DE LA OPORTUNIDAD

La Nanotecnología es la capacidad de crear y mejorar elementos o productos a partir de la manipulación de diversos materiales a una escala de hasta 100 nanómetros (nm). Ésta se enfoca en la mejora de los materiales para aplicaciones concretas, desarrollando los llamados **nanomateriales**; término que se aplica a una amplia variedad de materiales de composición y propiedades muy diferentes, pero con la característica común de que al menos una dimensión externa de todas o parte de las partículas que los constituyen sea inferior a 100 nanómetros.

La utilización de productos que contienen nanomateriales se ha introducido en casi todos los sectores industriales. De acuerdo al reporte de Seguridad y salud en el trabajo con nanomateriales presentado por el Ministerio de Empleo y Seguridad Social del Gobierno de España (2015), entre las aplicaciones más destacadas se encuentran productos de la industria de la alimentación, la energía, la construcción, la medicina, la ingeniería de materiales y la aeroespacial.

Es un mercado prolifero, en el cual, según algunas estimaciones privadas presentadas en una reciente publicación (Sala de Inversión El economista, 2014), la nanotecnología producirá un nuevo y renovado impulso en el desarrollo tecnológico: sólo en China, existen 800 empresas probando suerte en un mercado de unos 30,000 millones de dólares de facturación en el 2012 y que promete representar una facturación de hasta 144,900 millones de dólares en el 2015.

Mientras que para la Unión Europea las estimaciones prevén que el volumen de los productos basados en la nanotecnología pase de 200 000 millones EUR en 2009 a 2 billones EUR de aquí a 2015 (Comisión SWD, 2012). De forma similar en Estados Unidos, la Fundación Nacional de la Ciencia estadounidense (NSF, por sus siglas en inglés) predice que para el año 2015 la nanotecnología será responsable de la mitad de los productos de línea en la industria farmacéutica.

Los principales nanomateriales manufacturados, para las aplicaciones y usos dentro del citado mercado, de acuerdo a la norma ISO, se agrupan en nano-objetos (ISO, 2010) y materiales nanoestructurados (ISO, 2011). Siendo las nanoplacas, nanofibras y nanopartículas los considerados como nano-objetos y los polvos nanoestructurados, los nanocompuestos, la nanoespuma sólida, los materiales nanoporosos y la nanodispersión fluida los correspondientes a los materiales nanoestructurados. De acuerdo a la Comisión SWD de la Unión Europea (2012), los nano-objetos y materiales nanoestructurados pueden ser de alguno de los siguiente tipos: 1) Nanomateriales inorgánicos no metálicos, 2) Metales y aleaciones, 3) Nanomateriales con base de carbono, 4) Nanopolímeros y Dendrímeros, 5) Puntos cuánticos y 6) Nanoarcillas.

La manufactura de los nanomateriales es de igual importancia que el mismo nanomaterial; por ello, los procesos para su producción son determinantes en la obtención de materiales con propiedades específicas. Para el investigador mexicano, Mauricio Terrones, el factor más importante para el uso masivo de nanomateriales es el **escalamiento en la producción de nanoestructuras (toneladas por año o por mes)** y el estudio de los efectos toxicológicos de algunos de estos para su utilización segura. El primer aspecto, menciona el investigador del Ipicyt, ha tenido avances, pues cada vez hay más empresas en el mundo desarrollando la infraestructura para que esto sea posible (Alcantara, 2008).

A nivel mundial la producción de nanomateriales, estimada de forma conservadora para el 2016 (Research And Markets, 2011), es de 44, 267 toneladas y 3.1 trillones de dolares, impulsada por la demanda de aplicaciones en la electrónica, la energía, la medicina, productos químicos, recubrimientos y catalizadores.

En el caso de México, para el año 2012, se tenía un registro de 101 empresas que producen nanomateriales o tienen relación con aplicaciones en nanotecnología. De las cuales, de acuerdo a la ubicación de la empresa en la cadena de valor, cuatro están en el nivel uno (producción de nanomateriales), veintiuna se ubican en el nivel dos (nanointermediarios) y setenta y seis en el nivel tres (productos nanohabilitados). Siendo las nanopartículas de diferentes materiales el principal producto de las empresas del nivel uno. En el caso de los nanointermediarios,

nivel dos, las nanopartículas son el principal nanomaterial utilizado, como es el caso de adición en conductores eléctricos para mejorar sus propiedades eléctricas, en recubrimientos para mejorar propiedades superficiales. Por último, en el nivel tres, son prácticamente el uso de los nanointermediarios para la elaboración de productos nanohabilitados, encontrándose empresas de todos los giros comerciales (Zayago, 2013).

De los párrafos anteriores se observa de forma clara el potencial de los nanomateriales, tanto en mercado como en aplicaciones en diversas áreas de las ciencias y la ingeniería. También es importante resaltar que dentro de los nanomateriales, las nanopartículas son utilizadas con mayor frecuencia. A nivel industrial se han desarrollado numerosas aplicaciones (Murty, 2013), las cuales incluyen el uso de nanomateriales en: construcción (en productos que mejoran la resistencia al desgaste y aumentan la rigidez de los materiales), medicina (como transportadores de fármacos para su liberación en el órgano diana), energía (células fotovoltaicas), automóvil y aeroespacial (agentes reforzantes en neumáticos y productos de caucho), química (inhibidores de la corrosión), electrónica y comunicación (componentes ópticos y optoelectrónicos incluyendo láseres y ordenadores compactos ultra-rápidos), cosmética (cremas solares), textil (protección contra el fuego y ropa antiolor).

Es por todo lo anterior, que se identifica como nicho de oportunidad la incursión dentro de la manufactura de nanomateriales y de forma específica en la síntesis de nanopartículas metálicas; ya que ésta ha cobrado gran importancia hoy en día debido a sus múltiples aplicaciones, que prometen beneficios de varios tipos abarcando campos casi de cualquier índole, desde planos médicos, tecnológicos o beneficios al medio ambiente (Rico-Moctezuma, 2010).

Finalmente, para lograr la incursión en el campo de la manufactura de materiales se planteó, desde el punto de vista de la ingeniería mecatrónica, realizar el diseño de un sistema tecnológicamente viable de utilizarse como medio para la obtención de nanopartículas metálicas; aplicado específicamente a un método estandarizado de proceso de síntesis por biorreducción. Partiendo de una sólida fundamentación que va desde la validación del método experimental de síntesis mediante simulación numérico-computacional, la adecuada secuenciación de las etapas presentes en el proceso de síntesis y el uso de técnicas CAD (Diseño Asistido por Computadora) y CAE (Ingeniería Asistida por computadora) para el diseño, análisis e integración de las piezas y componentes del sistema.

1.2 JUSTIFICACIÓN DEL ESTUDIO

Como se indicó en el establecimiento de la oportunidad, hoy en día, la nanotecnología ofrece un amplio potencial de aplicaciones, sino en todos, casi en todos los campos de la ciencia y la ingeniería.

Para lograr éstas nuevas e innovadoras aplicaciones se fabrican o utilizan los nanomateriales; mediante los cuales se logra el mejoramiento en las propiedades físicas y químicas de materiales convencionales, de elementos individuales o procesos productivos.

Sin embargo, para obtener éstas mejoras es necesaria la manufactura del nanomaterial con características definidas acordes a su futura aplicación; es decir, manipular las características que definen a la materia, como son la **forma, composición, tamaño y estructura**.

Cuando se trabaja a escala nanométrica (Nanociencia y Nanotecnología), al **modificar el tamaño** se puede producir un cambio significativo en las propiedades de los materiales, cuando las partículas alcanzan tamaños inferiores a cierto valor crítico (menor o igual a 100 nm); dando con ello una amplia gama de posibles aplicaciones (Zanella, 2012). Lo anterior gracias a propiedades únicas, moduladas simplemente cambiando su tamaño, forma, o la funcionalización de la superficie de la nanopartícula, sin cambiar la composición del material; indicando claramente la dependencia del comportamiento con el tamaño de la partícula; lo cual permite diseñar sus propiedades (Poole, 2003).

Lo anterior indica la existencia de una relación entre el desarrollo de los nanomateriales y sus posibles aplicaciones, mediante el control del tamaño de éstos; es decir diseñar nanomateriales con propiedades definidas para aplicaciones específicas. Lo cual, en consecuencia, conlleva al diseño del proceso de manufactura utilizado para fabricar el nanomaterial; justificando desde ésta perspectiva el desarrollo de sistemas para la producción de nanomateriales, ya sea optimizando los métodos convencionales o proponiendo nuevas alternativas.

1.2.1 NANOPARTÍCULAS

De forma general, a nivel industrial y en laboratorios de investigación, los principales tipos de nanomateriales que se fabrican se clasifican en nano-objetos (ISO, 2010) y materiales nanoestructurados (ISO, 2011). Dentro de los nano-objetos se consideran las nanoplacas, nanofibras y nanopartículas. Siendo las últimas de particular interés en numerosas aplicaciones, principalmente cuando se trata de nanopartículas de metales y óxidos metálicos. La investigación de los procesos de manufactura y de las nanopartículas mismas, se justifica también por

la creciente demanda, en el mercado, que se ha estimado para éstos nanomateriales. En la tabla 1.1, se muestra la proyección de la producción de nanopartículas.

Tabla 1.1. Estimación de la producción de nanopartículas en el mercado industrial proyectada al año 2020.

Nanopartículas	Periodo de estimación	Producción	Referencia
Nanopartículas metálicas y de óxidos metálicos	2012 - 2020	270,041 - 1663,168 tons	(Research And Markets, 2013)

De acuerdo a CNN expansión (Ortiz, 2008), se tenía una proyección estimada de crecimiento en el mercado nanotecnológico del 23 % anual; la cual, como se observa en la tabla 1.1, se supera para las nanopartículas cuya expectativa de crecimiento en la demanda es de 35 % anual. De igual forma y para el mercado mexicano, de acuerdo al reporte de la Red de innovación en nanotecnología en el estado de Nuevo León, en los insumos nanotecnológicos deseados, las nanopartículas metálicas, de óxidos y compuestas están en primer lugar con 57 % de demanda en el mercado (González, 2008).

1.2.2 PROCESOS PARA LA FABRICACIÓN DE NANOPARTÍCULAS

En la actualidad existen diversos métodos y técnicas de fabricación de nanopartículas, los cuales se pueden clasificar como indica Tikariha (2012) en aproximación o enfoque Top-down (físicos) y Bottom-up (químicos y biológicos).

En el enfoque Top-down «de arriba hacia abajo», los materiales en sólido volumétrico (a nivel macroscópico) son gradualmente reducidos a tamaño nanométrico mediante máquinas y técnicas de líquidos fuertes. En contraste, en el enfoque o aproximación Bottom-up «de abajo hacia arriba», los átomos o moléculas son ensamblados en estructuras moleculares en el rango nanométrico utilizando síntesis química y biológica de nanopartículas (Lengke, 2011).

Los métodos que utilizan la aproximación «de arriba hacia abajo», salvo la molienda, requieren de instrumentación compleja y complicada, alto consumo de energía, presión y temperatura controladas; lo cual los hace costosos. Por tanto, muchas veces se prefieren los métodos que utilizan la aproximación «de abajo hacia arriba». Los más empleados son los que utilizan procesos químicos. Sin embargo, para la síntesis de nanopartículas usando rutas químicas se involucran condiciones como alta temperatura y presión, además de incorporar el uso de agentes químicos reductores fuertes y débiles junto con agentes protectores (boro, hidruro de sodio, citrato de sodio y alcoholes). Estos agentes son en su mayoría tóxicos, inflamables y que no puede ser fácilmente liberado en el ambiente y en algunos casos la tasa de producción es baja (Sharma, 2009; Bar, 2009). Aunado a

esto, como comentan Mukherjee et. al., (2008), aunque ha habido extensas investigaciones sobre la síntesis química de nanopartículas, estas partículas tienen varios peligros potenciales, incluyendo cancerogenicidad, genotoxicidad, citotoxicidad y toxicidad general. Por lo cual, existe una necesidad de desarrollar procedimientos limpios, no tóxicos, y ecoamigables para la síntesis y el ensamble de nanopartículas.

Por consiguiente, los sistemas biológicos han sido focalizados y explotados para la producción de nanopartículas, proporcionando una alternativa segura a los métodos físicos y químicos (Musarrat, 2011). Contra este fondo, investigadores han estado trabajando extensivamente sobre síntesis intracelular y extracelular de nanopartículas metálicas que usan bacterias, hongos, levaduras, y muchas otras fuentes biológicas. La síntesis con estos agentes biológicos pueden ser realizada como lo indica Tikariha (2012), a condiciones ambientales de temperatura y presión.

Dentro de los procesos de síntesis biológica, los realizados utilizando biomasa o extractos de plantas o partes de estas resultan prácticos para la producción de nanopartículas, ya que se elimina la necesidad de mantener vivo un cultivo bacteriano como en el caso de síntesis con agentes vivos (Mohanani, 2013).

Así, considerando los puntos anteriores mencionados, los métodos biológicos empleados para síntesis de nanopartículas resultan mejores comparados con los métodos físicos y químicos de síntesis debidos a su amabilidad con el ambiente y como técnica de bajo costo (Rai & Durn, 2011). Además de ser potencialmente escalables en la producción de nanopartículas, factibles de realizarse a condiciones ambientales de temperatura y presión, presentar menor consumo de energía en comparación con los otros dos métodos de síntesis y ser un proceso de síntesis de un paso.

1.2.3 PROCESO DE BIORREDUCCIÓN UTILIZANDO BIOMASA DE LIRIO ACUÁTICO

En la actualidad, se desarrollan Investigaciones encaminadas al uso de plantas como materia prima para la elaboración de diversos productos, tal es caso del lirio acuático (*eichhornia crassipes*) que existe en muchos cuerpos de agua de la República Mexicana; planta que se pretende usar como materia prima para producir azúcar o bio-etanol; encontrando un uso alterno para esta planta que es considerada como un problema ya que destruye los ecosistemas donde se instala y cuyo costo por limpiar una hectárea es de 70 mil pesos. Alternativas como esta ayudaría a limpiar los cuerpos de agua minimizando los costos además de generar ingresos y empleos al procesar esta planta (UAM, 2014).

A su vez, el lirio acuático (*eichhornia crassipes*) puede ser también utilizado en la producción de nanopartículas metálicas. Trabajos como los desarrollados por Rosano-Ortega (2009), muestran la síntesis de nanopartículas metálicas mediante un proceso experimental de biorreducción usando como agente reductor biomasa extraída del lirio acuático. Proceso en el cual, por medio de la manipulación de las condiciones de síntesis permite el control racional de la morfología de las partículas y provee los medios para adaptar las propiedades de los materiales durante el proceso de síntesis; obteniéndose nanopartículas estables de tal manera que pueda mantenerse su tamaño y su forma en función del tiempo.

En resumen, la manufactura de nanomateriales tiene gran demanda por causa de un mercado que cada vez incorpora más productos nanotecnológicos a la vida diaria, siendo las nanopartículas uno de los nanomateriales con mayor demanda, gracias a su versatilidad y potenciales aplicaciones, ya sea de forma directa o indirecta incluidas en otros sistemas. Aunque existen actualmente métodos bien establecidos para la producción de nanomateriales, éstos presentan los inconvenientes ya citados; por lo cual es necesario explorar nuevas alternativas de procesos que proporcionen nanomateriales con características iguales o mejores que los métodos de síntesis convencionales, que sean fáciles de implementar tanto en tecnología como en manejo y que estén acordes con las demandas actuales de sustentabilidad.

Por otro lado, en el aspecto tecnológico, la producción de los nanomateriales se logra con los dispositivos y equipos especializados utilizados en los diferentes procesos de síntesis, mismos que existen y se encuentran totalmente definidos para los métodos físicos y químicos, como se muestra en la tabla A-1 de los anexos. Sin embargo no es así para los métodos de síntesis biológicos, donde después de consultar los trabajos citados en las secciones 1.1.y 1.2, se observa que no existen equipos y dispositivos especializados para la realización de síntesis biológica por el método de biorreducción utilizando biomasa o extractos de plantas; lo cual muestra un vacío y oportunidad para realizar desarrollos tecnológicos de equipamiento que permita la manipulación de las condiciones de síntesis y lograr el control de las propiedades de las nanopartículas a producir.

Finalmente, de referencias científicas revisadas, se puede concluir que los métodos de síntesis biológicos presentan mayores ventajas en la producción de nanopartículas, tales como menor costo, sin emisión de residuos tóxicos contaminantes generados durante el proceso de síntesis ya que utilizan agentes biológicos diversos, la reducción de iones metálicos es mucho más rápida y se puede realizar en condiciones ambientales de temperatura y presión; además de la contribución social mencionada como en caso del lirio acuático. Todo esto facilita la construcción de dispositivos y/o equipos, que permitan automatizar las

técnicas y métodos utilizados en la producción de nanopartículas metálicas por síntesis biológica.

1.3 OBJETIVO CENTRAL DE LA TESIS

Diseñar un sistema mecatrónico a nivel de planta piloto, mediante herramientas computacionales y con base en la metodología del proceso de síntesis por biorreducción, que contribuya a la automatización del proceso de síntesis para la obtención de nanopartículas metálicas.

1.3.1 OBJETIVOS ESPECIFICOS

1. Identificar los parámetros y variables principales que intervienen en el proceso de síntesis por biorreducción, mediante experimentación y simulación computacional, para definir y/o establecer las variables de diseño del sistema.
2. Discernir, mediante revisión de literatura científica y visita a laboratorios especializados, los principales dispositivos y equipo (mecánico, eléctrico, electrónico, etc.) utilizado para la obtención de nanopartículas metálicas.
3. Elaborar la metodología de diseño y selección de componentes, mediante la integración de los pasos establecidos del proceso de síntesis por biorreducción, que permita reproducir la secuencia y resultados en la obtención de nanopartículas metálicas.
4. Elaborar el modelo virtual de los componentes, mediante software especializado, para el ensamble del sistema en su conjunto.
5. Validar el funcionamiento de los componentes diseñados, mediante simulación numérica y las teorías correspondientes, para verificar la resistencia y funcionalidad de los componentes a las condiciones de trabajo requeridas.
6. Evidenciar el cumplimiento del objetivo general de la investigación, mediante informes técnicos y publicaciones de artículos.

1.4 ALCANCES Y LIMITACIONES

En esta sección se presentan las acotaciones pertinentes para el proyecto, las cuales se consideran necesarias para el cumplimiento del objetivo general de la investigación.

Alcances:

- Para el diseño del sistema mecatrónico, se considera en específico el proceso de síntesis por biorreducción propuesto por Rosano-Ortega (2009).
- El diseño comprende la elaboración de los modelos, la simulación de movimientos y el análisis del comportamiento de los componentes bajo las condiciones simuladas; siendo estas de forma individual y en la medida de lo posible del sistema completo.
- La fase de validación del método de síntesis se realiza mediante herramientas computacionales y software especializado; utilizando la optimización de la geometría de celda unitaria como dato de comparación.
- Por tratarse de un diseño, en el caso de la estimación de costos, solo se realiza un presupuesto aproximado de los principales componentes a utilizar para la construcción del sistema.
- Se proyecta una potencial aplicación de las nanopartículas a sintetizar con el sistema mecatrónico propuesto.

Limitaciones:

- El diseño y simulación en ambientes virtuales, se limita a la disponibilidad y capacidad del hardware y software disponible y autorizado para su uso por las instituciones participantes en el proyecto.
- Para la simulación y análisis se consideran solo nanopartículas sintetizadas previamente por este método.
- Recursos e infraestructura disponibles en las instituciones participantes en el proyecto.

1.5 PREGUNTAS DE INVESTIGACIÓN

¿Cuál es procedimiento y biomasa más utilizado en la síntesis por biorreducción para la obtención de nanopartículas? y ¿qué diferencias se presentan con el utilizado como base para este proyecto?

¿Cuáles y cuántos son los dispositivos comúnmente utilizados en la obtención de nanopartículas metálicas mediante síntesis por biorreducción?

¿Con qué equipo especializado se realiza la síntesis por biorreducción?, ¿existe de forma modular o integrado en un sistema?

¿Cuál es el costo acumulado de los equipos que son utilizados actualmente en el proceso de síntesis de nanopartículas metálicas por biorreducción?

¿Qué cantidad de nanopartículas se produce mediante los métodos de síntesis por biorreducción? y ¿cuáles son las formas convencionales en que se entrega el producto donde se encuentran contenidas las nanopartículas?

1.6 IMPACTO ESPERADO

Es una propuesta de desarrollo tecnológico que permitirá:

1. Potencial uso en la producción de nanomateriales, al validar un método propuesto de síntesis biológica cuyas pruebas experimentales muestran la obtención de nanopartículas metálicas.
2. Propuesta para generar tecnología que funcione a condiciones ambiente de presión y temperatura; facilitando su uso en ambientes no controlados.
3. Favorece la sustentabilidad al dar un uso alternativo de una planta considerada como problema en los cuerpos de agua en la república mexicana, el lirio acuático, al utilizarla como materia prima de la biomasa del proceso de síntesis; favoreciendo la disminución de ocupación y contaminación de cuerpos de agua.

1.7 ORGANIZACIÓN DEL ESTUDIO

El desarrollo de la investigación se conforma por las etapas mostradas en el cronograma de actividades que se presenta en la tabla 1.2.

Tabla 1.2. Organización de la investigación por etapas y tiempos estimados para su realización.

		Año 2014												Año 2015																																							
Actividades/ (periodo proyectado)	m	Ago.				Sept.				Oct.				Nov.				Dic.				Enero				Feb.				Mar.				Abr.				May.				Jun.				Jul.				Ago.			
Revisión de literatura técnica del estado del arte.	s	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4												
(18/08/2014 al 17/08/2015)	P																																																				
Fase 1 (Proceso de síntesis y caracterización).	P	c	o	n	c	l	u	i	d	a																																											
(CONCLUIDA)	R																																																				
Fase 2 (Selección y diseño de componentes del sistema)	P																																																				
(18/08/2014 al 19/12/2014)	R																																																				
Fase 3 (Validación por simulación numérico-comput.).	P																																																				
(01/08/2014 al 29/05/2015)	R																																																				
Fase 4 (Análisis e interpretación de resultados).	P																																																				
(01/04/2014 al 29/05/2015)	R																																																				
Documentación y redacción de informe final de la tesis	P																																																				
(18/08/2014 al 31/07/2015)	R																																																				
Estancias de investigación (E1 a E10)	P			E1				E2					E3				E4				E5				E6				E7				E8				E9				E10												
(18/08/2014 al 31/07/2015)	R																																																				
Examen para obtención de grado	P																																																				
(08/2015)	R																																																				
	P	Programado								R	Real							m	meses							s	semanas																										

La duración en tiempo para cada una de las etapas se considera por meses y la secuenciación en las actividades es ascendente como se observa en el número para cada etapa del proyecto.

1.8. ESTRUCTURA DE LA TESIS

El presente documento de tesis, resultado de la investigación realizada, se compone de siete capítulos, el primero corresponde a la introducción, donde se describen los aspectos estructurales de la investigación, desde el planteamiento de la oportunidad, la justificación, el objetivo central de la tesis y finalizando con las preguntas de investigación así como con los alcances y limitaciones que acotan la investigación. En concordancia al contenido expuesto en el capítulo introductorio, en el capítulo 2 se presenta la revisión bibliográfica que guarda el estado del arte en lo referente a la síntesis de nanopartículas, iniciando con la información general de los métodos de síntesis utilizados con más frecuencia para obtener nanopartículas metálicas y centrándose de forma particular en el método de síntesis por biorreducción; con el objeto de determinar los equipos y dispositivos utilizados para desarrollar de forma experimental éste método de síntesis de un solo paso. De igual forma se incluyen el tema de simulación

atomística y el uso de herramientas computacionales en el análisis de nanopartículas obtenidas mediante síntesis por biorreducción; considerándose para ello tanto el proceso de síntesis así como las propiedades físicas asociadas a las nanopartículas resultantes.

Una vez determinados los conceptos teóricos que enmarcan a la investigación, mediante la revisión y discusión del estado del arte, fue necesario profundizar en su descripción detallada, esto por causa de ser la base para el desarrollo del proyecto y el entendimiento de los resultados. Por lo tanto, en el capítulo 3 se presenta la información correspondiente a la fundamentación teórica de los conceptos requeridos, tal como el mecanismo de formación de las nanopartículas en el proceso de síntesis por biorreducción, el tipo de biomasa a utilizar y las propiedades características que definen su uso dentro del proceso, las propiedades mecánicas de interés en el campo de la ingeniería mecatrónica y el proceso de automatización de sistemas productivos.

En el capítulo 4, con base en la revisión del estado del arte y la fundamentación teórica para el proceso de biosíntesis, se establece y muestra la metodología utilizada para el desarrollo de la investigación; la cual se estructuró en fases, cuyas estrategias y acciones correspondientes se plantearon para alcanzar el objetivo central del proyecto, mediante su asociación con el proceso de automatización de sistemas de producción, proyectando como producto final el diseño de un sistema mecatrónico que emule el proceso de síntesis de nanopartículas metálicas por biorreducción;

El capítulo 5 corresponde al desarrollo de cada una de las fases planteadas en la metodología, comenzando con un análisis del método de síntesis, fase 1, donde se estudiaron diferentes propuestas utilizadas para sintetizar nanopartículas, con la finalidad de determinar sus semejanzas y establecer posibles puntos de mejora; continuando con la fase 2, donde se realizó la búsqueda de soluciones; la cual correspondió en determinar los componentes a utilizar para el diseño del sistema mecatrónico; enseguida, en la fase 3, se desarrolló la validación del proceso de síntesis y diseño del sistema, usando para ello simulación atomística y modelado mediante herramientas de CAD (Diseño Asistido por Computadora); finalizando con el desarrollo de una aplicación de las nanopartículas, teniendo como caso de estudio la síntesis por diseño de nanopartículas de cromo para elaborar recubrimientos sobre superficies metálicas.

Para la fase 4 del desarrollo, se realizó en el capítulo 6 el análisis y la discusión de los resultados obtenidos en las tres fases anteriores; empleando para ello la información contenida en la fundamentación teórica y los resultados obtenidos en cada etapa del desarrollo; teniendo al final del capítulo las respuestas a las

preguntas de investigación y el diseño de un sistema mecatrónico que realice la síntesis de nanopartículas metálicas por biorreducción.

Como cierre del documento, en el capítulo 7, se encuentran las conclusiones resultantes tanto del desarrollo de la investigación como del análisis y discusión de resultados, mostrando en primera instancia el grado de cumplimiento del objetivo general, lo relevante del desarrollo y resultados de cada fase y complementado con la propuesta de trabajos futuros a realizar como una continuación de este trabajo de investigación.

Al final del presente documento y como parte complementaria de su estructura se encuentran las secciones correspondientes a las referencias bibliográficas, los anexos que contienen la información en extenso referida en los capítulos de la tesis y los documentos probatorios de los productos académicos emanados de este trabajo de investigación.

CAPÍTULO 2

REVISION DEL ESTADO DEL ARTE

2.1. ESTADO DEL ARTE

En este capítulo se presenta una revisión de literatura especializada, sobre los tópicos principales considerados para esta investigación y que fundamentan el marco teórico.

La revisión se enfoca en el proceso de síntesis de nanopartículas metálicas, obtenidas por el método de biorreducción. Se consideran de forma particular, para la revisión de literatura, referencias de investigaciones sobre síntesis para la obtención de nanopartículas de plata (Ag), oro (Au), cromo (Cr) y cobalto (Co). Lo anterior en función de sus potenciales aplicaciones para el desarrollo tecnológico en áreas de ingeniería como la mecánica, la eléctrica, la electrónica y otras afines.

El interés específico se centra en los métodos que utilizan como agente reductor materia orgánica obtenida de plantas o partes de plantas (raíz, hoja, tallo, corteza, frutos y sus extractos); con el objeto de establecer las similitudes en el procedimiento, los equipos de laboratorio utilizados y el estado de materia con el cual se presenta el producto que contiene las nanopartículas sintetizadas. De forma tal que se tenga la información necesaria para realizar la propuesta de un sistema mecatrónico, semi o automatizado, que permita la producción de nanopartículas metálicas mediante biorreducción utilizando plantas y malezas; considerando de manera integral para el diseño los aspectos técnicos, de

funcionalidad, seguridad, mantenimiento y sustentabilidad del proceso y el producto.

2.1.1 SÍNTESIS POR BIORREDUCCIÓN Y SU VIABILIDAD PARA LA PRODUCCIÓN DE NANOPARTÍCULAS METÁLICAS

Las nanopartículas metálicas han atraído mucho la atención a la ciencia de la nanoescala, desde la década pasada, por sus aplicaciones para la ingeniería y la tecnología, por sus inusuales propiedades físicas y químicas (Naz, 2014). En años recientes, muchos esfuerzos han sido focalizados en el desarrollo de nuevas estrategias para la síntesis de nanopartículas, de alta dispersión, tamaño y forma uniforme (Saion, 2013).

Actualmente, un gran número de métodos físicos, químicos, biológicos e híbridos, son válidos para sintetizar diferentes tipos de nanopartículas (NPs) metálicas (Mahdavi, 2013). Los métodos físicos y químicos son los más populares para sintetizar nanopartículas, sin embargo su uso provoca efectos tóxicos sobre los humanos y el medio ambiente (Azizi, 2013, Jae, 2009). Por ello, existe una creciente necesidad de desarrollar protocolos de síntesis verde que permitan superar el problema de la toxicidad en la síntesis; para lo cual, los métodos verdes eco-amigables tienen un mejor rol en la producción de nanopartículas (Naz, 2014; Arockiya, 2012).

Nanopartículas metálicas de materiales como la plata (Ag) (Umoren, 2014; Astalakshmi, 2013; Azizi, 2013; Akl, 2012), el oro (Au), (Vadlapudi, 2014; Birendra, 2014; Mohanan, 2013; Ipsita, 2013; Aromal, 2012), el cromo (Cr) (Rakesh, 2013; Ramesh, 2012); el Cobalto (Co) (Naz, 2014) entre otros; han sido obtenidas utilizando diversos materiales biológicos como agentes reductores y en algunos casos también como estabilizadores en los diferentes métodos de síntesis propuestos, tabla 2.1.

Tabla 2.1. Materia orgánica y sal metálica utilizadas para la síntesis de nanopartículas metálicas por biorreducción.

Material	Autor	Materia orgánica	Sal metálica
Plata (Ag)	Astalakshmi, 2013; Azizi, 2013; Umoren, 2014; Anandini, 2013; Aki, 2013.	Corteza de eucalipto Macro alga marina Extracto de manzana roja Extracto de hoja de centella Extracto de hoja de algarrobo.	Nitrato de plata (AgNO ₃)
Oro (Au)	Birendra, 2014; Ipsita, 2013; Mohanani, 2013; Kirtee, 2013; Aromal, 2012	Extracto de hojas de ginseng Glucano de hongo comestible Extracto de Jugo de cítricos Extracto de corteza del árbol <i>Ficus religiosa</i> Extracto de semillas de fenogreco.	Ácido aurico (HAuCl ₄)
Cromo (Cr)	Rakesh, 2013 Ramesh, 2012	Extracto de planta <i>Mukia Maderaspatana</i> Extracto de hojas de cacahuete	Dicromato de potasio (K ₂ Cr ₂ O ₇)
Cobalto (Co)	Naz, 2014	Ácido gálico	Cloruro de cobalto hidratado CoCl ₂ ·6H ₂ O (99.9%)

De los trabajos de investigación citados en la tabla 2.1, se observa que, las plantas (Azizi, 2013; Ipsita, 2013), partes de ellas (Astalakshmi, 2013) y sus extractos (Umoren, 2014; Kirtee, 2013; Ramesh, 2012), son de los materiales biológicos comúnmente utilizados en la síntesis de nanopartículas metálicas por el método de biorreducción. De igual manera, se observa que las sales metálicas utilizadas con mayor frecuencia para obtener nanopartículas de plata, oro, cromo y cobalto, son nitrato de plata (AgNO_3), ácido aurico (HAuCl_4), dicromato de potasio ($\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$) y cloruro de cobalto hidratado ($\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$).

De una revisión amplia de los trabajos citados en la tabla 2.1, se observó que todos los métodos de síntesis utilizados para obtener nanopartículas metálicas constan de tres etapas fundamentales; las cuales se denominan: 1ª. Etapa. Preparación de materia reductora, 2ª. Etapa. Síntesis inducida y 3ª. Etapa. Caracterización de muestras obtenidas.

Para la 1ª. Etapa, la presentación de la materia reductora se tiene como polvo fino, para la materia obtenida del secado y molienda de hojas (Azizi, 2013) y cortezas (Astalakshmi, 2013); en forma de extracto líquido para la solución obtenida de la ebullición de hojas (Birendra, 2014; Anandini, 2013; Aki, 2013; Ramesh, 2012), cortezas (Kirtee, 2013,) y frutas (Umoren, 2014; Mohanan, 2013). Para los métodos mencionados, la materia reductora tuvo un proceso de recolección, lavado, picado, secado (deshidratación natural o inducida), molido y almacenamiento para el caso de polvo fino; además de una fase de ebullición del polvo con agua destilada o doble destilada y filtrado de extracto para su posterior almacenamiento.

Para la 2ª. Etapa, se tiene la preparación del medio de reacción, el cual es una solución formada de una porción de materia reductora (polvo o líquido), combinado con la sal metálica del material a sintetizar. En la tercera y cuarta columna de la tabla 2.1, se muestran algunas combinaciones entre materia reductora y la sal metálica para la obtención de nanopartículas. Es en esta etapa donde se forman las nanopartículas, dentro del medio de reacción.

Se encontró que para la obtención de nanopartículas monodispersas con un tamaño definido, se requiere del control de todos los parámetros que intervienen en la síntesis (pH, origen y concentración de la sal, temperatura de nucleación y crecimiento) (Jaber, 2014). La variación de estos parámetros determinan el tamaño y la forma de la nanopartículas; los efectos de estos cambios son la disminución en el tamaño y definición de la forma esférica, tal como se observa en la tabla 2.2.

Tabla 2.2 Efectos de la variación de parámetros que intervienen en la síntesis inducida de nanopartículas metálicas.

Parámetro	Referencia	Variación	Efecto
Ph	Aromal, 2012	Incremento	Formación de partículas monodispersas de forma esférica y menor tamaño.
Concentración del extracto	Birendra, 2014 Mohanani, 2013 Aromal, 2012	Incremento	Disminución del tamaño de la partícula y mayor definición de forma esférica
Concentración de la sal metálica	Birendra, 2014	Incremento	Disminución del tamaño de la partícula y mayor definición de forma esférica
Temperatura de nucleación	Astalakshmi, (2013) Azizi, (2013) Ipsita, 2013	30 °C 35 °C 70 °C	Parámetro constante, referenciar el efecto a la variación de los otros parámetros involucrados.
Temperatura de crecimiento	Astalakshmi, (2013) Azizi, (2013) Umoren, 2014 Mohanani, 2013	Temperatura ambiente	Parámetro constante, referenciar el efecto a la variación de los otros parámetros involucrados.

Dentro del proceso de síntesis inducida los componentes orgánicos de la materia reductora tiene un papel importante, por ejemplo, las proteínas no son solo responsables de la síntesis, sino que también funcionan como agente estabilizador (Mohanani, 2013), los fenoles y amidas condicionan el tamaño de la partícula formada (Kirtee, 2013).

Otro aspecto a considerar es el tiempo empleado en la síntesis, para lo cual se encontró que existen métodos propuestos con tiempos que van desde los 5 minutos (Aki, 2013) hasta 24 horas (Astalakshmi, 2013).

Finalmente, las muestras obtenidas como producto del proceso de síntesis, con los métodos propuestos por los autores citados en la tablas 2.1 y 2.2, se tienen en forma de solución acuosa conteniendo las nanopartículas del metal sintetizado. Estas muestras son utilizadas para el proceso de caracterización; mediante el cual se determinan los datos del tamaño, la estructura, la forma y propiedades de las nanopartículas obtenidas.

Para la 3^a. Etapa, se observó, que la caracterización de las muestras de nanopartículas obtenidas, se realiza principalmente mediante las técnicas que se presentan en la tabla 2.3.

Tabla 2.3. Principales técnicas de caracterización para nanopartículas metálicas sintetizadas por biorreducción.

Metal	Autor	Técnicas de caracterización	Descripción de la técnica
Plata (Ag)	Astalakshmi, 2013 Azizi, 2013 Umoren, 2014 Anandini, 2013 Aki, 2013	Uv-vis, FTIR, XRD, TEM Uv-vis, FTIR, XRD, TEM Uv-vis, SEM, XRD, FTIR Uv-vis, XRD, FTIR, SEM, TEM Uv-vis, XRD, FTIR, SEM	Espectroscopia UV-vis. Usada para identificar la presencia de nanopartículas resultantes. Esto se hace por medio del valor de la Superficie de Resonancia de Plasmon (SPR); cuyos valores característicos indican la presencia de las nanopartículas de los metales de interés
Oro (Au)	Birendra, 2014 Ipsita, 2013 Mohanani, 2013 Kirtee, 2013 Aromal, 2012	Uv-vis, FTIR, TEM Uv-vis, FTIR, XRD, TEM Uv-vis, TEM, XRD Uv-vis, XRD, FTIR, TEM Uv-vis, TEM, XRD, FTIR	Transformada Infra-Roja de Fourier (FTIR). Permite identificar los compuestos y/o grupos orgánicos presentes en el medio de reacción y a los cuales se les atribuye la reducción del metal a nanopartículas.
Cromo (Cr)	Rakesh, 2013 Ramesh, 2012	Uv-vis, TEM, XRD, FTIR Uv-vis, FTIR, SEM, XRD	Difracción de Rayos X (XRD). El objeto principal, es la identificación de la estructura fundamental que guardan las nanopartículas sintetizadas.
Cobalto (Co)	Naz, 2014	Uv-vis, IRFT, XRD, SEM	Microscopia Electrónica de Transmisión de Alta Resolución (HR-TEM). Utilizada para cuantificar el tamaño de las nanopartículas, así como corroborar la forma y estructura que fue determinada por XRD.

Dentro de las técnicas de caracterización utilizadas, la espectroscopia UV-vis proporciona de forma rápida la información sobre la presencia de nanopartículas en una muestra de síntesis analizada. Los valores de la Superficie de resonancia de Plasmon (SPR) que se obtienen de la medición, son comparados contra valores de referencia del metal del que se trate; por ejemplo para la plata (Ag) el valor de la SPR es cercano a los 430 nm, para el oro (Au) cercano a los 530 nm, para el cromo (Cr) cercano a los 450 nm y para el cobalto de 430 nm, todos estos datos referenciados a las investigaciones consultadas en la tabla 2.3.

De la viabilidad de la síntesis por biorreducción para la producción de nanopartículas metálicas, se observa que esta se fundamenta en:

- **La simplicidad del proceso**, ya que eliminan la complejidad de realizar o mantener el cultivo de microorganismos vivos (bacterias) como agentes reductores para el proceso de síntesis (Mohanani, 2013); se considera como un método de síntesis de un solo paso, esto a causa de requerir solo la preparación del medio de reacción e inducir la síntesis del material; y además es un método de menor costo en comparación con los métodos físicos y químicos de síntesis; ya que se puede realizar a condiciones ambientales de presión y temperatura y no requiere equipo de laboratorio sofisticado (Umoren, 2014).

- **Es un método eco-amigable**, porque la química verde es el diseño, el desarrollo y la implementación de productos químicos y procesos para reducir o eliminar el uso y generación de sustancias que son peligrosas para la salud humana y el medio ambiente (Tamuly, 2013). De forma reciente, existe un énfasis en el

incremento de los métodos de química verde, para evitar los problemas relacionados a la toxicidad de los químicos y los solventes en los procesos de síntesis. Los nanomateriales preparados mediante síntesis verde son ambientalmente benévolos (Naz, 2014).

- **Puede ser escalado a mayores niveles de producción**, el proceso de síntesis de nanopartículas mediante extractos de plantas, puede ser fácilmente escalable y de menor costoso, además los extractos pueden funcionar como agentes reductores y estabilizadores en el proceso de síntesis (Umoren, 2014).

2.1.2. DISPOSITIVOS Y EQUIPOS UTILIZADOS EN EL MÉTODO DE SÍNTESIS POR BIORREDUCCIÓN

Los dispositivos y equipos utilizados para este método de síntesis, pueden agruparse en tres bloques principales, tabla 4, correspondientes a los utilizados para las etapas de preparación de la materia reductora, de síntesis inducida y de caracterización.

La etapa de caracterización no se consideró en la tabla 2.4, por causa que ésta se realiza en un segundo paso y con equipo de medición especializado y comercial; el cual no forma parte de los dispositivos y equipos utilizados para la síntesis de nanopartículas de los trabajos citados.

Tabla 2.4. Equipos y dispositivos utilizados en métodos propuestos de síntesis por biorreducción.

Material	Referencia	Preparación de materia reductora							Síntesis inducida							Particularidades
		A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	
Plata (Ag)	Astalakshmi, (2013)				X	X				X	X					
	Azizi, (2013)				X	X	X			X	X		X			
	Umoren, 2014	X	X	X	X	X	X			X	X				X	
	Anandini, 2013			X	X		X	X	X	X			X		X	
	Aki, 2013	X	X			X	X	X	X	X	X		X			
Oro (Au)	Birendra, 2014			X	X	X	X			X	X					
	Ipsita, 2013	X				X	X	X		X	X					
	Mohanani, 2013					X	X			X	X		X		X	Extracción del jugo de la fruta
	Kirtee, 2013		X	X	X			X								
	Aromal, 2012	X				X	X			X		X			X	
Cromo (Cr)	Ramesh, 2012	X	X			X	X			X	X	X				Secado de la solución que contiene las nanopartículas mediante calentamiento en un horno
Cobalto (Co)	Naz, 2014									X	X				X	

(A) Lavado, (B) Corte (Picado), (C) Secado, (D) Molido, (E) Ebullición, (F) Filtrado, (G) Centrifugado, (H) almacenamiento.

(I) Recipiente (contenedor), (J) Agitación, (K) Calentamiento, (L) Centrifugado, (M) Filtrado, (N) Almacenamiento

Del análisis de la tabla 2.4, se establece que para el secado de las plantas, previo a la molienda, se realiza principalmente por deshidratación bajo exposición solar (Anandini, 2013, Aki, 2013), por secado en frío a temperaturas bajo 0°C (o por medio de un horno de inducción a temperaturas entre los 60 – 80 °C.

2.1.3. SIMULACIÓN NUMÉRICO COMPUTACIONAL

El modelado atómico ha estado en la frontera de la investigación computacional de los materiales y ha revelado una gran cantidad de información sobre estructuras y propiedades de elementos estructurales individuales (nanocapas, nanopartículas, nanofibras, nanoalambres y nanotubos), así como las características de las regiones interfaciales y la modificación de las propiedades de los materiales en la nanoescala. El modelado computacional está jugando un rol prominente en el desarrollo del entendimiento teórico de la conexión entre la estructura a nivel atómico y las propiedades efectivas (macroscópicas) de los nanomateriales (Zhigilei, 2012).

Para entender esta relación entre la estructura y las propiedades efectivas de nanopartículas metálicas, dentro de las investigaciones que utilizan la simulación atómica se citan trabajos relacionados con estudios para el control de los procesos de síntesis y estudios de la determinación y comportamiento de las propiedades resultantes para materiales nanoestructurados.

Dentro del estudio y control de los métodos de síntesis para la obtención de nanopartículas, el trabajo realizado por Rouleau et al (2014), muestra el uso de simulación atómica, específicamente simulación de Dinámica Molecular (DM) de gran escala, aplicada a un método de ablación laser para la obtención de nanopartículas, realizada para entender la evolución de los esfuerzos de tensión y compresión en películas líquidas delgadas que conllevan a su rompimiento y expulsión de dos grupos de nanopartículas con diferente velocidad y distribución de tamaño, 10 nm y 20 nm respectivamente.

También Goel et. al. (2014), se presenta un análisis de la relación estructura-propiedades para recubrimientos superficiales aplicados por la técnica de impacto de nanopartículas por pulverización térmica. La interacción de las nanopartículas cristalinas de cobre y el sustrato, se modeló mediante Dinámica Molecular (MD); la construcción del modelo consto de una placa de sustrato dividida en tres grupos de átomos y las nanopartículas que impactan sobre la placa. Se encontró que la topografía de la cubierta es significativamente dependiente de la velocidad a 500 m/s es esférica, a 1000 m/s es piramidal y a 1500 m/s se incrementa la planicidad y la topografía es parecida a un hongo zeta.

Investigaciones como la realizada por Bouhemadou (2014), muestra un análisis generalizado sobre las propiedades estructurales, elásticas, electrónicas, químicas y ópticas para óxidos de cobre (ACuO). El estudio fue realizado mediante modelos y simulaciones computacionales basados en cálculos *ab-initio* de energía total, utilizando el método de pseudopotenciales de onda-plana (PP-PW) dentro de la Teoría de Funcionales de Densidad (DFT), implementada en el módulo CASTEP del software *MaterialStudio*. Los resultados incluyen la optimización de parámetros cristalinos y su dependencia de la presión, los módulos de elasticidad y sus propiedades relacionadas de mono y poli cristales, la estructura de bandas, densidad de estados, carga efectiva de portadores de masa, las distribuciones de densidad de carga, transferencias de carga y propiedades ópticas; con una diferencia entre valores experimentales y calculados del 2 % aproximadamente.

De forma similar, Córdoba (2012) analizó las propiedades electrónicas y magnéticas para el óxido de manganeso (MnO_2); en el estudio se realizó una caracterización computacional de la estructura electrónica, desarrollando una serie de cálculos tipo *ab-initio* y la formulación mediante la teoría de funcionales de densidad (DFT), con aproximación LDA+U implementada sobre el código *Wien2K*. Se encontró una diferencia de 1.6 % entre los parámetros de red calculados comparados con datos experimentales y un comportamiento magnético alto 6.08 μB , lo que potencia aplicaciones para microelectrónica.

Al igual que para elementos y compuestos, la simulación atomística permite analizar las propiedades de sistemas intermetálicos. Zhenling (2014) investigo las propiedades estructurales, elásticas y electrónicas, de ocho sistemas intermetálicos ternarios (Ti-Cu-Me. Me= Al, Ga e In). Utilizo un análisis sistemático basado en el método de *primeros principios*, con la Teoría de Funcionales de Densidad (DFT) y la aproximación de Gradiente Generalizado (GGA). Para el modelado y simulación se utilizó el método de la supercelda (SC) y *PP-PW*. Los resultados muestran que esta aproximación es precisa para presiones cero y se predicen materiales frágiles y dúctiles para estas combinaciones.

Para sistemas nanoestructurados Chang (2013) presentó un estudio a este respecto, donde se analizó el efecto del espesor de películas delgadas de MgF_2 sobre las propiedades citadas. Se utilizaron modelos construidos por capas, estructuradas a nivel manométrico con capas individuales de 12 Å, a lo largo de la dirección (001) y lo suficiente delgadas para eliminar los efectos de las condiciones periódicas de frontera. La simulación computacional fue implementada mediante el módulo *CASTEP* del software comercial *Accelrys MaterialStudio*. Los resultados muestran que las películas son energéticamente estables con 25 capas, un espesor de 4 nm aproximadamente y que para cierto

rango de espesores se pueden desarrollar recubrimientos anti reflejantes y de alta reflexión.

Los resultados de estos y numerosos estudios similares, muestran que los cálculos *ab-initio*, basados en la Teoría de Funcionales de Densidad (DFT), son la metodología utilizada con mayor frecuencia para el análisis de los procesos de síntesis y determinación de propiedades de materiales nanoestructurados.

La precisión de DFT para predecir las propiedades evaluadas, esta típicamente cercana al 2 % de diferencia contra datos experimentales. Esto permite predecir constantes elásticas para nuevos materiales (Milman y Waren, 2001) o para materiales donde los datos experimentales no existen (Winkler, et al., 2001); para predecir propiedades elásticas bajo condiciones de presión (Karki et al. 1997) o para resolver discrepancias entre resultados experimentales contradictorios (Cruz, 2012).

Los softwares especializados son herramientas útiles en los análisis, por ejemplo el software *Materialstudio*, como herramienta de cálculo para el análisis y diseño de nanomateriales, es utilizado con resultados aceptables para simulación atomística (Chang, 2013; Bouhemadou, 2014; Zhenling, 2014).

2.2. DISCUSIÓN DEL ESTADO DEL ARTE

Por lo anterior, se considera que un proceso de síntesis por biorreducción, utilizando plantas, partes de plantas, sus extractos y semillas; es adecuado para obtener nanopartículas metálicas. Sin embargo dentro de la revisión bibliográfica no se encontró evidencia del uso de malezas para este propósito, como lo es la propuesta del uso del lirio acuático (*eichhornia crassipes*); lo cual abre la posibilidad de utilizar este tipo de materia orgánica como agente reductor, evitando comprometer aquella que tenga uso para consumo humano o del ganado.

En cuanto a los equipos y dispositivos utilizados en el proceso de síntesis, se encontró que aquellos que intervienen en algún paso de método, realizan operaciones específicas, aisladas y no tienen interacción directa con algún otro dentro del proceso. Lo cual indica la no existencia de un sistema o máquina que integre de manera secuencial a todos o casi todos los equipos necesarios para realizar de forma semi o automática un proceso de síntesis de nanopartículas metálicas por biorreducción. El desarrollo de esta maquinaria permitiría un mayor control sobre los parámetros de la síntesis (pH, concentración de la materia reductora y sal metálica, temperatura de nucleación y de crecimiento) y por

consecuencia la síntesis de nanopartículas por diseño con tamaños y propiedades específicas para determinadas aplicaciones.

Tan importante como el método de síntesis y los medios para realizarlo, es la caracterización del producto final que se obtiene; mediante la cual se evalúa y valida tanto al método de síntesis propuesto o empleado, así como las características y propiedades físicas de las nanopartículas obtenidas. Diversas técnicas experimentales y teóricas (simulación numérico-computacional) son utilizadas para la caracterización; siendo cuatro principales para el caso de las experimentales, UV-vis, FTIR, XRD, TEM o HRTEM; las cuales determinan la presencia, el tamaño, la estructura, la forma y la composición de las nanopartículas; validando así el proceso utilizado y proporcionando información de los efectos que tiene la manipulación de los parámetros de síntesis sobre el producto final. De forma paralela, la caracterización mediante simulación numérico-computacional permite validar el método de síntesis y de caracterización empleados; mediante la construcción, simulación y análisis de modelos atomísticos, basados principalmente en cálculo de primeros principios *ab-initio* y la teoría de funcionales de densidad (DFT), que proporcionan datos teóricos como referencia para comparar con los experimentales o para proponer de inicio parámetros para síntesis por diseño de un material específico; cuyas propiedades mecánicas, estructurales, electrónicas y ópticas pueden ser calculadas antes de la síntesis o para evaluar las correspondientes a un producto final ya sintetizado.

Por lo anterior, es viable la síntesis de nanopartículas mediante biorreducción, ya que es un método probado y validado; sin embargo no existe equipo de laboratorio o comercial especializado que realice en conjunto este proceso; lo cual potencia el desarrollo tecnológico en esta área para lograr la producción de materiales nanoestructurados por este método a escalas comparables con lo métodos físicos y químicos.

CAPÍTULO 3

FUNDAMENTACIÓN TEÓRICA

Con base en la revisión del estado del arte, presentada en capítulo 2, se desarrollaron en el presente capítulo los temas correspondientes a los fundamentos teóricos base para el desarrollo de la investigación.

Los temas considerados abarcan tanto las definiciones y los conceptos básicos requeridos para el entendimiento del proceso de síntesis por biorreducción para la obtención de nanopartículas metálicas; así como las teorías y modelos utilizados para la descripción, el desarrollo y análisis de dicho proceso de síntesis.

El capítulo comienza con el tema 3.1, concerniente al mecanismo de formación de nanopartículas mediante un proceso de síntesis biológico (química verde) utilizando plantas o partes de plantas, esto por motivo que la materia prima que se utiliza como agente reductor en el proceso de síntesis es biomasa extraída de la planta conocida como lirio acuático (*Eichhornia crassipes*). Como consecuencia lógica el tema 3.2 corresponde a la descripción de la forma y medios por los cuales el lirio acuático, al ser usado como agente reductor, lleva a cabo el proceso de síntesis. Por lo anterior, en el tema 3.3 se presenta un método generalizado de síntesis por biorreducción utilizando como agente reductor, plantas, partes de plantas y/o extractos de estas, además de mencionar los metales considerados para el proceso de síntesis base de la investigación

En igual nivel de importancia que el proceso de síntesis, se encuentra el producto final que se obtiene de este. Tal como fue mencionado en la revisión del estado del arte, las condiciones y parámetros manipulados durante el proceso de síntesis determinan las características del producto final obtenido (nanopartículas); por lo cual es necesario establecer esta relación. Dado que la complejidad de reproducir "n" veces un proceso y caracterizar los productos obtenidos es considerable, para establecer la relación proceso-producto se puede hacer uso de herramientas y simuladores computacionales como apoyo para ello, lo cual se muestra en el tema 3.4. La citada relación proceso-producto, se puede cuantificar mediante el análisis de las propiedades fisicoquímicas de las nanopartículas obtenidas, pero no todas las propiedades presentes son evaluadas; por ello en el tema 3.5 se hace mención de las propiedades de interés a evaluar, las cuales además de cuantificar la relación citada, permitan establecer los parámetros para realizar síntesis por diseño de nanopartículas metálicas para aplicaciones específicas.

Finalmente, como medio para lograr la convergencia del proceso de síntesis y la relación proceso-producto con el objetivo de realizar síntesis por diseño de nanopartículas metálicas, se planteó la automatización del proceso de síntesis por biorreducción; motivo por el cual, en el tema 3.6 se presenta la información correspondiente a la automatización de procesos.

3.1. MECANISMO DE FORMACIÓN DE LAS NANOPARTÍCULAS

El mecanismo hipotético propuesto detrás de la síntesis de nanopartículas metálicas es una reacción enzimática (Prasad, 2014).

Las enzimas son moléculas de naturaleza proteínica estructural que catalizan reacciones químicas, siempre que sean termodinámicamente posibles. Una enzima hace que una reacción química que es energéticamente posible, pero que transcurre a una velocidad baja, sea cinéticamente favorable; es decir que transcurra a mayor velocidad que sin la presencia de la enzima. *En estas reacciones las enzimas actúan sobre unas moléculas denominadas sustratos, las cuales se convierten en moléculas diferentes denominadas productos.*

Las enzimas funcionan disminuyendo la energía de activación ($\Delta G^\ddagger$) de una reacción, de forma que se acelera sustancialmente la tasa de reacción. Las enzimas no alteran el balance energético de las reacciones en que intervienen, ni modifican por lo tanto el equilibrio de la reacción, pero consiguen acelerar el proceso incluso millones de veces. Una reacción que se produce bajo el control de una enzima, o de un catalizador, en general alcanza el equilibrio mucho más rápido que la correspondiente reacción no catalizada (Enzimas, s.f).

El mecanismo de síntesis de nanopartículas usando plantas y extractos de plantas incluye tres fases principales:

1. *La fase de activación*, durante la cual la reducción de los iones metálicos y la nucleación de los átomos del metal reducido ocurren.
2. *La fase de crecimiento*, durante el cual las pequeñas nanopartículas adyacentes se unen espontáneamente en partículas de un tamaño más grande (formación directa de nanopartículas por medio de nucleación y crecimiento heterogéneo, y la reducción de iones de otro metal, un proceso conocido como maduración de Ostwald), que se acompaña de un aumento de la estabilidad termodinámica de las nanopartículas.
3. *La fase de terminación del proceso*, la cual determina la forma final de las nanopartículas.

El proceso de formación de las nanopartículas se muestra esquemáticamente en la figura 3.1.

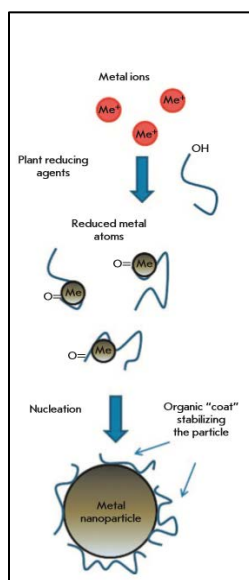


Figura 3.1. Representación esquemática de la síntesis de nanopartículas mediante plantas o extractos de plantas (Makarov, 2014).

En la fase de terminación, las nanopartículas adquieren la conformación energéticamente más favorable, este proceso está fuertemente influenciado por la capacidad de una planta o extracto de la planta para estabilizar las nanopartículas metálicas (Makarov, 2014).

Es de considerarse, para la síntesis de nanopartículas metálicas, que debido a la limitada capacidad de las plantas para reducir los iones metálicos, la eficiencia de la síntesis de nanopartículas de metal también depende del potencial

electroquímico de un ion. Por lo tanto, la capacidad para reducir eficazmente iones metálicos puede ser significativamente mayor en el caso de los iones que tienen un gran potencial electroquímico positivo (por ejemplo, Ag^+) que en el caso de iones con un potencial electroquímico baja tal como $([\text{Ag} (\text{S}_2\text{O}_3)_2]^{3-})$. El potencial de reducción dentro de las plantas superiores es de alrededor de 0 V (con respecto al electrodo de hidrógeno estándar) y, consecuentemente, **sólo sales de los metales preciosos y semiprecios se puede convertir en nanopartículas** (Haverkamp y Marshall, 2009).

Para la síntesis de nanopartículas de metales de interés como la plata (Ag) y el oro (Au), los mecanismos de biorreducción propuestos para iones positivos de estos metales, se llevan a cabo mediante las reacciones siguientes:

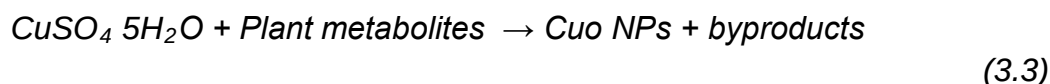
Plata: la reacción bioquímica de AgNO_3 con la solución acuosa de la planta conduce a la formación de AgNPs mediante la reacción siguiente (Tripathy, 2010).



Oro: la reacción propuesta para la reducción de iones positivos de oro (Au^+) a nanopartículas de Au^0 , en presencia de metabolitos y enzimas presentes en las plantas y extractos, es como se muestra (Thakkar, 2010):



Cobre: las nanopartículas de cobre son sintetizadas mediante plantas y sus extractos y el mecanismo de reacción fue propuesto por Ramanathan et al (2013).



De forma tal que la reacción de biorreducción para la obtención de nanopartículas metálicas, utilizando plantas y sus extractos, puede ser generalizada como se muestra en la ecuación (3.4):



3.2 ENZIMAS PRESENTES EN EL LIRIO ACUATICO

El lirio acuático (*Eichhornia crassipes*), figura 3.2, es bien conocido como una maleza nociva, de rápido crecimiento y prácticamente indestructible. Sin embargo, a causa de la alta concentración de taninos en la planta, esta ha sido reconocida como un excelente herramienta para retirar metales pesados del agua (Rosano-Ortega, 2007). Por otra parte, esta alta concentración de taninos hace de esta

planta potencial materia prima para la obtención de biomasa, material utilizado como agente reductor en procesos de síntesis de nanopartículas (Rosano-Ortega, 2006).



Figura 3.2. Lirio acuático (*Eichhornia crassipes*).

Un análisis más detallado del lirio acuático, revela que está compuesto de tres polisacáridos mayoritarios:

- Lignina
- Celulosa
- Hemicelulosa

El contenido de lignina, material difícil de degradar, es menor al 10 %; lo cual hace interesante el aprovechamiento de celulosas y hemicelulosas para otras aplicaciones en la ingeniería (UAM, 2014).

Además, la capacidad reductora de los disacáridos y polisacáridos depende de la capacidad de cualquiera de sus componentes monosacáridos individuales para adoptar una forma de cadena abierta dentro de un oligómero y, por lo tanto, para proporcionar un acceso (de un ion de metal) a un grupo aldehído, características presentes en el lirio acuático.

3.3. PROCEDIMIENTO PARA LA OBTENCIÓN DE NANOPARTÍCULAS MEDIANTE EL MÉTODO DE SÍNTESIS POR BIORREDUCCIÓN.

La síntesis biológica de nanopartículas, utilizando plantas como fuente, ofrece diversas ventajas tales como ser el mejor método en costo-beneficio, no tóxico, y eco amigable, además de eliminar el proceso de mantener vivo un cultivo como en el caso de los métodos biológicos que utilizan bacterias y virus. Por lo tanto, los procesos de biosíntesis de nanopartículas, podrían ser más utilizados, si las nanopartículas son producidas extracelularmente utilizando plantas o sus extractos

en una manera controlada acorde a su tamaño, forma y dispersidad (Sermakkani, 2012).

El protocolo para la síntesis de nanopartículas involucra (Ahmed, 2015):

- La colecta de la parte de la planta de interés, de los sitios habilitados para tal efecto, lavado de esta de 2 a 3 veces con agua para eliminar residuos no pertenecientes a la planta; seguido por lavado con agua destilada esterilizada para eliminar cualquier impureza.
- Limpia y fresca la planta, se coloca en sombra para su secado por 10 - 15 días, o en su caso deshidratarla mediante secado por medio de un horno a una temperatura aproximada de 80 ° C.
- Moler la planta seca (deshidratada) utilizando una licuadora doméstica o molino hasta obtener polvo fino.
- Si es el caso de síntesis con polvo finos (biomasa) utilizar directamente en el proceso de síntesis inducida.
- Para el caso de síntesis utilizando extracto de la planta. Se ponen en ebullición 10 g de polvo seco mezclados en 100 mL de agua destilada deionizada. La infusión resultante es entonces filtrada hasta que el material insoluble no aparece en la solución.
- Adicionar la sal metálica, del material a sintetizar, en solución a concentraciones bajas 1×10^{-3} M (o menores dependiendo del producto final a obtener) a unos cuantos mL de la solución del extracto o de biomasa (previamente preparada en solución).
- Esperar la reducción de los iones metálicos a su estado basal, lo cual se puede monitorear por espectroscopia UV-vis a intervalos de tiempo constantes.
- Si se utilizó polvo fino como biomasa, separar la parte insoluble de la solución mediante métodos físicos para obtener el producto final de la síntesis. En el caso de los extractos no es requerido.
- Caracterizar el producto final de la síntesis para determinar el tamaño, estructura y forma de las nanopartículas producto de la síntesis.

En la figura 3.3, se muestra de forma gráfica el protocolo generalizado de síntesis biológica para la obtención de nanopartículas metálicas, utilizando como fuente (agente reductor) plantas y sus extractos.

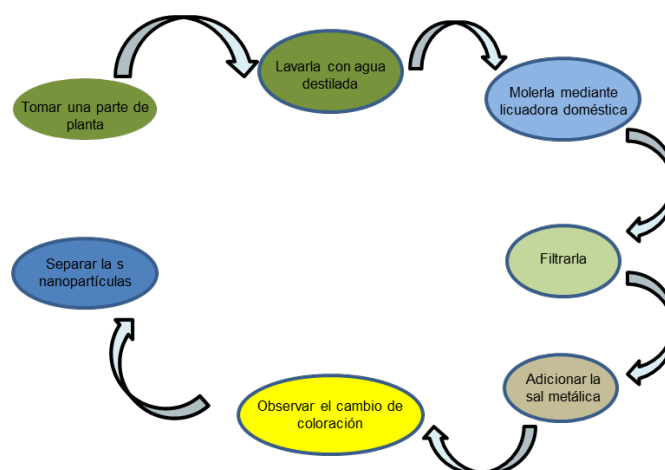


Figura 3. 3. Protocolo para síntesis de nanopartículas metálicas utilizando plantas y sus extractos (Ahmed, 2015).

En el procedimiento de síntesis por biorreducción, mostrado en la figura 3.3, se muestra en el quinto paso de la secuencia la adición de la sal del metal (solución acuosa) a reducir. En el ejemplo citado por el autor Ahmed (2015), el nitrato de plata (AgNO_3) es utilizado; sin embargo para una consideración general, en este paso se coloca la sal del metal a reducir. Siendo para el caso de esta investigación, los casos de estudio, las sales metálicas mostradas en la tabla 3.1.

Tabla 3.1. Sales metálicas propuestas para la obtención de NPs.

Metal	Sal metálica	Nanopartícula
Plata (Ag)	Nitrato de plata (Ag^+NO_3^-)	Ag^0
Oro (Au)	Ácido aurico ($\text{HAu}^+\text{Cl}_4\text{ 4H}_2\text{O}$) o (HAu^+Cl_4)	Au^0
Cromo (Cr)	Dicromato de potasio ($\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$)	Cr^0
Cobalto (Co)	Cloruro de cobalto hidratado ($\text{CoCl}_2\cdot 6\text{H}_2\text{O}$)	Co^0

3.4. LA SIMULACIÓN ATOMÍSTICA APLICADA AL ANÁLISIS Y DESARROLLO DE MATERIALES

Existen diversas formas para realizar simulaciones atomísticas, dos de las aproximaciones más utilizadas para modelar átomos y sus interacciones son: *i)* uso de representaciones empíricas y *ii)* aproximaciones *ab-initio* de mecánica cuántica.

Tal como se indica en el estado del arte, el uso de aproximaciones *ab-initio* de mecánica cuántica, con la implementación específica de los cálculos basada en la Teoría de Funcionales de Densidad (DFT); se ha utilizado en muchos campos de

las ciencias físicas, pero ninguna con tanto éxito como en el estado sólido. Desde sus orígenes en la física de la materia condensada, se ha expandido en la ciencia de materiales, la física de alta presión y la mineralogía, la química de estado sólido y más; impulsando enteras subdisciplinas (Hasnip, 2014). Considerándose por tanto, como una de las aproximaciones computacionales que proporciona mejores resultados para el cálculo, análisis de propiedades y diseño de materiales.

3.4.1. IMPLEMENTACION DE SIMULACIONES ATOMISTICAS UTILIZANDO DFT

En el caso de la implementación de simulaciones atomísticas, utilizando DFT y primeros principios, se implica ejecución de dinámica molecular en un sistema de núcleos, sin conocimiento previo de la mecánica cuántica del potencial de energía superficial; es decir, éste es calculado “sobre la marcha”.

La teoría de funcionales de densidad (DFT), es un método de mecánica cuántica usado para investigar la estructura electrónica de muchos cuerpos-sistemas, en particular moléculas (López, 2014).

Para el caso de modelado de sistemas atómicos grandes, los procedimientos basados en mecánica cuántica, son todavía limitados a escalas de tiempo y longitud muy pequeñas, del orden de unos pocos nanómetros y picosegundos Buehler (2005); su implementación es restrictiva por la gran cantidad de cálculos a realizar y el tiempo empleado para la simulación. Una forma de desarrollar esto, es mediante un método alternativo, en el cual las funciones de onda que describen los parámetros sean tratados como variables dinámicas, tal que, la dinámica clásica pueda ser aplicada simultáneamente a los parámetros de la función de onda y las coordenadas de los núcleos. Esta formulación hecha por Car y Parrinelo (1985), está formulada en el marco de la teoría de funcionales de densidad (DFT) con un conjunto basado en ondas planas.

Por lo anterior, La DFT es uno de los métodos ampliamente utilizados para obtener las propiedades de un sistema de estado sólido, la cual modela la energía de un sistema como un funcional de la densidad, donde el mínimo valor del funcional es la energía del estado base del sistema. Este le hace parte de los métodos de primeros principios, donde los resultados dependen de los parámetros estructurales de entrada (Córdoba, 2012) y para el cálculo de las propiedades en estado fundamental de sistemas intermetálicos, las energías son calculadas para diferentes volúmenes, siendo esto un proceso de optimización (Acharya, 2013).

El proceso para la implementación se describe como sigue (Córdoba, 2012; Acharya, 2013).

- Como punto de partida se optimiza la geometría del sistema cristalino, para obtener las características de estructura en equilibrio, optimizando primero el parámetro de estructura.
- Se propone una configuración como estructura inicial para la optimización mediante cálculos de DFT (Yokoyama, 2014); los datos experimentales de estructuras cristalinas pueden ser tomados como entrada inicial para la optimización de la estructura cristalina y el cálculo de las propiedades elásticas, electrónicas y ópticas (Brik, 2010).
- Enseguida se realiza el cálculo de la energía total como función del volumen $E(V)$ de la celda primitiva (Nama, 2012), (Li, 2014), (Devi, 2015). La ecuación de estado de Birch-Murnaghan puede ser utilizada para determinar las propiedades del estado fundamental como las constante de red (a_0), el módulo volumétrico (B), entre otras (Devi, 2015).

$$E(V) = E_o + \frac{B_o V}{B'_o} \left[\left(\frac{V_o}{V} \right)^{B'_o} \frac{B'_o}{B'_o - 1} + 1 \right] - \frac{B_o V_o}{B'_o - 1} \quad (3.5)$$

$$B_o = \frac{1970 - 200I}{d^{3.5}} \quad (3.6)$$

$$P(V) = \frac{B_o}{B'_o} \left[\left(\frac{V}{V_o} \right)^{B'_o} - 1 \right] \quad (3.7)$$

Donde V_o y B_o , son el volumen y el módulo de sólido volumétrico de la celda unitaria a condiciones estándar, B'_o es la derivada del módulo volumétrico y V es el volumen a cualquier presión. El módulo de sólido volumétrico se puede calcular de la relación empírica de Cohen, donde I es el factor de ionicidad, el cual es igual a 0,1 y 2 para los grupos IV, III-V y II-V, d es la distancia interatómica.

Durante el proceso de optimización, se evalúa la variación de la energía como una función de la energía para determinar la configuración de mínima energía o de estado fundamental; con la cual se realizan los cálculos de DFT para determinar las propiedades elásticas, electrónicas, ópticas, etc. del sistema que se esté analizando.

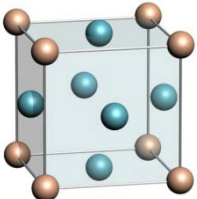
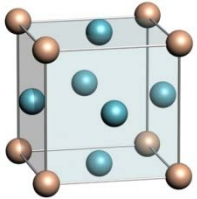
La optimización de la geometría con esta formulación, está implementada en el módulo *CASTEP* del software comercial *Material Studio*. Con lo cual, se permite redefinir una geometría 3D de un sistema periódico para obtener una estructura estable. Lo anterior se desarrolla mediante un proceso iterativo en el cual las coordenadas de los átomos y posiblemente los parámetros de celda, son ajustados tal que la energía total de la estructura es minimizada. La optimización de la geometría se basa en reducir la magnitud de las fuerzas calculadas a un valor menor que los valores de convergencia definidos. También es posible establecer un valor inicial de esfuerzo para modelar el comportamiento del sistema bajo tensión, compresión, corte, etc. En este caso el tensor de esfuerzos es iterado hasta que llega a ser igual al valor externo especificado (Accelrys Inc., 2008).

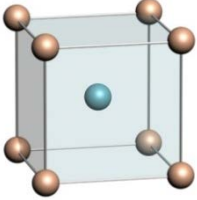
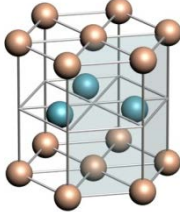
3.5. PROPIEDADES DE INTERÉS

Muchas de las propiedades de los sólidos vienen determinadas por la periodicidad de su correspondiente unidad estructural. De aquí que sea procedente el estudio de la red cristalina, aun cuando solo se haga de forma concisa.

En función de lo anterior, la estructura cristalina para la plata (Ag), el oro (Au), el cromo (Cr) y el cobalto (Co), metales considerados para esta investigación, se presenta en la tabla 3.2.

Tabla 3.2. Estructura cristalina básica para metales (Universidad de Sevilla, 2015).

Metal	Estructura	Abreviación
Plata (Ag)		fcc (cúbica de cara centrada)
Oro (Au)		fcc (cúbica de cara centrada)

Cromo (Cr)		bcc (cúbica centrada en el cuerpo)
Cobalto (Co)		hcp (hexagonal compactada)

En la red cristalina o periódica se puede especificar una célula o celda unidad, segunda columna de la figura 3.2, que se repite en todo el cristal. La celda unidad contiene información acerca de la posición de los átomos o iones del sólido y, consecuentemente, se utiliza para describir la estructura del cristal. Las posiciones que ocupan los átomos o iones se llaman puntos o nodos de la red cristalina (Rosado, 1987).

Antes de iniciar con cálculos de propiedades elásticas, electrónicas y ópticas, de un sistema cristalino, se debe optimizar los parámetros estructurales, incluyendo parámetros de red y las coordenadas internas (Bouhemadou, 2014). Esto en concordancia con la implementación y desarrollo de simulaciones atomísticas, expuesta en la sección 3.4.

3.5.1. PROPIEDADES MECÁNICAS

Se sabe que el conocimiento de las propiedades elásticas de materiales es importante debido a sus estrechas relaciones con varias propiedades físicas fundamentales. En particular, proporcionan información sobre la estabilidad y la rigidez de los materiales contra tensiones aplicadas externamente (Bouhemadou, 2014; Li, 2014).

Las nanopartículas muestran diferentes propiedades mecánicas en relación con las micropartículas y los materiales sólidos volumétricos, proporcionando opciones más eficaces para la modificación en la resistencia mecánica de la superficie de cualquier dispositivo, o para mejorar la calidad de la nanofabricación /nanomanufactura, etc. Las aplicaciones exitosas en estos campos por lo general necesitan una profunda comprensión de los conceptos básicos de las propiedades mecánicas de las nanopartículas, tales como la dureza y el módulo de elasticidad, la adhesión interfacial y la fricción, la ley de movimiento, así como sus efectos dependientes del tamaño (Guo, 2014).

Por otro parte, trabajando en el nivel atómico y de la estructura cristalina de la nanopartícula, las propiedades mecánicas pueden ser determinadas mediante el cálculo de las constantes elásticas utilizando métodos numérico-computacionales. Éste cálculo es necesario para saber cómo mejorar las propiedades mecánicas de los materiales y se tienen que investigar las constantes elásticas a presión cero para entender las propiedades mecánicas (Dang, 2014).

Después de realizar un proceso de optimización de la geometría, el cual se describe en la sección 3.4, se determinan las constantes elásticas de un cristal simple a partir de un ajuste lineal de la función de tensión-deformación calculada de acuerdo con la ley de Hooke (Wang, 2004).

$$\sigma = C_{ij}\varepsilon_{ij} \quad (3.8)$$

Y expresada en forma matricial, ecuación (3.9).

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{xy} \\ \sigma_{xz} \\ \sigma_{yz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{xxxx} & C_{xxyy} & C_{xxzz} & C_{xxxy} & C_{xxxz} & C_{xxyz} \\ C_{yyxx} & C_{yyyy} & C_{yyzz} & C_{yyxy} & C_{yyxz} & C_{yyyz} \\ C_{zxxx} & C_{zzyy} & C_{zzzz} & C_{zxyx} & C_{zxzx} & C_{zzyz} \\ C_{xyxx} & C_{xyyy} & C_{xyzz} & C_{xyxy} & C_{xyxz} & C_{xyyz} \\ C_{xzxz} & C_{xzzy} & C_{xzzz} & C_{xzxxy} & C_{xzxz} & C_{xzyz} \\ C_{yzxx} & C_{yzzy} & C_{yzzz} & C_{yzxy} & C_{yzxz} & C_{yzyz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ \varepsilon_{xy} \\ \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yz} \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

Donde C_{ij} son las constantes elásticas del material y describen su respuesta a un esfuerzo aplicado, o por el contrario, el esfuerzo requerido para mantener una deformación dada. Ambos, esfuerzo y deformación, tienen tres componentes de esfuerzo y tres componentes de deformación, dando seis componentes en total. Las constantes elásticas lineales forman una matriz simétrica de 6X6, teniendo 27 diferentes componentes.

Las restricciones sobre las constantes elásticas a condiciones de esfuerzo nulo, necesarias para lograr la estabilidad mecánica de las estructuras cúbica y hexagonal, de acuerdo a la ecuación 3.8 son (Wu, 2007):

- Existen 5 constantes elásticas independientes para los cristales de tipo hexagonal, C_{11} , C_{12} , C_{13} , C_{33} , and C_{44} . Para calcular C_{66} , se usa la formula $C_{66} = (C_{11} - C_{12})/2$.
- Existen 3 constantes elásticas independientes para los cristales de tipo cúbico, C_{11} , C_{44} C_{12} .

Entonces, los criterios de estabilidad mecánica a cubrir para ambos tipos de estructuras resultan:

- Para estructura hexagonal

$$\begin{aligned} C_{11}>0; C_{33}>0; C_{44}>0; C_{66}>0; (C_{11}-C_{12})>0; \\ (C_{11}+C_{33}-2C_{13})>0; [2(C_{11}+C_{12})+C_{33}+4C_{13}]>0 \end{aligned} \quad (3.10)$$

- Para estructura cúbica

$$C_{11}>0; C_{44}>0; C_{11}>|C_{12}|; [C_{11}+2C_{12}]>0 \quad (3.11)$$

Si los criterios de estabilidad se cumplen, es decir las estructuras son mecánicamente estables, el módulo de volumétrico (B), el módulo de corte (G), el módulo de Young (E), y la relación de Poisson (ν) para materiales policristalinos puede obtenerse a partir de las constantes elásticas independientes de un solo cristal, mediante el uso del esquema promediado de Voigt-Reuss-Hill (Dang, 2014). El cuál es el considerado como la mejor aproximación para el cálculo teórico del módulo elástico.

De acuerdo a la aproximación de Voigt y Reuss, el módulo de corte de Voigt (G_V) y de Reuss (G_R), en los sistemas cúbico y hexagonal está dado por las ecuaciones 3.12 y 3.13 respectivamente.

$$B = \frac{1}{2}(B_V + B_R) \quad (3.12)$$

$$G = \frac{1}{2}(G_V + G_R) \quad (3.13)$$

Donde para la fase hexagonal (C_{11} , C_{33} , C_{44} , C_{12} y C_{13}):

$$\begin{aligned} B_V &= (1/9)[2(C_{11}+C_{12})+C_{33}+4C_{13}], B_R = C_2/M. \\ C_2 &= (C_{11}+C_{12})C_{33} - 2C_{13}^2 \\ G_V &= (1/30)(M+3C_{11} - 3C_{12}+12C_{44}+6C_{66}). \\ M &= C_{11}+C_{12}+2C_{33} - 4C_{13} \\ G_R &= 15[(18B_V/C^2)+[6/(C_{11}-C_{12})]+(6/C_{44})+(3/C_{66})]^{-1} \end{aligned} \quad (3.14)$$

Para la fase cúbica (C_{11} , C_{44} y C_{12})

$$\begin{aligned} B_V &= B_R = (C_{11}+2C_{12})/3, G_V = (C_{11}-C_{12}+3C_{44})/5. \\ G_R &= 5(C_{11}-C_{12})C_{44}/[4C_{44}+3(C_{11}-C_{12})] \end{aligned} \quad (3.15)$$

El módulo de elasticidad (E) y la relación de Poisson (ν), pueden ser calculados utilizando el módulo de corte y volumétrico de Hill (G y B), dados en las ecuaciones 3.12 y 3.13.

$$E = \frac{9GB}{3B+G} \quad (3.16)$$

$$\nu = \frac{3B-2G}{2(3B+G)} \quad (3.17)$$

La comprensión de algunas propiedades mecánicas básicas de nanopartículas, tales como la dureza y el módulo elástico, ayuda mucho en el diseño adecuado de partículas en aplicaciones específicas, así como para evaluar sus roles y mecanismos de acción. La dureza de un material juega un rol importante en sus aplicaciones, especialmente cuando se usa en su fase de resistencia a la abrasión. De acuerdo a la teoría de Simunek para el cálculo de la dureza de un cristal, ésta se calcula con la ecuación 3.18 (Li, 2011).

$$H = \frac{C}{\Omega} n \left[\prod_{i,j=1}^n b_{ij} s_{ij} \right]^{1/n} e^{-\sigma f_e}$$

$$f_e = 1 - \left[\frac{k(\prod_{i=1}^k e_i)^{1/k}}{\sum_{i=1}^k e_i} \right]^2$$

$$s_{ij} = \frac{\sqrt{e_i e_j}}{n_i n_j d_{ij}} \quad (3.18)$$

donde n_i y n_j son números de coordinación de los átomos i y j , respectivamente; d_{ij} es la distancia interatómica de los átomos i y j ; la energía de referencia $e_i = Z_i / R_i$, la cual representa el potencial del átomo individual i para atraer la carga de valencia del cristal; Z_i es el número de valencia electrón del átomo i , y R_i es el radio iónico del átomo publicado en las tablas de Pearson (1972); k corresponde al número de átomos diferentes en el sistema; s_{ij} es la fuerza del enlace individual entre los átomos i y j ; b_{ij} es el número de enlaces interatómicos entre los átomos i y j en la celda unitaria; Ω es el volumen de la celda; La constante semiempírica C es igual a 1,450 acoplando los valores calculados y experimentales; $e^{-\sigma f_e}$ (varía de 0 a 1) modifica el efecto de la diferencia entre las energías de referencia (e_i , e_j), y es igual a 2,8.

3.5.2. PROPIEDADES ELÉCTRICAS/ELECTRÓNICAS

Muchas de estas propiedades especiales se basan en efectos de confinamiento cuántico en escala nanométrica.

Para el caso particular de esta investigación, se considera a la conductividad térmica y eléctrica como las propiedades de interés.

Confinamiento cuántico

En una pieza de metal a escala macroscópica, los electrones de valencia de los átomos participantes ocupan bandas de energía en lugar de niveles discretos, como se sabe de los átomos y las moléculas. En un experimento (hipotético) de reducción continua de dimensiones de un metal, en 3D con su comportamiento a nivel macroscópico hasta 0D como un punto cuántico, situación en la cual los electrones remanentes están restringidos de tal forma que comienzan a ocupar niveles de energía discretos. Una partícula de tal tamaño ya no sigue las leyes de la física clásica y tiene que ser descrita por las reglas de la mecánica cuántica utilizadas para describir átomos. Esto porque tales piezas de materia son llamados puntos cuánticos.

Los pequeños trozos de metal que siguen estas condiciones deben exhibir propiedades físicas y químicas muy diferentes comparadas con cada uno de sus correspondientes metales a nivel macroscópico.

Una explicación básica de esto es la siguiente: las propiedades de un material dependen del tipo de movimiento que sus electrones pueden ejecutar, lo cual depende del espacio disponible para ellos. Si el tamaño físico del material se reduce a tamaño nanométrico, sus propiedades cambian de manera impredecible, llegando a ser sensibles a su tamaño, su forma y su estructura electrónica (Sun, 2002).

Estructura de bandas

Las interacciones cuánticas que tiene lugar en los sólidos determinan la energía potencial y el momento de sus electrones. Y puede decirse que la estructura de bandas de energía viene determinada por la relación que existe entre la energía y el momento de los portadores en el cristal.

Así mismo, los niveles de energía de un átomo interactúan con los de los otros átomos y cada nivel se desdobra en tantos niveles como átomos haya. Para una distancia interatómica suficientemente grande, los niveles de energía quedan confundidos en bandas de energía. El modelo sencillo de bandas de energía se muestra en la figura 3.4.

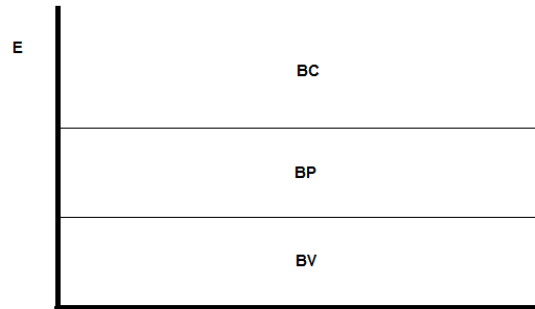


Figura 3.4. Modelo sencillo de bandas de energía (Fuente: elaboración propia).

En la figura 3.4, BC corresponde a la banda de conducción, BP a la banda prohibida y BV a la banda de valencia. En esta configuración del modelo de bandas se tienen el mismo número de electrones en la banda de valencia que de huecos en la banda de conducción, correspondientes a los átomos que forman la estructura cristalina del sólido tratado. Los valores de energía de BC, BP y BV se expresan en electrón voltios (eV).

A la vista del modelo de bandas de energía, mostrado en la figura 3.4, es posible distinguir a los sólidos en aislantes, semiconductores y metales, cuya representación mediante el modelo sencillo de bandas de energía se presenta en la figura 3.5.

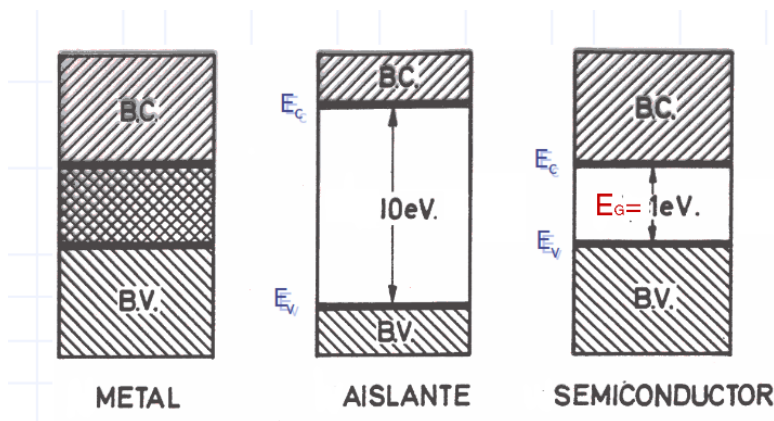


Figura 3.5. Modelos sencillos de bandas de energía: (a) de un metal, (b) de un aislante, y (c) de un semiconductor (Rosado, 1987).

El intervalo que separa BC y BV es la banda prohibida y su anchura E_g , expresa en eV, es el parámetro que determina el comportamiento del sólido como **aislante**, **semiconductor o metal**, ver figura 3.5.

En el caso de los **metales**, la gran concentración de átomos que existen en el sólido da origen a un desdoblamiento de los niveles de energía, donde se

superponen las bandas de valencia y de conducción, figura 3.5 (a). Por ello, se tendrá conducción cuando se aplique un campo eléctrico, incluso a 0°K. La conducción se debe a que los electrones siempre pueden encontrar estados sin ocupar en un movimiento a través de la red (Rosado, 1987).

Si el ancho de la banda prohibida es suficientemente grande, figura 3.5(b), ningún electrón de la banda de valencia puede adquirir la energía necesaria térmicamente, para pasar a la banda de conducción; el cuerpo tiene una alta resistividad y se le denomina **aislante**.

El cuerpo es un **semiconductor**, cuando E_g es suficientemente pequeño, figura 3.5(c), y, considerando condiciones análogas a las anteriores, existe una probabilidad de estadística apreciable de que los electrones, que ocupan estados altos de energía en la banda de valencia, adquieran la energía necesaria para efectuar el salto energético E_g hasta llegar a ocupar estados energéticos en el fondo de la banda de conducción, que está vacía.

Con el fin de comprender el origen de la estructura de bandas y sus importantes características de los materiales, se deben tener en cuenta las contribuciones relativas de cada especie de átomo a la densidad de estados electrónicos (DOS) (.Bouhemadou, 2014).

Densidad de estados

La DOS es una cantidad fundamental que contiene toda la información del sistema, en consecuencia se pueden calcular promedios de cualquier cantidad física que se pueda expresar como función de la energía (Miranda, 2007).

La densidad de estados (DOS) se obtiene mediante la selección de los átomos más altos, en términos de energía, y la normalización de los datos respecto a estos átomos (Li, 2014).

La densidad de estados (DOS) es el número de estados electrónicos disponibles *por unidad de volumen por unidad de energía* alrededor de una energía E . En particular, la DOS electrónica se puede evaluar como (Singh, 1997):

$$\rho(E) = \frac{4\pi(2m)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \sqrt{E} \quad (3.19)$$

Dónde: m es la masa efectiva escalar, h es la constante de Plank y E es la energía del sistema.

En consecuencia la DOS en la banda de conducción viene dada por (Rosado, 1987):

$$\rho(E) = \frac{4\pi(2m_n)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \sqrt{E - E_c} \quad (3.20)$$

Y en la banda de valencia por:

$$\rho(E) = \frac{4\pi(2m_p)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \sqrt{E_v - E} \quad (3.21)$$

Dónde: m_n y m_p son, respectivamente, las masas efectivas de electrones y huecos y E_c y E_v , las energías presentes en las bandas de conducción y de valencia.

El concepto de densidad de estados es muy amplio, y sus propiedades físicas como absorción óptica y transporte están íntimamente ligadas y son dependientes de este concepto.

Energía de Fermi

El concepto de la *energía de Fermi* es de importancia crucial para la comprensión de las propiedades eléctricas y térmicas de los sólidos.

La *energía de Fermi*, representa la energía cinética más alta ocupada por los electrones a cero grados kelvin (Poole, 2003) y se calcula mediante la ecuación 3.22.

$$E_F = \frac{h^2}{8m_e} \left(\frac{3n}{\pi} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (3.22)$$

Por el principio de exclusión de Pauli, se sabe que los electrones llenarán todos los niveles de energías disponibles, y el tope de ese "mar de electrones" se llama *energía Fermi* o *nivel de Fermi*. Los electrones se distribuyen en niveles de energía de acuerdo con la distribución mostrada en la ecuación 3.23.

$$f_D(E, T) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} + 1} \quad (3.23)$$

Dónde: E – Energía

μ – Potencial químico

K_B – Constante de Boltzman

T – Temperatura

f_D – Es la probabilidad que un estado de energía E este ocupado por un electrón.

En la figura 3.6, se muestra de forma gráfica la distribución de Fermi-Dirac y el efecto de la temperatura sobre la ocupación de estados de energía por los electrones.

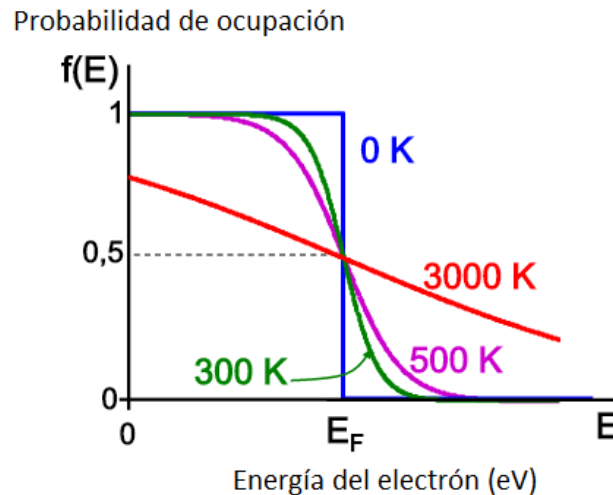


Figura 3.6. Distribución de Fermi-Dirac para varias temperaturas (Modificado de Universidad de Oviedo, s.f.).

De la figura 3.6, se observa que a temperatura $T = 0\text{ °K}$, la distribución toma los valores siguientes.

$$f_D(E) = \begin{cases} 0 & \text{para } E > E_F \\ 1 & \text{para } E < E_F \end{cases} \quad (3.24)$$

Lo cual indica que a muy bajas temperaturas ($T = 0\text{ °K}$) los electrones llenan las bandas de energía de los sólidos hasta el nivel de energía de Fermi (E_F) y las bandas están vacías para energías que exceden la E_F .

Con base en lo anterior, el "*Nivel de Fermi*" es el término utilizado para describir la parte superior del conjunto de niveles de energía de electrones a la temperatura de cero absoluto, también es conocido como el potencial químico de electrones. Este concepto es aplicado en la física del estado sólido para la descripción del comportamiento de sólidos como metales, aislantes o semiconductores.

La definición del *nivel de Fermi* en el metal es el nivel de energía más alto que puede ser llenado por los electrones. En un conductor (como es el caso de los metales conductores), la densidad de estados se puede considerar que comienzan en la parte inferior de la banda de valencia y la llena hasta el *nivel de Fermi*, figura 3.7(a), pero como las bandas de conducción y de valencia se superponen, el *nivel de Fermi* está en la banda de conducción, de modo que hay multitud de electrones disponibles para la conducción, figura 3.7(b).

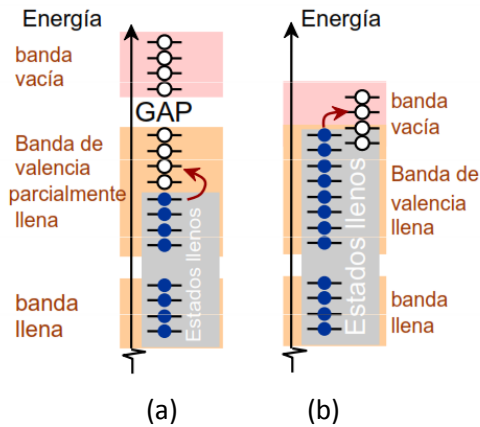


Figura 3.7. Comportamiento de un sólido como conductor en función de la E_F (Modificado de Olmo, s.f.)

Pero en semiconductor el *nivel de Fermi* se puede definir en cualquier posición de la banda prohibida, figura 3.8(a).

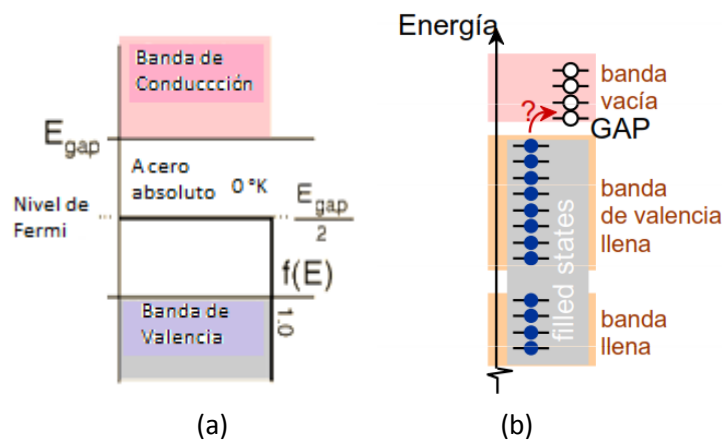


Figura 3.8. Contexto de nivel de Fermi para un semiconductor (Modificado de Olmo, s.f.).

Se observa en la figura 3.8 (b), que los niveles de energía más altos están separados por una brecha pequeña que generalmente es < 2 eV.

Finalmente, para el caso de simulaciones computacionales, el *nivel de Fermi* se considera como el máximo de la banda de valencia en CASTEP (Guo, 2014).

Propiedades ópticas

Los cálculos de propiedades ópticas para materiales sólidos, mediante DFT, utilizan para el cálculo la transición electrónica de estados (DOS).

Uno de los principales parámetros ópticos de un material es su **función dieléctrica compleja**, $\epsilon_1(\omega)$. Cuando se desarrollan cálculos de propiedades

ópticas es común evaluar la constante dieléctrica compleja y entonces expresar las otras propiedades en términos de esta.

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + j\varepsilon_2(\omega) \quad (3.25)$$

Lo anterior es porque ésta es la característica fundamental de la respuesta a una onda electromagnética (Bouhemadou, 2014).

La parte imaginaria $j\varepsilon_2(\omega)$, de la función dieléctrica, puede ser calculada de las bandas de la estructura electrónica, mediante calcular los elementos de la matriz de momentos entre las funciones de onda ocupados y no ocupados respetando las reglas de selección (Bouhemadou, 2014).

$$\text{Im}\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega) = \varepsilon_2^{\alpha\beta}(\omega) = \frac{4\pi e^2}{m^2 \omega^2} \sum \int \langle f | p^\alpha | i \rangle \langle i | p^\beta | f \rangle W_i (1 - W_f) \delta(E_f - E - \hbar\omega) d^3k \quad (3.26)$$

La parte real puede ser numéricamente calculada de $\varepsilon_2^{\alpha\beta}(\omega)$, utilizando la transformación de Kramers-Kronig.

$$\varepsilon_1^{\alpha\beta}(\omega) = \delta_{\alpha\beta} + \frac{2}{\pi} p \int_0^\infty \frac{\omega' \varepsilon_2^{\alpha\beta}(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (3.27)$$

Las otras constantes ópticas como el índice refractivo $n(\omega)$, el coeficiente de extinción $k(\omega)$, la refractividad $R(\omega)$, y la función de pérdida, pueden ser calculadas de la función dieléctrica $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + j\varepsilon_2(\omega)$ usando las siguientes relaciones:

$$n(\omega) = \left[\frac{\varepsilon_1(\omega)}{2} + \sqrt{\frac{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)}{2}} \right]^{1/2} \quad (3.28)$$

$$k(\omega) = \sqrt{\frac{|\varepsilon(\omega)| - \varepsilon_1(\omega)}{2}} \quad (3.29)$$

$$R(\omega) = \left| \frac{\sqrt{\varepsilon(\omega)} - 1}{\sqrt{\varepsilon(\omega)} + 1} \right|^2 \quad (3.30)$$

$$L(\omega) = \varepsilon_2(\omega) / [\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)] \quad (3.31)$$

En general, la diferencia entre la propagación de una onda electromagnética a través del vacío y de otro material, puede ser descrito por un **índice de refracción complejo**, N .

$$N = n + ik \quad (3.32)$$

En el vacío N es real, e igual a la unidad. Para materiales transparentes es puramente real, la parte imaginaria es relacionada al **coeficiente de absorción** por:

$$\eta = \frac{2k\omega}{c} \quad (3.33)$$

El coeficiente de absorción indica la fracción de energía perdida por la onda cuando esta pasa a través del material. Tal que la intensidad a la distancia x desde la superficie es:

$$I(x) = I(0)\exp(-2\pi\eta x) \quad (3.34)$$

donde $I(0)$, es la intensidad de la luz incidente.

Superficie de resonancia de plasmon (SPR)

La absorción de la luz en nanopartículas metálicas se origina a partir de un fenómeno interesante llamado superficie de resonancia de plasmones localizada. De acuerdo al modelo de Drude–Lorentz, los átomos en los metales existen en estado de plasma, teniendo un centro o núcleo cargado positivamente, rodeado por un grupo de electrones con carga negativa y por lo tanto llamado como “plasma de electrones”. En presencia de radiación electromagnética, el vector eléctrico desplaza los electrones libres y la atracción electrostática de Coulomb de los núcleos restaurará los electrones a la posición original. Como resultado de la naturaleza oscilante del campo eléctrico de la luz, la nube electrónica oscila coherentemente sobre la superficie con una frecuencia de resonancia ' ω_p '. Cuando la frecuencia de esta oscilación coincide con la de la radiación incidente, se establece una condición de resonancia que resulta en una intensa absorción, a menudo denominada como 'superficie de absorción de plasmón (SP)'.

Para un metal sólido volumétrico, con dimensión infinita en sus tres direcciones, la frecuencia de resonancia del plasma de electrones (ω_p) puede ser expresada como:

$$\omega_p = \left(\frac{Ne^2}{\epsilon_0 m_e} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.35)$$

donde N es la densidad numérica de los electrones, ϵ_0 es la permitividad del vacío, y e y m_e son la carga y la masa efectiva de los electrones, respectivamente. En función de la dimensionalidad de los materiales nanoestructurados, diferentes condiciones de contorno se pueden imponer en el plasma de electrones. En contraste con el metal sólido volumétrico, la nube de electrones en nanopartículas es confinado a un volumen finito, que es más pequeño que la longitud de onda de

la luz. Por lo tanto, la frecuencia de oscilación de las nanopartículas de metal se determina principalmente por cuatro parámetros: la densidad de número de electrones, la masa efectiva del electrón y el tamaño y la forma de la distribución de la carga. Esto permite la sintonía de las propiedades ópticas de las nanopartículas de metales nobles variando el tamaño, la forma y el medio ambiente dieléctrico (Thomas, 2009).

Los valores típicos de la superficie de resonancia de plasmón (SPR), para nanopartículas esféricas de plata (Ag), oro (Au), cromo (Cr) y cobalto (Co), se muestran en la tabla 3.3.

Tabla 3.3. Valores de la superficie de Resonancia de Plasmón (SPR) para las diferentes nanopartículas consideradas.

Metal	Sal metálica	NPs	Forma/Tamaño	SPR	Referencia
Plata (Ag)	Nitrato de plata ($Ag^+NO_3^-$)	Ag^0	Esférica/~20 nm Esférica/~18 nm	~425 nm ~420 nm	(Aki, 2012) (Aki, 2013)
Oro (Au)	Ácido aurico ($HAu^+Cl_4^- 4H_2O$) o ($HAu^+Cl_4^-$)	Au^0	Esférica/~20 nm	~530 nm	(Thomas, 2009)
Cromo (Cr)	Dicromato de potasio ($K_2Cr_2O_7$)	Cr^0	Esférica/50-78 nm ~32.9±13.2 nm	~310 nm ~460 nm	(Jaswal, 2014)
Cobalto (Co)	Cloruro de cobalto hidratado ($CoCl_2 \cdot 6H_2O$)	Co^0	Esférica/4-9 nm	~375 nm	(Naz, 2014)

Un corrimiento respecto a este valor de la SPR, indica un cambio en el tamaño de la nanopartícula, lo cual se atribuye al retardo electromagnético en nanopartículas más grandes (Thomas, 2009).

Una mayor definición del pico característico de la SPR, indica una mayor monodispersión del tamaño de las nanopartículas presentes en el medio que se analiza; en consecuencia y de forma inversa, un pico con poca definición indica una alta dispersión de tamaños (Aki, 2012).

3.6 ASPECTOS DE DISEÑO PARA EL DESARROLLO DE EQUIPOS APLICABLES AL MÉTODO DE SÍNTESIS POR BIORREDUCCIÓN.

Automatización de procesos

La Real Academia de las Ciencias Físicas y Exactas define la **automática** como el conjunto de métodos y procedimientos para la substitución del operario en tareas físicas y mentales previamente programadas. De esta definición original se desprende la definición de la **automatización** como la aplicación de la automática al control de procesos industriales.

Por **proceso**, se entiende aquella parte del sistema en que, a partir de la entrada de material, energía e información, se genera una transformación sujeta a perturbaciones del entorno, que da lugar a la salida de material en forma de producto (Ponsa, 2009).

Los procesos industriales se conocen como **procesos continuos, procesos discretos y procesos batch** (González, 2014).

- Los **procesos continuos** se caracterizan por la salida del proceso en forma de flujo continuo de material, como por ejemplo la purificación de agua o la generación de electricidad.
- Los **procesos discretos** contemplan la salida del proceso en forma de unidades o número finito de piezas, siendo el ejemplo más relevante la fabricación de automóviles.
- los **procesos batch** son aquellos en los que la salida del proceso se lleva a cabo en forma de cantidades o lotes de material, como por ejemplo la fabricación de productos farmacéuticos.

Con base en lo anterior, se entiende que **la automatización de los procesos** es la sustitución de tareas tradicionalmente manuales por las mismas realizadas de manera *automática* por máquinas, robots o cualquier otro tipo de automatismo.

De igual forma, se intuye que para realizar la automatización de algún proceso es necesario cubrir una serie de pasos o etapas, las cuales se describen en la siguiente sección.

Etapas para la automatización

Las etapas que se deben seguir para la instalación de un automatismo son (Ponsa, 2009):

1. **Análisis del proceso:** Se trata de estudiar el proceso completo y buscar puntos de mejora (preferiblemente en el cuello de botella).
2. **Busqueda de soluciones:** Hay que buscar elementos sustitutivos para la situación actual: robotica industrial, maquinaria, PLC's, diferentes tipos de automatismos.
3. **Estudiar los costes de la inversión:** Hay que ver cuál de las soluciones aporta un retorno de la inversión más rápido, la solución más amortizable, estudiar los costes de los posibles despidos. El beneficio económico y social debe ser mayor que el coste de operación y mantenimiento.
4. **Instalación:** Una vez elegida la solución hay que asegurar su correcta instalación y puesta a punto. Este proceso es delicado porque de él depende en gran medida un resultado óptimo del desarrollo.

5. **Formar al personal en la mejora:** Es posible que haya pequeñas reparaciones, rearmes, cambios de herramientas, etc que pueda realizar un operario. Para ello tendrá que estar formado en la tecnología implementada.
6. **Comprobación:** Una vez está el automatismo en marcha se debe comprobar que funciona como se desea.

Conjuntando la información de las etapas anteriores, se llega a la conclusión que: para configurar procesos automáticos modernos se necesitan tres componentes (Ebel, 2008):

- Sensores para captar los estados del sistema
- Actuadores para emitir los comandos de control
- Unidades de control para la ejecución del programa y para tomar decisiones

Ventajas de la automatización de procesos.

La automatización tiene ventajas muy evidentes en los procesos industriales (Ebel, 2008):

- Se mejora en costes, en servicio y en calidad
- El trabajo es más rápido y no necesita de una cantidad determinada de operarios, que antes eran necesarios
- Se producen menos problemas de calidad por realizarse el trabajo de una manera más uniforme debido a las especificaciones dadas al automatismo

Otras ventajas que se obtienen de la automatización son:

- El aumento de producción
- Menor gasto energético
- Mayor seguridad para los trabajadores.

Como cierre del presente capítulo, se puede enunciar que la información recopilada como fundamentación teórica, permitió el desarrollo de la investigación, así como el entendimiento, procesamiento, presentación y discusión de los resultados obtenidos.

CAPÍTULO 4

METODOLOGÍA

La síntesis y caracterización de materiales nanoestructurados ha ganado interés considerable en la década pasada, debido a posibles aplicaciones futuras en dispositivos nanoelectrónicos, almacenamiento de datos, miniaturizado de sensores químicos y biológicos, y síntesis de nanocompuestos para la mejora de sus propiedades (Chowdhury, 2012).

De especial interés, son los materiales constituidos por nanopartículas [NPs], nanoestructuras con tamaños de diámetro menor a 100 nm (Sargentelli, 2010). La sorprendente combinación de nuevas propiedades físicas detectadas en diferentes tipos de NPs ha despertado una curiosidad investigadora comparable a la que ejerce el enorme panorama de posibles aplicaciones futuras (Grande, 2007); como por ejemplo en los campos de catálisis, fotónica, optoelectrónica, biología, aplicaciones farmacéuticas, control de contaminantes, etc. (Avalos, 2013).

En este sentido, diversos trabajos de investigación han sido desarrollados, tanto para determinar las propiedades, como para mejorarlas; dando apertura a la generación de nuevos materiales, **procesos para su producción** y caracterización.

Por lo cual, con un enfoque en los procesos para la producción de los materiales nanoestructurados, el propósito de esta investigación es diseñar un dispositivo mecatrónico semi o automático; mediante el cual se realice la síntesis por biorreducción de nanopartículas de metales de transición (Ag, Au, Co, Cr), teniendo como base el método experimental de síntesis por biorreducción

propuesto por Rosano-Ortega (2009), en el cual se utiliza lirio acuático (*Eichhornia crassipes*) como materia reductora.

Para realizar la investigación, se utilizó la metodología presentada y descrita en este capítulo; la cual fue desarrollada tomando como base en la propuesta metodología de Sampieri (2010).

4.1 RELACION ENTRE EL OBJETO Y TIPO DE ESTUDIO DE LA INVESTIGACIÓN.

Una vez establecido el contexto en el cual se desarrollará la investigación, mediante la revisión del estado del arte que guarda el tema que se investiga, se tiene un mayor entendimiento de ¿Qué se investiga? y ¿Cómo se hará?; es decir, se determina la relación existente entre el objeto motivo de la investigación y el tipo de estudio para realizarlo.

Por lo cual, para la presente investigación y con base en la revisión del estado del arte, se plantea la relación mostrada en la tabla 4.1.

Tabla 4.1. Relación entre el objeto y tipo de estudio de la investigación.

Objeto de estudio	Características principales	Definición del tipo de estudio
Diseñar un dispositivo mecatrónico semi o automático; mediante el cual se realice la síntesis de nanopartículas de metales de transición (Ag, Au, Co, Cr), teniendo como base el método experimental de síntesis por biorreducción utilizando lirio acuático.	- El método de síntesis por biorreducción es una propuesta novedosa, reciente y alterna a los métodos convencionales de síntesis. - Posibilita un mayor entendimiento del método de síntesis, al permitir la manipulación y control de las variables que intervienen en el proceso. - Permite el desarrollo de aplicaciones e investigaciones futuras en áreas como la medicina, los materiales, la electrónica, energías alternativas, entre otras donde se utilice nanopartículas. - Valida la posibilidad de llevar a escalas mayores la producción de nanopartículas por este método de síntesis.	De acuerdo a Sampieri (2010). Considerando que responde a: - Investiga problemas poco estudiados. - Indaga desde una perspectiva innovadora. - Ayuda a identificar conceptos promisorios. - Prepara el terreno para nuevos estudios. Se define un estudio de tipo EXPLORATORIO.

La tabla 4.1 muestra como las principales características identificadas para la investigación, con base en la revisión del estado del arte, se relacionan de forma directa con los alcances correspondientes a un estudio exploratorio. Esto considerando que no se tiene evidencia del uso del lirio acuático como materia reductora para la síntesis por biorreducción de nanopartículas metálicas; además de no encontrar evidencia, en revisión bibliográfica de publicaciones técnico-científicas y en patentes, de equipos o dispositivos que realicen de forma conjunta la síntesis de nanopartículas metálicas por biorreducción.

4.2 METODOLOGIA PROPUESTA

Con base a lo establecido por Sampieri (2010) y una vez realizada la revisión del estado del arte (capítulo 2); el paso siguiente consiste en visualizar el alcance que tendría la investigación, definiendo el continuo de causalidad que se puede tener en el estudio a realizar.

Por lo anterior, para el desarrollo de la investigación, se consideró la metodología mostrada en la figura 4.1. La planeación metodológica considera un avance secuencial desde la fase 1 hacia la 4, fundamentadas cada una de ellas en la revisión del estado del arte de los campos respectivos.

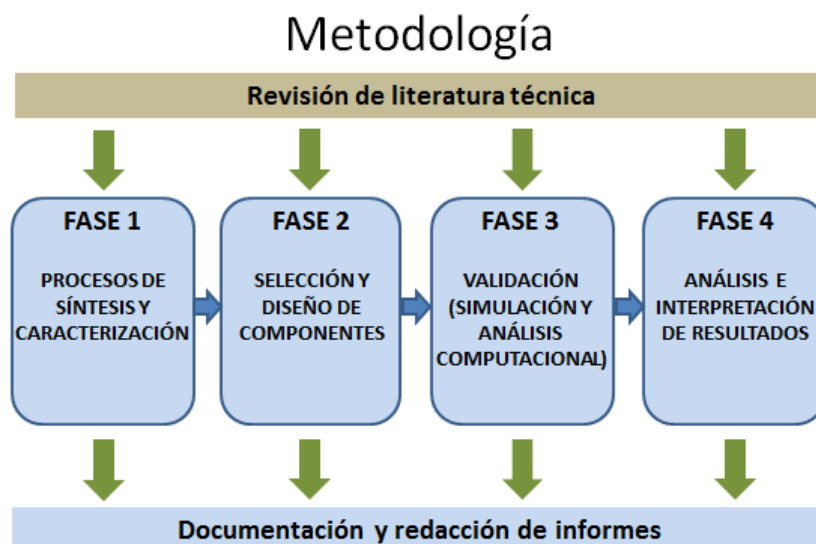


Figura 4.1. Metodología utilizada para el desarrollo de la investigación. (Fuente: elaboración propia).

La secuencia planteada en la figura 4.1, muestra la causalidad de las fases o etapas que componen el desarrollo de la investigación y para las cuales se establecen los alcances de los estudios que se realizan en cada una de ellas; ya que de ellos depende la estrategia de investigación.

Con base en la metodología planteada, figura 4.1, se muestra en la tabla 4.2 el tipo de estudio considerado para cada etapa o fase de la investigación; así como el criterio utilizado para tal consideración.

Tabla 4.2. Tipo de estudio para cada fase de la investigación.

Fase	Tipo de estudio	Criterio
Fase 1. Procesos de síntesis y caracterización	Descriptivo	• Consideran al fenómeno estudiado y sus componentes. • Miden conceptos. • Definen variables.
Fase 2. Selección y diseño de componentes.	Descriptivo	• Consideran al fenómeno estudiado y sus componentes. • Definen variables
	Correlacional	• Explican la relación entre variables. • Cuantifican relaciones entre variables.
Fase 3. Validación.	Correlacional	• Ofrecen predicciones. • Explican la relación entre variables. • Cuantifican relaciones entre variables.
Fase 4. Análisis e interpretación de resultados.	Explicativo	Determinan las causas de los fenómenos. Generan un sentido de entendimiento. Son sumamente estructurados

Como se observa en la tabla 4.2, dentro del desarrollo de este proyecto de investigación intervienen estudios de tipo exploratorio, descriptivo, correlacional y explicativo, sin que estos sean considerados como tipos individuales de investigación, sino como parte del continuo que forma la investigación a realizar. Es decir, los alcances planteados para cada tipo de estudio, considerando una a una las fases a desarrollar de la investigación, dan como producto final y por causalidad el alcance de la investigación.

De acuerdo a la tabla 4.2, se presenta a continuación la justificación del tipo de estudio considerado para cada fase de la investigación.

Se considera que la fase 1 es un tipo de estudio descriptivo, porque se busca conocer y entender cómo se realiza la síntesis de nanopartículas metálicas mediante un método experimental de biorreducción, identificando las fases principales que lo integran y los componentes que en cada una de ellas intervienen; con el objetivo de identificar y definir de forma clara las variables que intervienen en el proceso; así como los equipos utilizados con mayor frecuencia.

Para la fase 2 se tiene una combinación entre los tipos de estudio descriptivo y correlacional, esto a causa de utilizar como base el estudio de la fase 1 y continuar con una descripción detallada de las variables identificadas y equipos utilizados; y es correlacional porque se explica y cuantifica para el método de síntesis, la relación entre las variables manipuladas y las características de los equipos utilizados con las nanopartículas sintetizadas; de forma tal que se puedan seleccionar los equipos y componentes adecuados para realizar el diseño de un sistema semi o automático que emule al método experimental de síntesis por biorreducción de nanopartículas metálicas.

En la fase 3, el tipo de estudio es correlacional; esto por tratarse de la validación del diseño propuesto, producto de la fase 2, ya que se cuantifican las relaciones entre las variables presentes en el proceso de síntesis y las características de las nanopartículas obtenidas como producto; esto mediante el control y manipulación de las variables del proceso y de los equipos seleccionados; de forma que se establezcan predicciones sobre los productos a obtener, es decir, realizar una síntesis por diseño. Eso se realiza mediante simulación y análisis computacional de: 1) los modelos de nanopartículas sintetizadas, seleccionadas de experimentos previos (Rosano-Ortega, 2009) y 2) los modelos individuales y de conjunto de los equipos seleccionados para el diseño del sistema que emule el proceso de síntesis por biorreducción.

Finalmente, en la fase 4 se establecen, mediante el análisis y presentación de los datos obtenidos en la fase 3, las causas que determinan las características particulares de las nanopartículas esperadas como producto, se entiende como el control sobre variables específicas del proceso influye sobre el producto y se especifica de forma concreta los valores a utilizar de las variables al realizar una síntesis por diseño de nanopartículas, mediante un dispositivo que emule el proceso de síntesis por biorreducción utilizado.

4.3 ALCANCES, ESTRATEGIAS Y ACCIONES

Una vez definidos los tipos de estudio que corresponden por fase, se establecen los alcances; así como las estrategias y acciones correspondientes para lograrlos. Los criterios por tipo de estudio, tabla 4.1, se consideran para la formulación de las estrategias y las acciones, ya que debe existir una relación entre el alcance y la forma para lograrlo.

Tabla 4.3. Alcances, estrategias y acciones considerados para la investigación.

Fase	Alcance	Estrategia	Acciones	Preguntas de investigación a responder
Fase 1. Procesos de síntesis y caracterización	Especificar las características y propiedades del método experimental de síntesis por biorreducción para la obtención de nanopartículas metálicas; con la finalidad de asociar conceptos, parámetros, variables y resultados involucrados.	Investigar diversas propuestas del método de biorreducción, en las cuales se utilice como agente reductor materia organiza con propiedades similares a las del lirio acuático, para determinar similitudes que permitan estandarizar el proceso de síntesis.	- Búsqueda de literatura técnico-científica sobre el tema. - Consulta y análisis de datos experimentales y analíticos sobre este método de síntesis. - Participación en el proceso experimental de síntesis por biorreducción.	- ¿Cuál es procedimiento y biomasa más utilizado en la síntesis por biorreducción para la obtención de nanopartículas? - ¿Qué diferencias se presentan con el utilizado como base para este proyecto?
Fase 2. Selección y diseño de componentes.	Realizar la selección de los componentes y equipos adecuados, que permitan emular la secuenciación experimental y probada de pasos acordes al método de síntesis por biorreducción, con la finalidad de contar con la información técnica necesaria para la elaboración de los modelos de CAD que permitan integrar y simular el funcionamiento del sistema diseñado.	Establecer la causalidad entre el método de biorreducción utilizado, las variables que intervienen en el proceso y las características de los productos; para definir las especificaciones técnicas de los equipos y dispositivos que permitan el control y manipulación de las variables del proceso. Secuenciar los procesos de la síntesis mediante el acoplamiento de los equipos seleccionados Generar, mediante software especializado, los modelos de bloques y de CAD que permitan la simulación del método de síntesis	Mediante una revisión del estado del arte: - Especificar y cuantificar las variables de control que intervienen para la síntesis. - Identificar los equipos utilizados con mayor frecuencia en procesos de síntesis por biorreducción similares al estudiado. Comparar con los equipos utilizados en el método experimental considerado, para identificar similitudes que permitan estandarizar y seleccionar los equipos adecuados. Elaborar los diagramas de bloque y de CAD de los dispositivos seleccionados. Ensamblar el sistema completo con base en la secuencia planteada y los modelos CAD de los componentes.	- ¿Cuáles y cuántos son los dispositivos comúnmente utilizados en la obtención de nanopartículas metálicas mediante síntesis por biorreducción? - ¿Cuál es la secuencia del proceso de síntesis por biorreducción utilizada con mayor frecuencia?

Tabla 4.3. Alcances, estrategias y acciones considerados para la investigación (continuación).

Fase	Alcance	Estrategia	Acciones	Preguntas de investigación a responder
Fase 3. Validación.	Validar la eficiencia del dispositivo, mediante simulación numérico computacional de: - Los modelos de los dispositivos seleccionados. - El modelo del ensamble del sistema completo (en bloque o con dispositivos); Considerando las variables de diseño para la síntesis, obtenidas por simulación y análisis de los modelos de nanopartículas metálicas seleccionadas como muestra.	Comparar contra resultados experimentales y/o teóricos de otras propuestas de síntesis por biorreducción, con la finalidad de establecer la correlación entre: 1) las variables manipuladas, 2) los equipos seleccionados y 3) las nanopartículas obtenidas como productos en el proceso de la síntesis	- Realizar la simulación y análisis de los modelos de nanopartículas consideradas. - Realizar comparaciones con bases de datos de los materiales considerados y determinar valores de variables de control. - Simular el proceso de síntesis, usando el modelo del dispositivo, con los valores establecidos para las variables	- ¿Cuáles son los principales parámetros a considerar para la síntesis por diseño de nanopartículas metálicas por biorreducción? - Desde un punto de vista de la ingeniería mecatrónica ¿Cómo se valida la eficiencia del dispositivo diseñado?
Fase 4. Análisis e interpretación de resultados	Determinar los valores de las variables de síntesis, que permitan mediante un sistema mecatrónico, obtener nanopartículas de materiales específicos al realizar síntesis por diseño.	Seleccionar una aplicación de nanopartículas, en un campo de interés específico, contando con las especificaciones técnicas requeridas; para determinar los valores de las variables a controlar en el proceso de síntesis.	- Identificar el campo de interés. - Verificar que se tenga la información necesaria sobre el material considerado. - Simular la síntesis. - Comparar los resultados contra base de datos.	- ¿Qué cantidad de nanopartículas se produce mediante los métodos de síntesis por biorreducción? - ¿Cuáles son las formas convencionales en que se entrega el producto donde se encuentran contenidas las nanopartículas?

4.4 PERSPECTIVA

Una vez establecida la metodología para el desarrollo de la investigación, se tiene la guía que da pauta para la realización de cada una de las fases o etapas. Lo cual, permitirá la evaluación de los alcances planteados para el logro del objetivo general de la investigación.

CAPÍTULO 5

DESARROLLO

5.1 INTRODUCCIÓN

Numerosos procesos de la síntesis de nanomateriales se han investigado con el objetivo de controlar su tamaño, morfología, estructura y composición química (Mai, 2012). Existen tres rutas principales para la síntesis de estos materiales, la síntesis por medio físicos, por medios químicos y por medios biológicos.

En el diseño de materiales nanoestructurados, para aplicaciones específicas, se podría afirmar que la adecuada selección de método de síntesis a emplear, en última instancia, determina el éxito o el fracaso de la síntesis de materiales nanoestructurados, porque las propiedades físicas y las aplicaciones, son altamente dependientes de la forma como se preparan. Entonces, el método de preparación determina no sólo las características de los productos, como el tamaño y la forma, sino también sus propiedades físicas (Alarifi, 2009).

Los objetivos de los estudios recientes, en la biosíntesis de nanopartículas, se han enfocado en un mejor control de la morfología y el tamaño de las nanopartículas, así como de la mejora de la relación de producción (Korbekandi, 2013).

Con base en lo anterior, en este capítulo se muestran las acciones desarrolladas para el diseño de un sistema mecatrónico que emule el proceso de síntesis por biorreducción, desarrollado por Rosano-Ortega (2009), para la obtención de nanopartículas metálicas de materiales como la plata (Ag), el oro (Au), el cromo (Cr) y el cobalto (Co); y que permita realizar síntesis de nanopartículas por diseño para aplicaciones específicas.

5.2. DESCRIPCIÓN GENERAL DEL PROCESO DE DISEÑO

Con el dispositivo diseñado, se busca automatizar el proceso de síntesis por biorreducción citado, tener control sobre la morfología y el tamaño de las nanopartículas; así como un incremento en la producción de estas respecto al método tradicional utilizado. Para lograr esto, la arquitectura implementada contempla los siguientes aspectos de diseño:

1. Análisis del proceso
2. Búsqueda de soluciones
3. Estudio de los costes de la inversión
4. Instalación
5. Formación al personal en la mejora
6. Comprobación

Cada uno de estos aspectos fue elegido de manera que se cumpla con las condiciones de operación requeridas en el proceso de síntesis de nanopartículas citado y con base con las etapas de la metodología planteada para el desarrollo de la investigación, figura 4.1 del capítulo 4. La relación establecida para mostrar la correspondencia entre la metodología y los aspectos de diseño se muestra en la tabla 5.1.

Tabla 5.1. Relación entre metodología y aspectos de diseño.

Fase de la metodología general del proyecto	Aspectos de diseño para un sistema automático	Relación	Evidencia
Fase 1: Procesos de síntesis y caracterización	Análisis del proceso	Se estudió el proceso completo de síntesis por biorreducción y se buscaron los puntos de mejora.	Sección 5.3, capítulo 5.
Fase 2: Selección y diseño de componentes	Búsqueda de soluciones Estudio de los costes de inversión	Se buscaron los elementos sustitutivos para la situación actual, diferentes tipos de automatismos para cada etapa del proceso de síntesis; así como la cotización de los elementos principales.	Sección 5.4, capítulo 5.
Fase 3: Validación (simulación y análisis computacional)	Instalación o ensamble del sistema	Elegida la solución de automatismo para cada etapa del proceso, se realizó el modelado y ensamble del sistema mediante software computacional.	Sección 5.5, capítulo 5.
Fase 4: Análisis e interpretación de resultados	Comprobación	Una vez elaborado el sistema automático, mediante simulación computacional, comprobar que cumple la función deseada.	Sección 5.6, capítulo 5.

Es importante resaltar que por tratarse específicamente del diseño del sistema mecatrónico, no se consideran el punto correspondiente al Estudio de los costes de inversión; sin embargo se incluye en el anexo 2 las cotizaciones de los equipos con un mayor precio considerados para el diseño del sistema.

En las secciones siguientes de este capítulo, se detalla el desarrollo para cubrir cada aspecto de diseño mencionado en la tabla 5.1.

5.3. ANÁLISIS DEL PROCESO DE SÍNTESIS POR BIORREDUCCIÓN

De la revisión de estado del arte para la síntesis de nanopartículas metálicas por biorreducción, considerando materiales como plata (Ag), oro (Au), cromo (Cr) y cobalto (Co), se encontró que el proceso para la obtención de estos materiales nanoestructurados se divide en tres etapas: 1ª. Etapa. Preparación de materia reductora, 2ª. Etapa. Síntesis inducida y 3ª. Etapa. Caracterización de muestras obtenidas.

En concordancia con el objetivo del proyecto; el cual indica como punto central de la investigación el diseño de un sistema mecatrónico mediante el cual se pueda realizar la síntesis de nanopartículas metálicas por biorreducción, se consideró a la 2ª etapa del proceso de síntesis, como el conjunto de operaciones base para el diseño del sistema mecatrónico motivo de esta investigación. Lo anterior teniendo en cuenta que la etapa 1ª es donde se procesa la materia reductora o biomasa, la cual es considerada como un consumible dentro de la etapa 2ª; por lo tanto, su preparación no forma parte de la síntesis inducida de nanopartículas. En tanto que la 3ª etapa corresponde a pruebas experimentales de caracterización, realizadas a los productos obtenidos después de finalizada la síntesis; por lo tanto no influye en la obtención ni en las características y propiedades físicas de las nanopartículas obtenidas.

Con relación a lo anterior y para contextualizar el proceso de síntesis utilizado como base en el desarrollo de la investigación, en la figura 5.1 se presenta un esquema general del proceso de síntesis inducida para la obtención de nanopartículas metálicas (Ag, Au, Cr y Co).

La figura 5.1, muestra la secuencia de pasos seguidos al realizar un proceso de síntesis inducida para la obtención de nanopartículas de plata. Los pasos y secuencia indicados son los correspondientes al método experimental propuesto y desarrollado por Rosano-Ortega (2009).

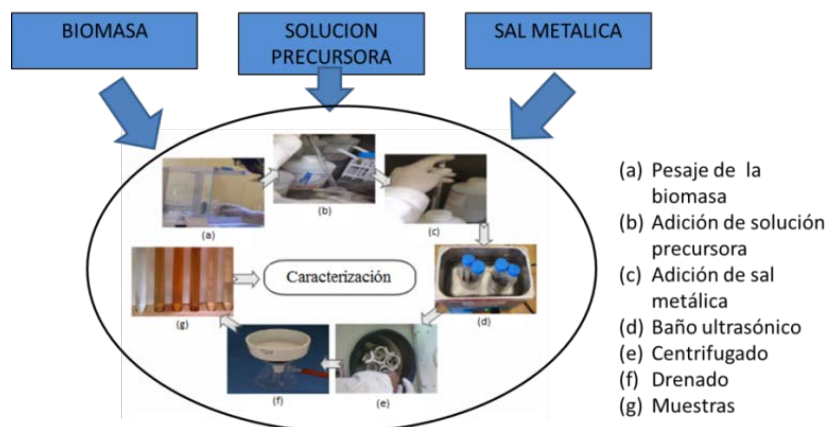


Figura 5.1. Etapa de síntesis inducida para la obtención de nanopartículas metálicas en el proceso de síntesis por biorreducción utilizando lirio acuático (Munive-Olarte, 2014).

Se observa en la figura 5.1 como punto central el proceso de síntesis inducida, mientras que la biomasa, la solución precursora y la sal metálica son externas a ésta y se consideran como consumibles para el proceso de síntesis. De forma similar, al final de la secuencia de pasos se indica que el producto final es enviado a la etapa de caracterización, la cual es también externa al proceso de síntesis.

Con lo anterior, se muestra con claridad la etapa y secuencia de pasos que se consideraron para el proceso de diseño del sistema mecatrónico que automatice el proceso experimental de síntesis inducida propuesto y desarrollado por Rosano-Ortega (2009).

Una vez estudiado el método de biorreducción para obtener nanopartículas metálicas e identificada la etapa central para la realización de la automatización, se prosiguió a la búsqueda y determinación de puntos de mejora, en correspondencia a lo descrito en la tabla 5.1.

Para la determinación de las operaciones y la secuencia a seguir para la obtención de nanopartículas metálicas, mediante el proceso de síntesis por biorreducción citado, se realizó un análisis de métodos propuestos en investigaciones que utilizan como agente reductor materia orgánica obtenida de plantas, frutos o extractos de estos; para identificar las operaciones que son utilizadas con mayor frecuencia y la secuencia que estas llevan dentro de los métodos de síntesis propuestos. Los trabajos de investigación consultados fueron seleccionados con base en las similitudes de la fuente de obtención de la materia reductora y su método de preparación.

En la tabla A-2, anexo 1, se muestran los trabajos de investigación consultados que dan soporte a la secuenciación de actividades durante la etapa de síntesis

inducida en el método de biorreducción. Del análisis de la tabla A-2, se tiene que las principales operaciones realizadas dentro de la etapa de síntesis inducida son cuatro y se muestran en la tabla 5.2.

Tabla 5.2. Principales operaciones realizadas dentro de la etapa de síntesis inducida.

No.	Operación	Descripción
1	Preparación del medio de reacción	Consiste en formar un agregado con la materia reductora (biomasa, extracto, etc.), la sal metálica del material a sintetizar y en algunos casos una solución precursora (ver tabla 2.1, capítulo 2); dentro de recipientes especiales como matraz, vaso de precipitados o tubo de ensaye.
2	Mezclado de componentes del medio de reacción	Se lleva a cabo mediante agitadores magnéticos con incremento o no de temperatura, baño ultrasónico y agitación manual.
3	Tiempo de reposo para la síntesis inducida de las nanopartículas	Una vez realizada la mezcla de los componentes del medio de reacción, se procede al almacenamiento temporal de la mezcla para que se realice la síntesis; esta operación se realiza a condiciones ambientales de temperatura y presión, con los recipientes cerrados para evitar contaminación.
4	Separación del producto final de la síntesis	Trascurrido el tiempo de reposo para la síntesis inducida, se observa un cambio de coloración en el medio de reacción, indicador que la síntesis se ha efectuado. De acuerdo a la materia reductora utilizada, se procede a la separación de ésta con la solución que contiene las nanopartículas sintetizadas. Si la materia reductora fue biomasa, generalmente se empleará decantación y centrifugado en esta operación; para el caso de extractos también se menciona el uso de centrifugado.

Una vez identificadas las operaciones, se contrastaron contra las utilizadas en el método de síntesis por biorreducción desarrollado por Rosano-Ortega (2009), con la finalidad de establecer los puntos de mejora al proceso de síntesis inducida.

En primer lugar se listaron las operaciones y secuencia utilizadas en el método de síntesis por biorreducción, mostradas en la tabla 5.2; después se muestran los componentes y/o acciones realizadas en cada operación, tanto de los métodos consultados en literatura técnico-científica especializada como del método experimental con lirio acuático como materia reductora.

La información ampliada de métodos consultados de referencias bibliográficas, correspondiente a la segunda columna de la tabla 5.3, se puede consultar en la tabla A-3 del anexo 1.

El análisis realizado fue cualitativo; con la finalidad de identificar las diferencias existentes y su impacto dentro del proceso de síntesis. En la tabla 5.3, se muestra la información correspondiente a este análisis.

Tabla 5.3. Comparación de operaciones y secuenciación.

Operación y secuencia	Métodos consultados de referencias	Método experimental con lirio acuático	Diferencia
1) Preparación del medio de reacción	- Solución acuosa de sal metálica a sintetizar - Solución acuosa de materia reductora	- Solución acuosa de sal metálica a sintetizar - Solución acuosa de materia reductora - Solución reguladora (solución buffer)	Adición de solución reguladora con control de pH
2) Mezclado de componentes	- Agitación (manual o magnética) - Centrifugado	- Agitación ultrasónica - Centrifugado	Agitación mediante baño ultrasónico
3) Tiempo de reposo	- Reposo a temperatura ambiente - Centrifugado	- Reposo a temperatura ambiente - Centrifugado - Agitación ultrasónica	Agitación mediante baño ultrasónico
4) Separación del producto final de la síntesis	- Centrifugado - Filtrado	- Centrifugado - Decantado - Filtrado	Decantado para separación de sobrante de biomasa.

De la información presentada en la tabla 5.3, se observa en la cuarta columna las diferencias existentes entre los métodos consultados y el utilizado en la investigación. Las variantes reportadas se consideran como aportaciones al proceso de síntesis por biorreducción y su inclusión se fundamenta a continuación:

Adición de solución reguladora y control de pH:

Esto es normalmente hecho mediante la inclusión de un buffer (solución reguladora), un ácido débil o base que mantendrá el pH de la reacción durante la adición de los componentes de la prueba. El principal efecto generado con la manipulación del pH durante la síntesis inducida, es el control sobre el tamaño de las nanopartículas de plata (Korbekandi, 2013), oro (Aromal, 2012) y del cobalto (Naz, 2014).

Agitación mediante baño ultrasónico:

El ultrasonido se utilizan en muchas aplicaciones, tales como homogeneizador, desintegración, sonochemistry, limpieza o desgasificación (Hielscher, 2015). La función asignada, dentro del proceso de biosíntesis, es mezclar los componentes del medio de reacción y facilitar la reacción; ya que se adiciona energía al medio (Sermakkani, 2012); ya que mediante el tratamiento ultrasónico puede desintegrarse material fibroso celulósico en partículas finas y romper las paredes de la estructura celular. Esto libera más del material intracelular para potenciar la reacción de reducción en la síntesis.

Decantación para separación de sobrante de biomasa:

La decantación, es uno de los métodos de separación de mezclas que sirve para separar sólidos de líquidos y líquidos no miscibles. EL primer caso es el correspondiente para la síntesis por biorreducción utilizando biomasa, la cual es material sólido que se sedimenta (por su mayor peso). Luego se inclina el recipiente y dejando escurrir el líquido en otro recipiente queda sólo el sólido sedimentado. Obteniendo así la solución acuosa con nanopartículas y tras varias repeticiones de centrifugado y decantado, se elimina la presencia de material orgánico (biomasa) (Rosano-Ortega, 2009).

Finalmente, del análisis del proceso de síntesis por biorreducción, realizado en esta sección, se obtuvo el diagrama de secuencia de operaciones necesarias para realizar la síntesis inducida de nanopartículas metálicas; el cual se presenta en la sección 6.2 de resultados. De igual forma se identificaron los puntos de mejora al proceso, mismos que se consideraron para la búsqueda de soluciones dentro del proceso de diseño del sistema mecatrónico en la siguiente sección.

5.4. BÚSQUEDA DE SOLUCIONES

Con base en las tablas 2.4, 5.2, 5.3: y las principales operaciones identificadas para el desarrollo de síntesis de nanopartículas por biorreducción, utilizando plantas o partes de estas como materia reductora, se determinaron los equipos o automatismos utilizados para realizar cada una de las operaciones citadas en el proceso de síntesis inducida.

5.4.1 SELECCIÓN DE COMPONENTES Y EQUIPOS

Para la selección de los componentes y equipos a utilizar en el diseño del sistema mecatrónico, se realizó un análisis de diferentes propuestas de síntesis por biorreducción para nanopartículas de Ag, Au, Cr y Co; considerando los equipos utilizados en la preparación de la materia reductora y la síntesis inducida, ya que algunos de los equipos intervienen en ambas etapas.

En la tabla 5.4 se muestran los equipos utilizados con mayor frecuencia en el proceso de síntesis y en la tabla 5.5 las especificaciones de operación que se usan.

Tabla 5.4 Equipos y dispositivos utilizados en métodos propuestos de síntesis por biorreducción.

Material	Referencia	Preparación de materia reductora								Síntesis inducida						Particularidades
		A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	
Plata (Ag)	Astalakshmi, (2013)				X	X				X	X					
	Azizi, (2013)				X	X	X			X	X		X			
	Umoren, 2014	X	X	X	X	X	X			X	X				X	
	Anandini, 2013			X	X		X	X	X	X			X		X	
	Aki, 2013	X	X			X	X	X	X	X	X		X			
Oro (Au)	Birendra, 2014			X	X	X	X			X	X					
	Ipsita, 2013	X				X	X	X		X	X					
	Mohanan, 2013					X	X			X	X		X		X	Extracción del jugo de la fruta
	Kirtee, 2013		X	X	X			X								
	Aromal, 2012	X				X	X			X		X			X	
Cromo (Cr)	Ramesh, 2012	X	X			X	X			X	X	X				Secado de la solución que contiene las nanopartículas mediante calentamiento en un horno
Cibalto (Co)	Naz, 2014									X	X				X	

(A) Lavado, (B) Corte (Picado), (C) Secado, (D) Molido, (E) Ebullición, (F) Filtrado, (G) Centrifugado, (H) Almacenamiento.

(I) Recipiente (contenedor), (J) Agitación, (K) Calentamiento, (L) Centrifugado, (M) Filtrado, (N) Almacenamiento

Se observa en la tabla 5.4, en las columnas correspondientes a la síntesis inducida, que los equipos empleados con mayor frecuencia son:

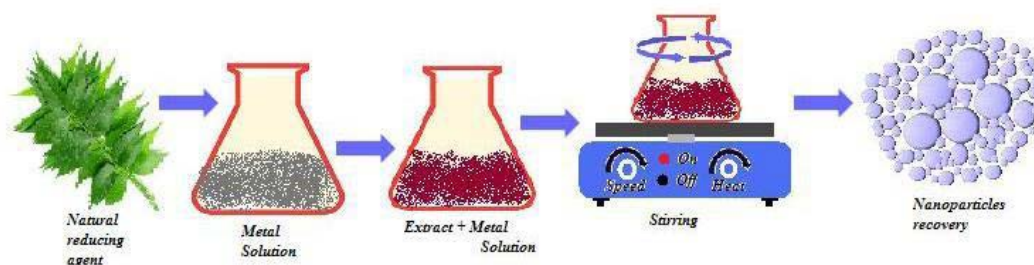
(I) Recipiente/contenedor

(J) Agitador

(L) Centrifuga

(N) Medio para Almacenamiento

En menor medida se observa el uso de dispositivos para el calentamiento del medio de reacción, esto al considerar condiciones estándar de presión y temperatura al realizar la síntesis inducida, tal como lo indican diversos autores (Tabla A-3, anexo 1). En la representación esquemática de la figura 5.2, se ilustra cómo estos equipos y/o dispositivos intervienen en el proceso de síntesis citado, validando así la información contenida en la tabla 5.4.

**Figura 5.2.** Síntesis de nanopartículas a partir de plantas y extractos (Ingale, 2013).

Una vez determinados los dispositivos y/o equipos a utilizar en el diseño del sistema mecatrónico, fue necesario justificar la inclusión de cada uno de estos, así como sus especificaciones de operación, ver tabla 5.5. Lo cual se realizó en función del aporte dado al proceso de síntesis inducida para cada operación que realiza el equipo o dispositivo.

Tabla 5.5. Equipos y especificaciones a utilizar en el diseño del sistema mecatrónico de síntesis por biorreducción para la obtención de nanopartículas metálicas.

No.	Equipo o dispositivo	Aporte al proceso de síntesis	Especificaciones de operación
1	Recipiente/contenedor	La función asignada a este componente es servir como recipiente para la preparación de medio de reacción.	Volumen manejado 100 - 500 mL
2	Agitador	La función asignada es mezclar los componentes del medio de reacción y facilitar la reacción; ya que se adiciona energía al medio (Sermakkani, 2012).	200 - 250 rpm
3	Centrifuga	La función asignada es doble, 1) Como parte del proceso de mezclado agitado-centrifugado, repetidas ocasiones y 2) como medio de separación de la biomasa y la solución que contiene las nanopartículas después de la síntesis inducida (Korbekandi, 2013).	15000 rpm en promedio con rotor fijo 5000 rpm máximo con rotor basculante
4	Medio Almacenamiento para	La función es contener el producto final de la síntesis (solución acuosa de nanopartículas, después de realizada la síntesis inducida y previo a la caracterización).	Volumen manejado 100 - 500 mL

La fundamentación de la información mostrada en la columna de Aporte al proceso de síntesis, de la tabla 5.5, puede ser consultada en la tabla A-3 del anexo 1, en las columnas de equipo de laboratorio utilizado y sus especificaciones de operación y funcionamiento.

Finalmente del análisis realizado en este punto, se tiene la propuesta de los dispositivos a utilizar, así como las especificaciones de operación. Datos utilizados para el diseño del sistema mecatrónico de síntesis por biorreducción para la obtención de nanopartículas. La información se muestra en la tabla 5.6.

Tabla 5.6. Equipos y dispositivos propuestos para el diseño del sistema.

No.	Equipo o dispositivo	Especificaciones de operación	Equipo o dispositivo propuesto	Observaciones
1	Recipiente/contenedor	Volumen manejado 100 - 500 mL	4 tubos de ensaye de 100 mL c/u.	Por características de recipientes para colocar las muestras dentro de la maquina centrifuga, 4 tubos de 100 mL, un volumen máximo manejado de 400 mL.

2	Agitador	200 - 250 rpm	Baño ultrasónico Branson M2800H	Aproximadamente 4 Hz son las 250 rpm requeridas, el nivel ultrasónico inicia de los 20 kHz.
3	Centrifuga	15000 rpm en promedio	Centrifuga no refrigerada Labnet Z326.	El rango utilizado con mayor frecuencia es de 12000 - 18000 rpm, para tiempos de 10 a 15 min. De 4000 – 5000 rpm con rotor oscilante.
4	Medio Almacenamiento para	Volumen manejado 100 - 500 mL	4 tubos de ensaye de 100 mL c/u.	Para conservar la compatibilidad de recipientes manejados

Para consultar las especificaciones técnicas de los equipos y/o dispositivos propuestos, referirse a la tabla del anexo 2.

Teniendo definidos los equipos a utilizar dentro del diseño del sistema mecatrónico, tabla 5.6, se precedió a establecer las variables de diseño, las cuales influyen tanto en el proceso de síntesis como en las características del producto final. Las variables consideradas, así como su relación con los dispositivos y equipos se presentan en la siguiente sección.

5.4.2. VARIABLES DE DISEÑO

Como menciona Korbekandi (2013) los principales desafíos, frecuentemente encontrados, en la biosíntesis de nanopartículas son el control de la forma y tamaño de éstas; así como lograr la mono-dispersidad en fase de solución. Sin embargo, para lograr esto existen diversos factores que pueden influir directamente o causar algún obstáculo en la síntesis de nanopartículas metálicas; factores como el pH del inductor, la temperatura de reacción, la concentración del sustrato y la concentración de la biomasa, ver tabla 2.2 del capítulo 2.

Los efectos resultantes al manipular los valores de los factores mencionados, afectan directamente la forma, el tamaño y la dispersidad de las nanopartículas resultantes de la síntesis, como se menciona en la última columna de la tabla 2.2, es por ello que son considerados como las variables de control para el desarrollo de síntesis por diseño de nanopartículas de materiales como plata (Ag), oro (Au), cromo (Cr) y cobalto (Co).

Por lo anterior y en consecuencia de la necesidad de control sobre estas variables, se les consideró como las variables de diseño para el sistema mecatrónico de síntesis por biorreducción para la obtención de nanopartículas metálicas. La tabla 5.7 muestra el resumen de estas variables.

Tabla 5.7. Variables identificadas para el diseño del sistema mecatrónico para síntesis de nanopartículas metálicas por biorreducción.

No.	Variable
1	pH de solución precursora
2	Concentración de biomasa
3	Concentración de sal metálica
4	Temperatura de nucleación y crecimiento

Una vez determinadas las variables de diseño, mostradas en la tabla 5.7, fue necesario especificar las consideraciones y los valores de referencia de éstas. Datos considerados tanto para la elaboración del diagrama de secuencia de operaciones, así como para la selección de equipos requeridos para el diseño del sistema mecatrónico.

A continuación se presenta las consideraciones y valores de referencia propuestos para estas variables.

CONSIDERACIONES GENERALES

Tal como se especificó en la sección 3.2.1 y 3.2.2, se considera que la formación de nanopartículas metálicas en los métodos de síntesis biológicos que utilizan plantas o extractos de plantas, es producto de la actividad enzimática de los polisacáridos contenidos en la biomasa del lirio acuático. Por lo tanto, los efectos que sobre la reacción enzimática tenga las variaciones en factores (variables) considerados en la tabla 5.7, afectan directamente el tamaño, la forma, la estructura y dispersidad de las nanopartículas producto de la síntesis.

Con base en lo anterior, se especificaron los efectos y rangos de las variables de diseño, de forma que como producto final del proceso de síntesis por biorreducción, utilizando lirio acuático, se obtengan partículas de los materiales sintetizados con tamaños menores a 100 nm.

De igual forma, para la selección de los equipos propuestos para el diseño del sistema mecatrónico, se consideró a estos efectos y su rango de valores tomando en cuenta que las especificaciones de operación de los equipos cubran los rangos necesarios para la obtención de las nanopartículas citadas en el párrafo anterior.

EFFECTOS DEL pH

Una variación del pH ejerce gran influencia en la formación de las nanopartículas (Ghodake, 2010; Sathishkumar, 2010). Un cambio en el pH resulta en un cambio de carga en los fitoquímicos naturales contenidos en la planta o extracto, que afecta a su capacidad para unirse y reducir aniones y cationes metálicos en el

curso de la síntesis de nanopartículas, y esto a su vez pueden afectar a la forma, tamaño, y el rendimiento de nanopartículas (Makarov, 2014).

De acuerdo a la teoría enzimática, existe un valor de pH óptimo para un máximo de la actividad enzimática dentro de un ensayo (Baker & Murray, 2001), figura 5.3, en consecuencia, es importante mantener el pH de una reacción enzimática. Esto es normalmente hecho mediante la inclusión de un buffer (solución reguladora), un ácido débil o base que mantendrá el pH de la reacción durante la adición de los componentes de la prueba.

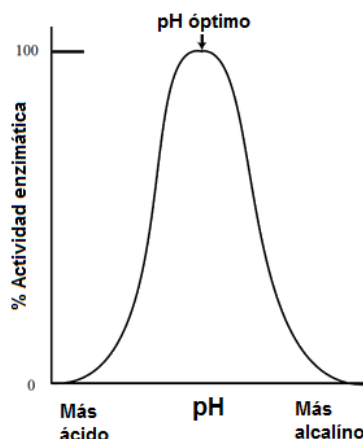


Figura 5.3. Valor óptimo de pH para la actividad enzimática (Baker & Murray, 2001).

En concordancia con lo mencionado para la figura 5.3, para establecer los valores del pH a utilizar en la síntesis de nanopartículas metálicas de Ag, Au, Cr y Co, mediante el sistema mecatrónico diseñado, se construyó un diagrama que muestra el efecto sobre el tamaño y forma de la nanopartícula al cambiar el pH de la solución donde se lleva a cabo la síntesis.

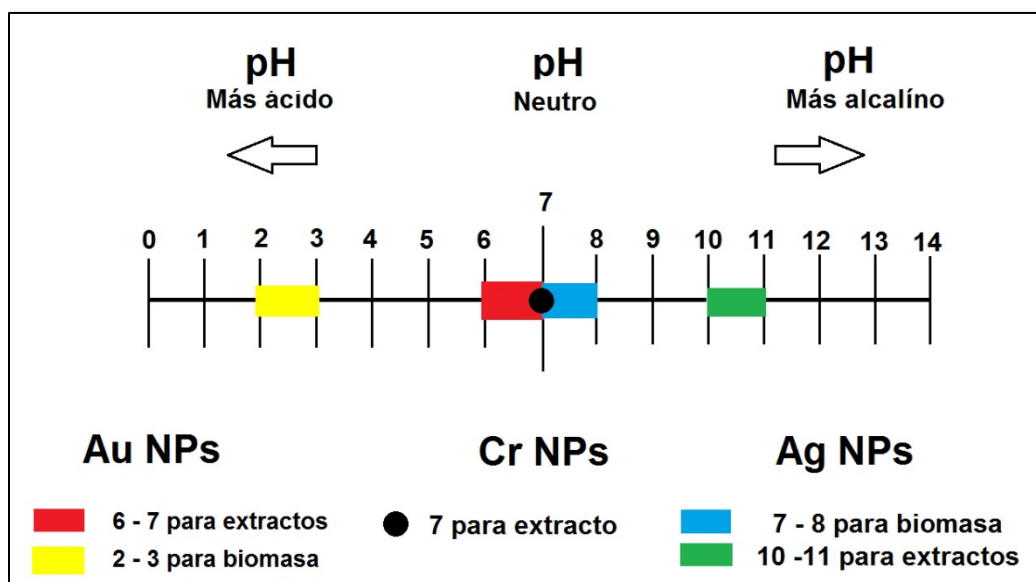


Figura 5.4. Valores de pH para síntesis de nanopartículas metálicas (Fuente: elaboración propia).

El diagrama fue construido consultando los resultados de las propuestas de síntesis de nanopartículas metálicas por biorreducción (tabla A-3 y A-4, anexo 1), en las cuales se utilizaron plantas o extractos de estas. Lo anterior, con la finalidad de contar con los rangos de valores de referencia para la síntesis por diseño de nanopartículas.

La variación del pH y su efecto sobre el tamaño de las nanopartículas, se presenta en la sección de resultados como parte de los parámetros de síntesis para el diseño de nanopartículas mediante el sistema mecatrónico propuesto.

EFFECTOS DE LA CONCENTRACIÓN DE LA SAL METALICA (SUSTRATO)

En biotransformación, uno de los factores que hacen la reacción más económica y eficiente, es encontrar la máxima concentración de sustrato, la cual debiera ser convertida en el producto final (Korbekandi, 2013).

De acuerdo al modelo de LaMer (Gan, 2012), esta predicho que la formación de las nanopartículas podría solo pasar cuando la concentración de los precursores este dentro de un rango factible para la nucleación. Sin embargo este rango puede variar dependiendo del método propuesto de síntesis asistido por biomasa. Gráficamente se observa esto en la figura 5.5.

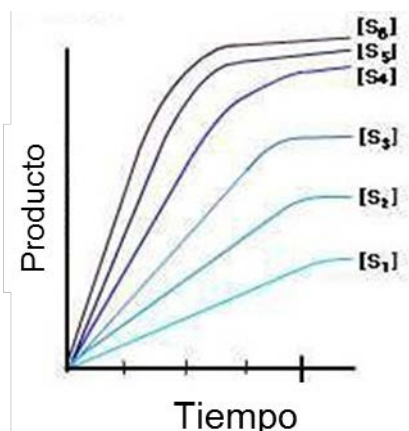


Figura 5.5. Efecto de la concentración del sustrato sobre la formación de nanopartículas (Gan, 2012).

En la figura 5.5, se observa como la cantidad de nanopartículas, producto de la síntesis, depende de la concentración del sustrato; es decir para una producción mayor, utilizando el mismo método y tiempo empleado para la síntesis, se recomienda utilizar concentraciones altas de sustrato. Los resultados para esta consideración, utilizando el método de biorreducción con lirio acuático, se presentan en la sección de resultados.

Con base en lo anterior se realizó una evaluación de diferentes concentraciones de sustrato, en el medio de reacción, con el objetivo de determinar la máxima concentración de éste para la producción de nanopartículas. En la tabla 5.8, se muestran los valores de la concentración máxima de sustrato recomendados para la obtención de nanopartículas de los materiales listados mediante el sistema propuesto.

Tabla 5.8. Concentraciones máximas de sustrato recomendadas para síntesis de nanopartículas metálicas.

Sustrato	Nanopartícula	Valor de referencia	Valor experimental	Justificación
AgNO ₃	Ag	≤ 5 mM	1 mM	>5 mM – 10 mM Condicion tóxica sobre la biomasa.
AuHCl	Au	1 mM inicial	1 mM	Valores anteriores a 1 mM, no registran formación de AuNPs
K ₂ Cr ₂ O ₇	Cr	1 mM inicial	1 mM	Para obtención de nanopartículas <100 nm.
CoCl ₂ ·6H ₂ O	Co	1 mM inicial	1 mM	Para obtención de nanopartículas <100 nm.

EFFECTOS DE LA TEMPERATURA

Tal como lo indica Gan (2012), la habilidad de la biosíntesis para sintetizar nanopartículas con buena dispersión y a temperatura ambiente podría no solo incrementar la facilidad del manejo del proceso, sino también ser una ventaja para el ahorro de energía.

Por otro lado, Korbekandi (2013) menciona que al hervir la biomasa se inhibe la producción de nanopartículas, lo cual soporta que la biosíntesis de nanopartículas sea enzimática, como se hace referencia en la sección 3.1 del capítulo 3, y las enzimas secretadas por la biomasa son las responsables por la reducción de los iones metálicos a nanopartículas.

De acuerdo a la teoría sobre la actividad enzimática, la temperatura es uno de los fenómenos que afectan la cinética enzimática, señalando que (Baker & Murray, 2001):

- A menor temperatura (T), de la óptima, mayor rigidez de las uniones débiles (menor flexibilidad conformacional).
- A mayor temperatura (T), de la óptima, mayor desestabilización de las estructuras (desnaturalización).

Las enzimas muestran temperaturas óptimas para sus reacciones, pudiendo ser estas cercanas a la temperatura del cuerpo ($T \approx 36^\circ\text{C}$).

En la figura 5.6, se muestra la actividad enzimática como función de la temperatura.

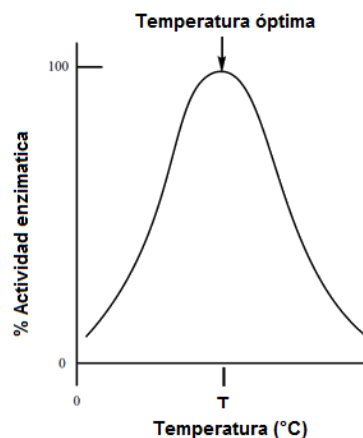


Figura 5.6. Temperatura óptima para la actividad enzimática (Baker & Murray, 2001).

Esto indica que la velocidad de la reacción se incrementa con la temperatura hasta que un punto máximo es alcanzado. Este incremento se debe a que aumenta el número de moléculas ricas en energía que pueden pasar la barrera energética de

estado de transición, para formar a los productos. Sin embargo, la elevación excesiva de la temperatura del medio que contiene a las enzimas (temperatura entre 80 – 90 °C), resulta en un decremento de la velocidad como resultado de la desnaturalización, es decir, la pérdida de la estructura tridimensional de las enzimas (Vázquez-Contreras, 2003).

Por lo cual, como menciona Baker & Murray (2001), una prueba con una enzima puede realizarse a temperatura ambiente, siempre y cuando este valor sea constante de día a día o de temporada a temporada y se tenga cuidado durante el otoño y primavera con los cambio de temperatura causados por el cambio de calor a frio en el aire acondicionado del lugar de prueba.

Con base en lo anterior, no se considera necesario incluir un calentador y control de la temperatura dentro del sistema mecatrónico; permitiéndose así realizar la síntesis de nanopartículas metálicas por biorreducción a condiciones de temperatura ambiente, la cual es de 28.5 °C máxima anual al intemperie durante los meses de abril y mayo en el estado de Puebla (INEGI, 2014), cercana a la temperatura óptima para la actividad enzimática.

5.5 INSTALACIÓN O ENSAMBLE DEL SISTEMA

En la actualidad todo proceso de elaboración de cualquier producto, tiene dentro de alguna de sus etapas de gestión el uso de la tecnología CAD. Dentro de estas etapas, la de diseño es en la que con mayor frecuencia se utilizan los sistemas de CAD, ya sea para el diseño mismo, la simulación de las condiciones de trabajo o la elaboración de la documentación y planos del producto a desarrollar (Bedolla, 2008).

Dentro del ciclo de diseño del producto, las aplicaciones de Diseño Asistido por Computadora (CAD), la Ingeniería Asistida por Computadora (CAE) y la Manufactura Asistida por Computadora (CAM) anteceden al proceso de fabricación del producto; esto a causa de la importancia que tiene el asegurarse que el producto a obtener reúne las características requeridas por el cliente; sin la necesidad de llegar a contar con prototipos y pruebas experimentales que redundan en gastos y aumento en el precio final del producto.

El uso de ambientes virtuales donde se simulan las condiciones de trabajo a las que se someterá el producto o equipo diseñado, permiten evaluar el futuro comportamiento del sistema, basándose en la fundamentación teórica correspondiente; dando así la certeza de cumplir con las perspectivas y/o su

correspondiente margen de error del producto o equipo al momento de estar realizando las funciones para las cuales se diseñó.

Es requisito indispensable, para el desarrollo de un producto o equipo mediante tecnología CAD/CAE/CAM, contar en primera instancia con la información geométrica para la elaboración de los modelos CAD correspondientes, las condiciones de trabajo y/o de operación a las cuales estará sometido el sistema que se diseña, para posteriormente realizar la simulación de cada componente o de la totalidad del producto o equipo, con la finalidad de evaluar su comportamiento y emitir los juicios correspondientes antes de pasar a su fabricación física.

Con base en lo anterior, con la información obtenida del análisis del proceso y la selección de componentes, se procedió a realizar el diseño del sistema mecatrónico propuesto para realizar la síntesis de nanopartículas metálicas por biorreducción. Utilizando como herramienta el software *Solidwoks versión 2014*; el cual es un software especializado de CAD/CAE.

Para esta fase del proceso de diseño, en primera instancia se realizaron los modelos de CAD para cada componente seleccionado, posteriormente se realizó el ensamble del sistema o modelo integral y finalmente, basado en la secuencia de pasos del método de síntesis por biorreducción propuesto por Rosano-Ortega (2009), ver anexo 4, se habilitaron o restringieron los movimientos requeridos por las operaciones especificadas. Las acciones realizadas para lograr esto se describen a continuación.

5.5.1 ELABORACIÓN DE MODELOS CAD PARA CADA COMPONENTE

De acuerdo a la tabla 5.6, son cuatro los componentes principales que integran al sistema 1) recipiente contenedor, 2) baño ultrasónico, 3) máquina centrífuga y 4) medio de almacenamiento. Con la información de los modelos propuestos y las dimensiones especificadas por el fabricante, anexo 2, se procedió a la elaboración de los modelos.

Se utilizó la secuencia propuesta por Gómez (2010, p.58) para modelado CAD en 3D mediante el software Solidworks:

- Selección de un plano de trabajo
- Croquización de la geometría bidimensional del objeto
- Acotación e inserción de relaciones geométricas
- Creación de la operación tridimensional

Los modelos construidos para cada componente se presentan en la figura 5.7.

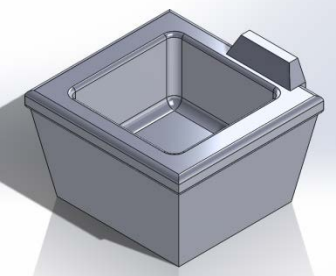
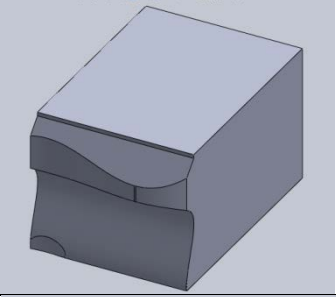
a).- Recipiente contenedor	
b).- Baño ultrasónico	
c).- Máquina centrífuga	
d).- Recipiente para almacenamiento	

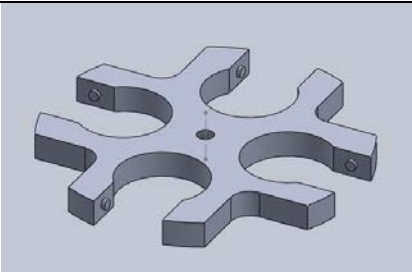
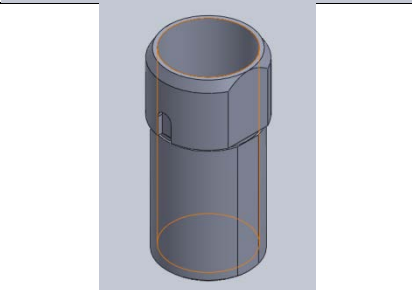
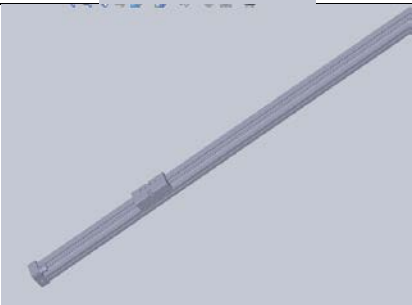
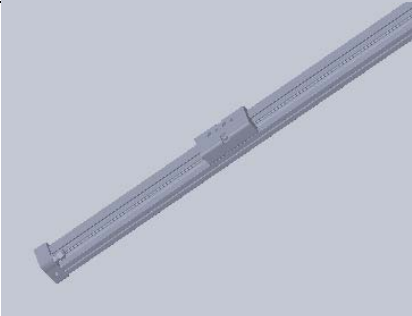
Figura 5.7. Modelos CAD de los componentes del sistema mecatrónico (Fuente: elaboración propia).

En la figura 5.7, se observan los modelos correspondientes a tres componentes: (a) recipiente contenedor, (b) baño ultrasónico y (c) máquina centrífuga; esto basado en lo establecido en la tabla 5.6, donde se indica que para el recipiente de almacenamiento (cuarto componente) se considera que es el mismo recipiente contenedor que se usa para almacenar el producto final de la síntesis.

De forma adicional a los cuatro componentes principales se elaboraron los elementos de fijación, conexión y sujeción necesarios para el ensamble del sistema. El tamaño de estos elementos se propuso en función de las dimensiones

fijas de los componentes principales y el acomodo necesario de estos para realizar el proceso de síntesis. La tabla 5.9 presenta los modelos construidos y su función dentro del sistema.

Tabla 5.9. Elementos de fijación, conexión y sujeción utilizados para el ensamble del sistema mecatrónico.

1.- Cabezal oscilante: Se utiliza junto con los vasos adaptadores como medio de transporte para los tubos de ensaye que contienen el medio de reacción.	
2.- Vaso adaptador: Se usa como medio de soporte para el manejo de los tubos de ensaye. Van acoplados al cabezal oscilante de forma mecánica y los tubos de ensaye se ubican en su interior.	
3.- Actuador lineal longitudinal: Se encarga del desplazamiento horizontal, para transportar el conjunto cabezal oscilante, vasos adaptadores y tubos de ensaye, y llevarlos a la ubicación de los dispositivos que realizan las operaciones principales de la síntesis inducida.	
4.- Actuador lineal vertical: Se encarga del desplazamiento vertical, para transportar el conjunto cabezal oscilante, vasos adaptadores y tubos de ensaye, y llevarlos a la ubicación dentro de los dispositivos que realizan las operaciones principales de la síntesis inducida.	

Teniendo elaborados todos los modelos de los componentes y elementos adicionales se procedió a la construcción del ensamble del sistema.

5.5.2 ENSAMBLE DEL SISTEMA

El ensamble realizado fue propuesto como un banco experimental que permita realizar el proceso de síntesis por biorreducción, por lo cual se consideró como parte fija la bancada de soporte y sobre ésta se montan todos los otros elementos que integran al sistema.

Para iniciar con la construcción del ensamble, se elaboró un diagrama esquemático que sirviera como referencia para la ubicación de los componentes. En la figura 5.7 se muestra de forma esquemática el posicionamiento de los componentes.

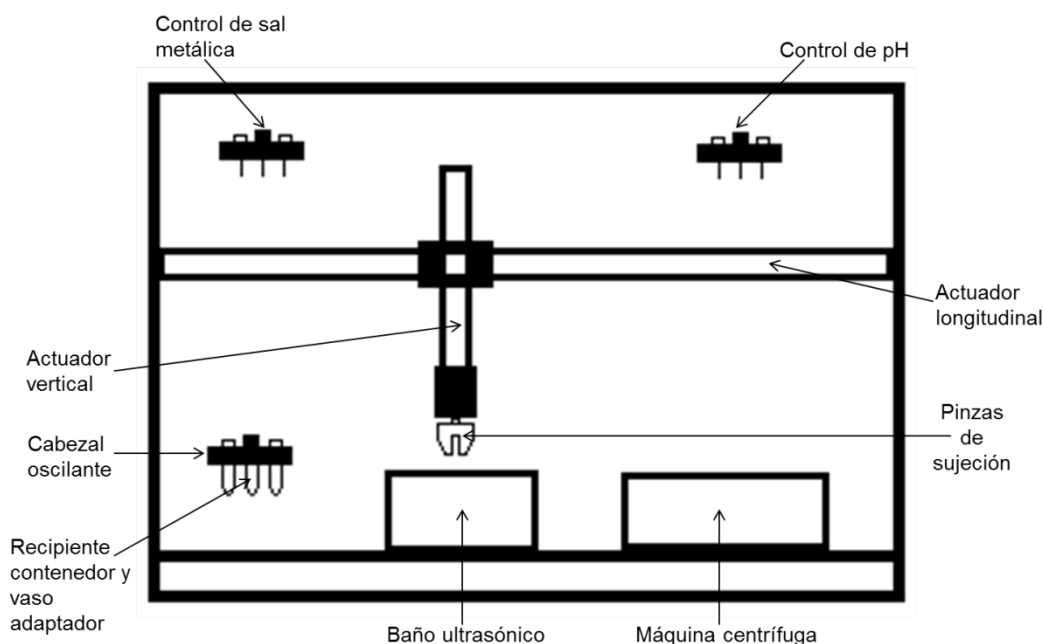


Figura 5.7. Esquema de la disposición de componentes para elaborar el ensamble del sistema mecatrónico (Fuente: elaboración propia).

Se observa en la figura 5.7 la ubicación probable de los componentes principales y algunos de los elementos adicionales, sin embargo el detalle de la disposición final de los componentes se muestra en el ensamble resultante.

De forma similar, en el ensamble final, se colocaron los puntos de control y verificación para el monitoreo, seguimiento y corrección de los parámetros de síntesis. Para ello se propone un sensor de pH, el cual se introduce en el medio de reacción para verificar el valor presente en el medio de reacción, para realizar la comparación contra el valor definido como parámetro de diseño para síntesis y en caso de ser necesario indicar la corrección que debe hacer para mantener constante el valor del pH en el medio de reacción. El ajuste se lleva a cabo adicionando solución buffer a valor indicado, mediante el accionamiento de las

válvulas correspondientes. La ubicación de estos puntos de verificación preventivos y correctivos se muestran en la figura 6.1 del capítulo de resultados.

Para la ubicación de los componentes se utilizaron relaciones de posición básicas, las cuales solo relacionan las características geométricas de los elementos a ensamblar y permiten el acomodo en las ubicaciones específicas, esto es parte de las funciones implícitas del software *Solidworks*.

El ensamble resultante se muestra en la sección de resultados, junto con la secuencia de movimientos.

5.6 FORMACIÓN AL PERSONAL EN LA MEJORA

Para esta sección, es importante resaltar que por tratarse específicamente del diseño del sistema mecatrónico, no se considera en esta fase del proyecto el punto correspondiente a la Formación al personal en la mejora; ya que en el proceso de automatización esto corresponde a la capacitación para el personal que opera la máquina o proceso que se automatiza. Requiriendo para ello los manuales de usuario y mantenimiento del equipo. Por lo anterior, en este punto solo se desarrolló una guía rápida; que proporcione al usuario potencial del sistema, la información necesaria para realizar la síntesis inducida de nanopartículas metálicas mediante el sistema mecatrónico propuesto.

La información correspondiente a la guía rápida puede ser consultada en el anexo 5, Guía rápida de usuario.

5.7 COMPROBACIÓN (VALIDACIÓN)

La etapa de validación del proyecto, fue desarrollada en dos vertientes principales; las cuales son:

- Simulación y análisis computacional del sistema mecatrónico
- Simulación y análisis computacional de nanopartículas a sintetizar

Para la validación del sistema mecatrónico, se utilizó el ensamble resultante en la sección anterior y el módulo de simulación de movimientos complementario *Solidworks motion*. Se realizó una comparación entre los movimientos permitidos en el sistema (grados de libertad) contra los especificados en el diagrama de secuencia de operaciones, con el propósito de validar el proceso de síntesis por biorreducción.

En el caso de la simulación y análisis de nanopartículas a sintetizar, se realizó mediante modelos atomísticos elaborados en el software *Materialstudio 5.5*, a partir de datos experimentales obtenidos de nanopartículas de plata y cobalto sintetizadas por el método de biorreducción propuesto por Rosano-Ortega (2009).

5.7.1 SIMULACIÓN Y ANÁLISIS COMPUTACIONAL DEL SISTEMA MECATRÓNICO

PRUEBA DE MOVIMIENTOS

Para verificar que el sistema mecatrónico diseñado realice los movimientos requeridos para la síntesis inducida de nanopartículas, fue necesario elaborar un esquema de los movimientos indicados en el diagrama de secuencia de operaciones. Este esquema se compone de la representación de los equipos y dispositivos seleccionados, tabla 5.6, y la secuencia de operaciones resultante del análisis de procesos, figura 6.1. En la figura 5.8, se muestra a detalle el diagrama esquemático utilizado para estas pruebas.

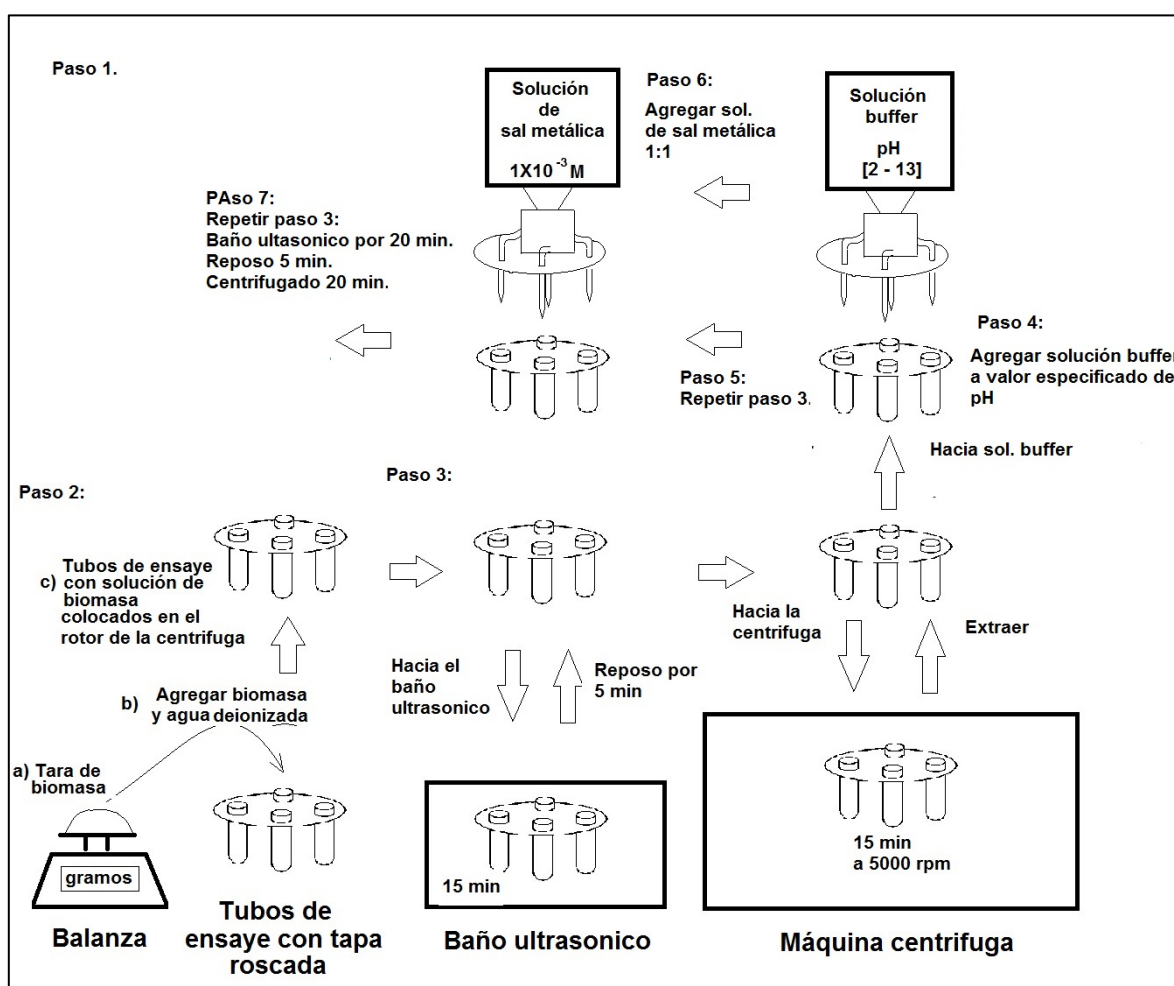


Figura 5.8. Movimientos y trayectorias a realizar por el sistema mecatrónico (elaboración propia).

La figura 5.8, muestra solo los movimientos, las trayectorias y el tiempo utilizado en las operaciones del proceso de síntesis a reproducir, apegado al método experimental propuesto por Rosano-Ortega (2009), por lo cual se excluyen las condiciones de inyección de flujo. El esquema de la figura 5.8 solo muestra los pasos 1 al 7 del método de síntesis por biorreducción, anexo 4; ya que son los usados para realizar la síntesis inducida de nanopartículas y el paso 8 se omite porque éste corresponde a la caracterización de las muestras.

En la sección de resultados se presenta la verificación de los movimientos; la cual se realizó usando el ensamble del sistema mecatrónico obtenido de la sección 5.5.

5.7.2 SIMULACIÓN Y ANÁLISIS COMPUTACIONAL DE NANOPARTÍCULAS

Para la construcción de los modelos atomísticos se consideró el procedimiento indicado en la sección 3.4 del capítulo 3, donde se menciona como requisito de inicio el contar con la geometría del sistema cristalino y a partir de esta realizar las simulaciones y cálculos para determinar las propiedades asociadas a las nanopartículas.

Se utilizó un modelo numérico computacional, basado en el método de la Teoría de Densidad Funcional (DFT), implementado en el módulo CASTEP del software *MaterialStudio* 5.5. Los conceptos de descripción pseudopotencial de la interacción electrón-ión, la aproximación de la supercelda con condiciones de frontera periódicas, las bases de onda plana, el uso extenso de la transformada rápida de Fourier (FFT), los esquemas iterativos para la consistente minimización electrónica y la implementación de los esquemas comunes de DFT para la correlación funcional de cambio, hacen que el modelo utilizado cuente con las características requeridas para los cálculos necesarios de esta investigación (Bedolla, 2013; 2013b).

Para la elaboración, simulación y análisis de los modelos se empleó la secuencia mostrada en la figura 5.9.

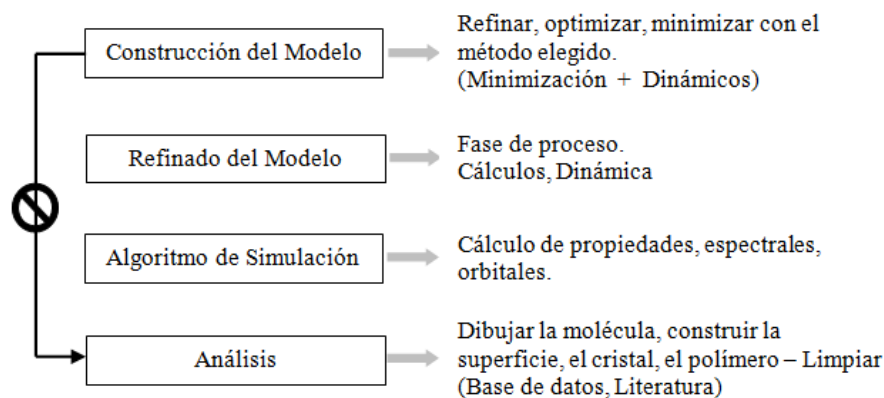


Figura 5.9. Pasos necesarios para simulación molecular (Accelrys, 2008).

Para la simulación y análisis de las nanopartículas y sus propiedades asociadas, fueron seleccionadas muestras de cobalto y plata; sintetizadas por biorreducción utilizando el método experimental propuesto por Rosano-Ortega (2009). Además, se consideraron específicamente las características de estructura y tamaño de celda unitaria de las nanopartículas seleccionadas.

Las nanopartículas de cobalto fueron seleccionadas para el proceso de simulación por sus propiedades magnéticas; las cuales las hacen interesantes para el campo de la mecatrónica en el desarrollo de sistemas sensitivos a campos magnéticos. Propiedades desarrolladas solo para nanopartículas con tamaños menores a 100 nm y forma esférica (Sargentelli, 2010).

En el caso de las nanopartículas de plata, se seleccionaron por su gran versatilidad en aplicaciones, son las nanopartículas metálicas mayormente utilizadas y se cuenta con amplia información de sus métodos de síntesis y propiedades (Lópezfuentes, 2013); lo cual permitió realizar la comprobación de resultados de ésta investigación con una amplia base de datos.

CONSTRUCCIÓN DEL MODELO

La construcción de los modelos se realizó a partir de los datos de celda unitaria correspondientes a nanopartículas de cobalto (CoNPs) y plata (AgNPs); los cuales se obtuvieron de mediciones experimentales previas realizadas a soluciones coloidales que contenían estas nanopartículas y que fueron obtenidas por biorreducción.

En la tabla 5.10, se muestran los valores de los parámetros de red y estructura cristalina utilizados para construir los modelos de celda unidad de las nanopartículas mencionadas; los cuales se obtuvieron de Rosano-Ortega (2009).

Tabla 5.10. Parámetros de red para la elaboración de modelos de celda unitaria de CoNPs y AgNPs.

Nanopartícula	Estructura cristalina	Parámetros de red					
		<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	α	β	γ
CoNPs	Hexagonal	2.503 Å	2.503 Å	4.060 Å	90°	90°	117.4 (62.6) °
AgNPs	Cúbico	5.462 Å	5.462 Å	5.462 Å	90°	90°	90°

Con los parámetros de red conocidos, tabla 5.10, se inició con la elaboración de los modelos en el software *Materialstudio 5.5*; para lo cual fue necesario establecer el grupo espacial correspondiente a la estructura cristalina identificada para cada tipo de nanopartícula, en la tabla 5.11 se presenta esta información.

Tabla 5.11. Estructura y grupo espacial para las CoNPs y AgNPs (International Union of Crystallography, 2014).

Nanopartícula	Estructura cristalina	Grupo espacial
Cobalto (Co)	Hexagonal	P6
Plata (Ag)	Cúbico	Fm-3m

Tomando como datos de entrada la información de las tablas 5.10 y 5.11, se elaboraron los modelos de celda unitaria para las CoNPs y AgNPs. Los resultados se muestran en la figura 5.10.

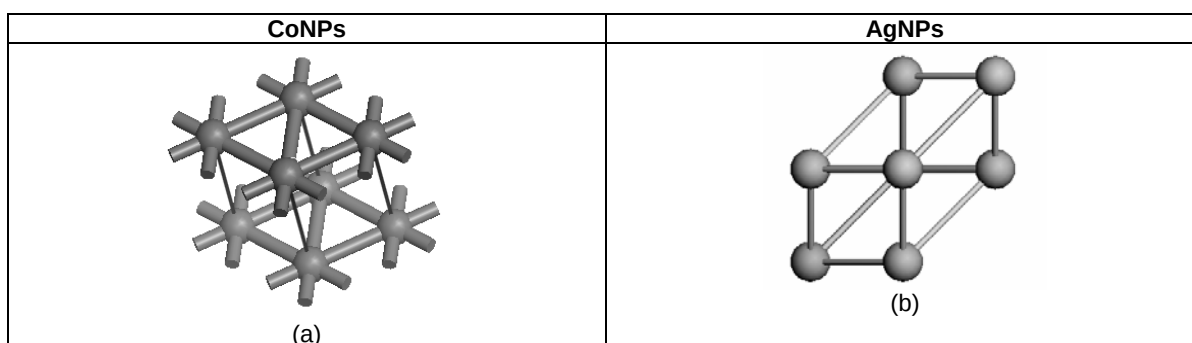


Figura 5.10. Modelos de celda unitaria para (a) CoNPs y (b) AgNPs (Fuente: elaboración propia).

Para la simulación es necesario utilizar la celda unitaria básica de la nanopartícula a analizar; por lo cual en la figura 5.10 se muestra para las CoNPs el modelo de un tercio de la estructura hexagonal característica, mientras que para el caso de la celda unitaria de AgNPs el modelo cúbico es la representación básica.

Para una descripción amplia del proceso de elaboración de modelos atomísticos de celda unidad ver el anexo 3 (proceso para la elaboración de modelos atomísticos).

REFINADO DEL MODELO

Para el estudio de las propiedades asociadas a las nanopartículas y su tamaño, se realizó en primera instancia una optimización de la geometría de la celda unitaria básica, esto para encontrar su configuración más estable o de mínima energía; lo cual se logra mediante un proceso iterativo para optimizar los parámetros de red.

El proceso de optimización comienza tomando como valor de convergencia la energía necesaria para mantener la geometría original de la celda unidad, y la compara con el nuevo valor de energía que se obtiene al cambiar la magnitud de los parámetros de red. Este proceso iterativo continúa hasta que la diferencia entre la energía del último modelo calculado y el anterior cumpla el criterio de convergencia establecido. El criterio de convergencia utilizado en el presente estudio es el cambio de energía por átomo (total energy convergence tolerance) de $0.1000\text{E-}04$ eV/átomo) (Cordoba, 2012; Accelrys, 2008).

Las magnitudes optimizadas de la estructura se obtuvieron mediante proceso iterativo con el modelo y utilizando el criterio de convergencia mencionado. En la figura 5.11, se muestra como ejemplo el proceso de optimización para el modelo de celda unitaria de las nanopartículas de cobalto.

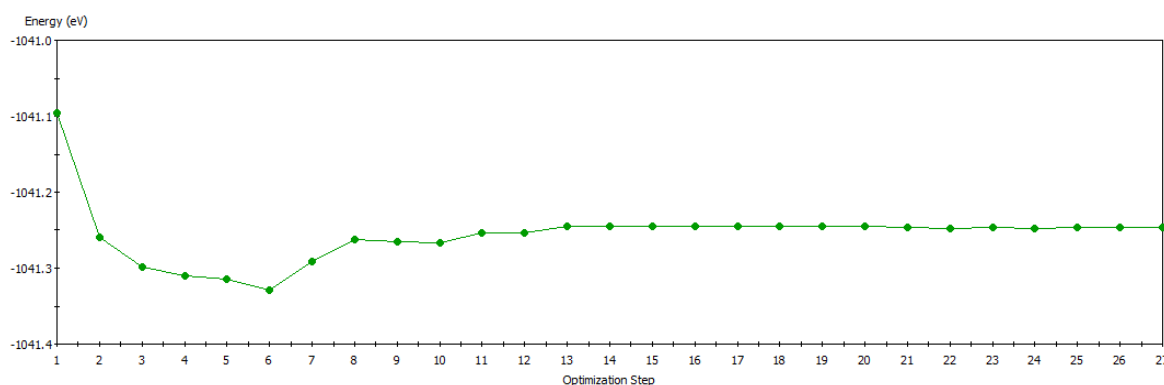


Figura 5.11. Pasos de optimización CoNPs (Fuente: elaboración propia).

Se observa en la figura 5.11 que para las nanopartículas de cobalto (CoNPs) fueron 27 iteraciones las empleadas para lograr cumplir el criterio de convergencia, mientras que para el caso de las nanopartículas de plata (AgNPs) 30 iteraciones fueron requeridas. Lo anterior indica que la diferencia entre las magnitudes experimentales de los parámetros de red, respecto a los valores optimizados para la configuración de mínima energía, es menor al 10% tal como se muestra en la tabla 5.12 y 5.13.

Tabla 5.12. Comparación de datos geométricos de la celda unitaria para CoNPs

Longitud [Å]	Datos experimentales (Rosano, 2009)	Datos optimizados por simulación	% diferencia
a	2.503	2.337931	6.6
b	2.503	2.337931	6.6
c	4.060	4.711135	16

Se observa que la diferencia entre los datos experimentales y la simulación numérica, ver Tabla 5.12, para $a=b$ es de 6.6 %, menor al 10 % considerado como límite aceptable para una aproximación mediante software (Bedolla, 2002). Para el caso de $c=16\%$ se puede atribuir a la diferencia entre el valor del ángulo $\gamma=117.4^\circ(62.6^\circ)$ y los 120° utilizados para la simulación.

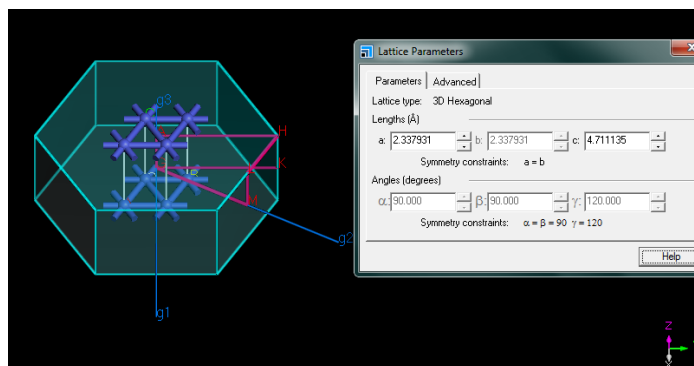
De forma análoga se procedió para el análisis de las nanopartículas de plata (AgNPs), los resultados obtenidos se presentan en la tabla 5.13.

Tabla 5.13. Comparación de datos geométricos de la celda unitaria para AgNPs

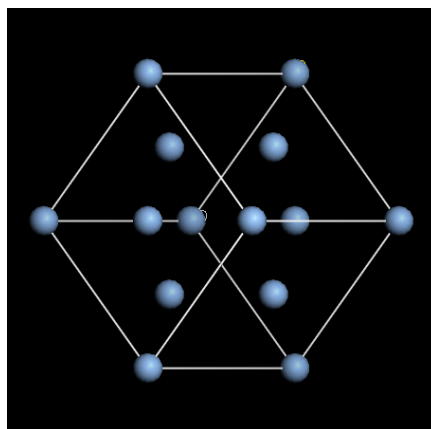
Longitud [Å]	Datos experimentales (Bedolla, 2014)	Datos optimizados por simulación	% diferencia
a	5.462	5.298	3 %
b	5.462	5.298	3 %
c	5.462	5.298	3 %

Por tratarse de una estructura cúbica para la plata, solo se muestran los valores correspondientes a las longitudes de la celda unidad. Los porcentajes de diferencia, última columna de la tabla 5.13, guardan un comportamiento similar al indicado para las CoNPs.

Los modelos de las estructuras optimizadas para las nanopartículas de cobalto y plata son las mostradas en la figura 5.12.



(a)



(b)

Figura 5.12. Valores óptimos para la estructura optimizada de (a) CoNPs y (b) AgNPS (Fuente: elaboración propia).

Finalmente, de los datos obtenidos del proceso de optimización, se concluye que las mediciones realizadas y los métodos utilizados en la fase experimental de síntesis, arrojan valores de los parámetros de red (celda unitaria) con diferencias mínimas (ver porcentajes tabla 5.12 y 5.13) respecto a los modelos computacionales realizados y sometidos al proceso de optimización de parámetros de red. Por lo tanto, las estructuras definidas para las nanopartículas se consideran correctas y los modelos optimizados pueden ser utilizados para el cálculo de las propiedades físicas.

ALGORITMO DE SIMULACIÓN

Para la simulación, análisis y cálculo de las propiedades de interés (sección 3.5) se utilizó el algoritmo mostrado en la figura 5.13.

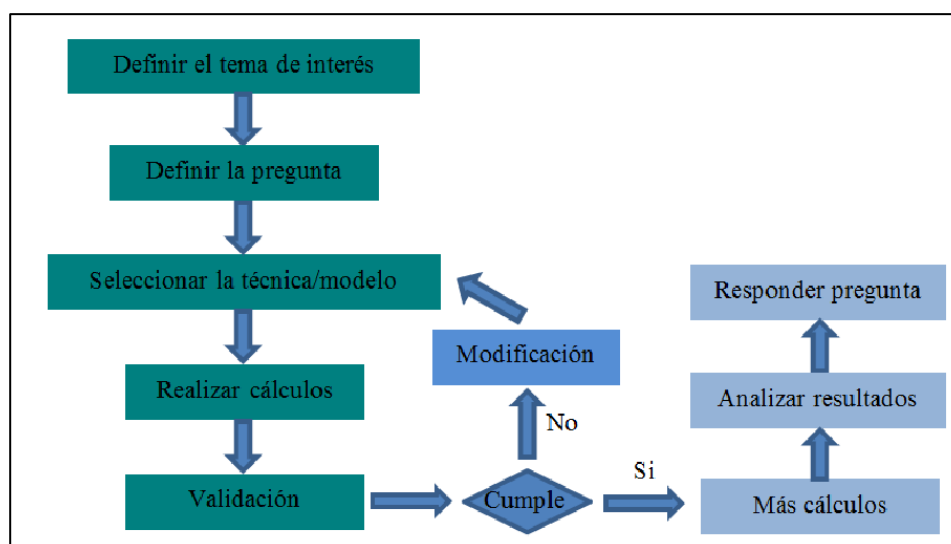


Figura 5.13. Algoritmo de simulación (Bedolla, 2014).

Tal como se indicó en la sección 3.4.1, y utilizando el algoritmo de la figura 5.13, se realizó el cálculo de la energía total como función del volumen $E(V)$ de la celda primitiva optimizada y mediante la ecuación de estado de Birch-Murnaghan se determinaron las propiedades del estado fundamental como las constante de red (a_0), el módulo volumétrico (B_0), entre otras. El cálculo de estas propiedades se muestra de forma amplia en la sección 5.8; la corresponde a la aplicación propuesta de nanopartículas.

Esta sección fue desarrollada mediante el módulo *CASTEP* del software *Materialstudio 5.5*; en el cual se introduce el tipo de análisis a realizar y se especifican las propiedades de interés a calcular.

El módulo de configuración y ejecución para el cálculo se muestra en la figura 5.13.

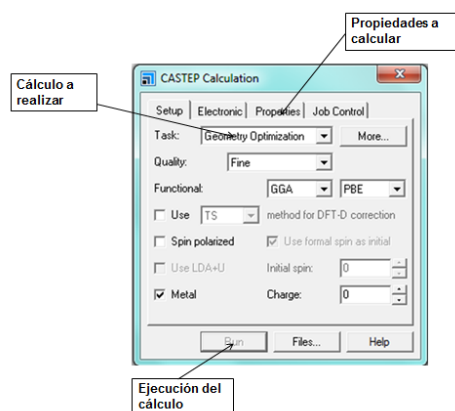


Figura 5.13. Configuración y ejecución del módulo *CASTEP* (Accelrys, 2008)

Como parte final se ejecuta el cálculo y se procede al análisis de los resultados obtenidos; éstos se observan en el visor del proyecto y contienen la estructura final optimizada, el proceso iterativo para la optimización, la información de entrada del modelo y finalmente, para cada propiedad calculada existen archivos *castep* y *param* (especificar que pertenece al software).

ANÁLISIS

El análisis de los resultados fue realizado con base en la fundamentación teórica descrita en la sección 3.4 y 3.5 del capítulo 3.

En el caso de las propiedades calculadas, el análisis se enfocó en las propiedades mecánicas conferidas a las nanopartículas; principalmente su resistencia al desgaste y la dureza superficial. Esto en función de la aplicación proyectada para las nanopartículas, en específico para su aplicación en el aumento de resistencia superficial en recubrimientos de superficies metálicas.

Las nanopartículas utilizadas fueron cromo en su estado basal y dos derivados, la tabla 5.14 muestra las nanopartículas consideradas.

Tabla 5.14. Parámetros de red de nanopartículas de cromo (Cr(0)), óxido de cromo (Cr₂O₃) y carburo de cromo (Cr₃C₂).

Nanopartículas	Autor	Estructura	Parámetros de red			Grupo espacial
Cr(0)	Rosano-Ortega (2009)	Cúbica bcc	A= 2.8 Å	b = 2.8 Å	c = 2.8 Å	Im3m
Cr ₂ O ₃	Farzane (2011)	Hexagonal	a=4.952 Å		c = 13.8178 Å	R3-c
Cr ₃ C ₂	(Gasik, 2013)	Ortorrómica	a = 2.821 Å	b = 5.52 Å	c = 11.46 Å	Pnam

Con los datos mostrados en la tabla 5.14 y siguiendo el procedimiento para la implementación de un modelado y análisis atómico, sección 5.7.2 del presente capítulo, se procedió a modelar y simular las estructuras básicas de las nanopartículas y calcular las propiedades de interés. Los modelos computacionales, así como los resultados de propiedades calculadas se presentan en la sección 6.4.1 del capítulo 6.

5.8 APLICACIÓN

En la presente sección, se detalla la información de las actividades realizadas en el desarrollo de la potencial aplicación de nanopartículas metálicas para la elaboración de recubrimientos superficiales. Lo anterior, se realizó como becario dentro del proyecto, titulado "PROBLEMA DE CONTACTO ENTRE ELEMENTOS CÓNICOS DEFORMABLES CON SU POSIBLE APLICACIÓN INDUSTRIAL", financiado por el CONACYT, con número de registro 102025, durante el periodo noviembre 2014 a marzo 2015.

Las actividades realizadas se centran en el desarrollo de una propuesta de mejora de las propiedades superficiales para elementos mecánicos en contacto, mediante la aplicación de recubrimientos metálicos nanoestructurados. La finalidad en este estudio fue determinar las propiedades de dureza y resistencia al desgaste de superficies recubiertas con nanopartículas del metal de transición cromo (Cr) y dos de sus derivados, apoyado esto mediante simulación atómica y las teorías de análisis para recubrimientos superficiales nanoestructurados.

Con la fundamentación teórica, basada en la revisión de estado del arte, herramientas computacionales como el software *MaterialStudio 5.5* y la síntesis por diseño de nanopartículas proyectada mediante el sistema mecatrónico propuesto, se desarrolló el análisis de las propiedades superficiales conferidas a

elementos mecánicos cuando se aplican sobre éstos recubrimientos hechos con materiales nanoestructurados. Las propiedades fundamentales de dureza y resistencia al desgaste se utilizan como parámetro para la evaluación de la mejora en las características superficiales.

Cabe resaltar que la contribución realizada, al proyecto CONACYT 102025, fue aceptada y se incluyó dentro del informe final de la investigación; contando con la liberación respectiva, la cual se muestra como parte de los documentos probatorios en el apartado de Evidencia de la productividad académica resultado del proyecto de tesis.

5.8.1 DETERMINACIÓN DE PARÁMETROS REQUERIDOS PARA LA ELABORACIÓN DE RECUBRIMIENTOS SUPERFICIALES NANOESTRUCTURADOS A BASE DE CROMO

En primera instancia se estableció, mediante revisión del estado del arte, las condiciones necesarias para realizar recubrimientos a superficies metálicas con materiales de aporte nanoestructurados, como las nanopartículas metálicas de cromo. También se analizaron los métodos de fabricación utilizados, tanto para obtener las nanopartículas como para la elaboración de los recubrimientos; con lo cual se fundamenta la potencial aplicación de los materiales nanoestructurados a base de cromo para la mejora de propiedades superficiales de elementos mecánicos en contacto.

Se encontró, para el caso de las nanopartículas usadas para elaborar el recubrimiento, que el tamaño de la nanopartícula es el parámetro principal a considerar; por lo cual se definió en primera instancia el rango de tamaño utilizado para la elaboración de recubrimientos a superficies metálicas, utilizando nanopartículas a base de cromo como material de aporte.

Tamaño de la nanopartícula

Para los recubrimientos con materiales nanoestructurados, los polvos y nanopartículas son de los utilizados con mayor frecuencia, bajo las diferentes técnicas de adsorción de materiales nanoestructurados, ver tabla 5.15. Se conoce con certeza que las nanopartículas con un tamaño controlado y composición tienen interés fundamental y tecnológico (Alarifi, 2009).

Por lo anterior, basándose en literatura técnica especializada, se estableció el rango de tamaños utilizado para la elaboración de recubrimientos superficiales a base de cromo, la información se muestra en la tabla 5.15.

Tabla 5.15. Tamaño característico de las nanopartículas de cromo utilizados para recubrimientos superficiales.

Nanopartícula	Referencia	Tamaño de la nanopartículas
Carburo de cromo (Cr_3C_2)	Mahajan (2015)	30 – 40 nm.
	Zhao (2015)	32 nm
Óxido de cromo (Cr_2O_3)	Jaswal (2014)	20 – 70 nm Estructura hexagonal
	Farzane (2011)	25 – 70 nm Estructura hexagonal
	Rodolfo (2014)	16 nm
	Gupta (2014)	100 nm
Cromo (Cr (0))	Gidikova (2014)	10 – 50 nm
	Son (2004)	6 nm
	Rosano-Ortega (2009)	5 nm

De la tabla 5.15 se observa que los rangos de tamaño promedio para la elaboración de recubrimientos son de [30–40] nm para el Cr_3C_2 , [20–70] nm para Cr_2O_3 y [10–50] nm para Cr (0). Lo cual simplifica la elaboración de un recubrimiento de capa única o monocapa; esto a causa que para los recubrimientos superficiales formados de materiales nanocompuestos, por ejemplo las nanopartículas de Cr_3C_2 , y Cr_2O_3 , se ha encontrado que en tamaños de grano entre 10 -100 nm, ofrecen las mismas características que los recubrimientos formados por nanocapas múltiples (Leyland, 2000).

Con base en lo anterior y para obtener nanopartículas con tamaños dentro de los rangos mencionados, fue necesario determinar los parámetros de síntesis para la obtención de estas nanopartículas; considerando que, el método de preparación determina no sólo las características de los productos, como el tamaño y la forma, sino también sus propiedades físicas (Alarifi, 2009). Por ello la importancia del método para la producción de los materiales nanoestructurados y los recubrimientos mismos.

Parámetros de síntesis

La preparación del material nanoestructurados es el primer paso para la elaboración de recubrimientos (He, 2002). A los procesos para la obtención de los materiales nanoestructurados se les conoce con el nombre de métodos o procesos de síntesis.

En el caso particular de esta investigación el método de síntesis empleado es por biorreducción utilizando como agente reductor biomasa extraída del lirio acuático y proyectando realizar la síntesis mediante el sistema mecatrónico propuesto. Por lo tanto, los parámetros de síntesis a determinar son los indicados en la tabla 5.7, y sus valores propuestos son los mostrados en la tabla 5.16.

Se consideraron exclusivamente nanopartículas de cromo, ya que estas se han obtenido de forma experimental mediante el método de biorreducción desarrollado por Rosano-Ortega (2009); el cual es la base para el diseño del sistema mecatrónico que emule este proceso de síntesis. Y la manipulación de los parámetros tiene por objetivo el control en el tamaño de la nanopartícula para lograr el requerido en la elaboración de recubrimientos superficiales a base de cromo, indicados en la discusión de la tabla 5.15.

Los valores de los parámetros para la síntesis por diseño de nanopartículas de cromo con tamaños entre 10 – 100 nm recomendados son los mostrados en la tabla 5.16.

Tabla 5.16. Parámetros para síntesis por diseño de nanopartículas de Cr.

Parámetro	Valor
pH	6
Concentración de sal metálica	< 1mM
Concentración de biomasa	< 1 mL/ 1 mL de sol. de sal metálica
Temperatura de reacción y crecimiento	Ambiente (cercana a 36 °C)

Los valores de los parámetros fueron determinados mediante el uso de la figura 5.4, para el pH, una combinación de la tabla 6.1 y de la figura 6.2 para los tres parámetros restantes; cuya resultante es un aumento en el tamaño de las nanopartículas con valor entre 10 – 100 nm; el cual es requerido para la elaboración de los recubrimientos.

Una vez determinados los parámetros de síntesis que den como resultados nanopartículas de cromo con el rango de tamaño deseado, se procedió al cálculo de las propiedades de interés en recubrimientos superficiales.

Es importante indicar que para las nanopartículas de óxido de cromo (Cr_2O_3) y carburo de cromo (Cr_3C_2), no se establecieron parámetros de síntesis; esto a causa de ser nanomateriales considerados para futuros procesos de síntesis. Sin embargo, al ser nanopartículas de uso frecuente en la elaboración de recubrimientos, fueron también considerados para determinar las propiedades de interés mediante el modelado atomístico y simulación.

5.8.2 ELABORACIÓN DE LOS MODELOS ATOMÍSTICOS

El arreglo utilizado para el análisis numérico de recubrimientos superficiales a base de cromo, consistió en un arreglo formado por nanopartículas de cromo $\text{Cr}(0)$, óxido de cromo Cr_2O_3 y carburo de cromo Cr_3C_2 , sobre un sustrato de acero estructural AISI 1020. Para cada modelo simulado se determinaron los parámetros de red optimizados, las constantes elásticas (C_{ij}), el módulo

volumétrico (B), el módulo de corte (G), el módulo de Young (E), la relación de Poisson (ν) y finalmente, una combinación de estos para el cálculo de la dureza y resistencia al desgaste.

Cálculos de los parámetros de red

Para el análisis de las propiedades mecánicas de interés, se determinaron en primera instancia los parámetros de red de la estructura cristalina para las nanopartículas de $\text{Cr}(0)$, Cr_2O_3 y Cr_3C_2 , mediante un proceso de optimización de la celda unitaria. Los valores de los parámetros de red, encontrados al finalizar el proceso de optimización, son los correspondientes a la estructura con mayor estabilidad y cuyos valores deben tener correspondencia con los datos de referencia. Los valores calculados son los contenidos en la tabla 5.17.

Tabla 5.17. Valores de parámetros de red optimizados y su comparación contra datos de referencia.

Nanopartícula	Estructura	Grupo espacial	Parámetros de red calculados Å			Datos de referencia *	% diferencia
			a	b	c		
$\text{Cr}(0)$	Cúbico bcc	(229) $\text{Im}3\text{m}$	2.872	2.872	2.872	(Rosano-Ortega, 2009) $a=b=c= 2.8 \text{ Å}$	2.57
Cr_2O_3	Rombohedral	(167) $\text{R}3\text{c}$	4.961	4.961	13.552	Farzane (2011) $a=4.952 \text{ Å}$, $c = 13.8178 \text{ Å}$	0.02 (a,b) 2 (c)
Cr_3C_2	ortorrómbico	Pnam	5.485	2.789	11.474	(Gasik, 2013) $A=0.5545$, $b=0.283$, $c=1.147 \text{ nm}$	1.0(a), 1.44(b), 0.03(c)

*Los datos de referencia son tomados de la tabla 5.13.

Se observa en la tabla 5.17, que para el caso de las nanopartículas de cromo analizadas, se encontró que la diferencia entre los datos de referencia y los determinados numéricamente es de 2.57%, 2% y 1.5% para las nanopartículas de $\text{Cr}(0)$, Cr_2O_3 y Cr_3C_2 respectivamente. Lo cual indica que los modelos optimizados son adecuados para realizar los análisis de las propiedades físicas y mecánicas de arreglos atómicos que contengan estas nanopartículas. De igual manera se infiere que las nanopartículas sintetizadas por biorreducción, utilizando lirio acuático, presentan características similares a las utilizadas para elaborar recubrimientos superficiales en otras investigaciones (Bedolla, 2015).

Cálculo de las constantes elásticas

Una vez definidas las estructuras básicas de celda unitaria, se calcularon las constantes elásticas correspondientes a cada modelo de nanopartícula. Para esto, se implementó el modelo en el módulo *CASTEP* del software *Material Studio* y el

análisis se realizó mediante la aproximación de primeros principios y la teoría de funcionales de densidad (DFT), tal como se mencionó en el estado del arte para la implementación de modelos para simulaciones atomísticas. Lo anterior con la finalidad de determinar los valores del módulo volumétrico (B) y de corte (G) correspondientes a cada tipo de nanopartícula analizada; valores que son necesarios para el cálculo de la dureza y resistencia al desgaste para recubrimientos formados por estas nanopartículas.

En la tabla 5.18, se presentan los valores calculados para las constantes elásticas de las nanopartículas correspondientes.

Tabla 5.18. Valores de las constantes elásticas calculados mediante simulación.

Nanopartícula	C_{11}	C_{12}	C_{13}	C_{22}	C_{23}	C_{33}	C_{44}	C_{55}	C_{66}
Cr(0)	428.5	55.2					93.2		
Cr ₂ O ₃	359.91	264.69	218.45			309.45	143.28		260.74
Cr ₃ C ₂	447.5	218.8	242.9	546.2	216.9	474	235.7	114.4	239.3

La tabla 5.18, muestra los valores calculados de las constantes elásticas para los modelos de nanopartículas seleccionadas; la variación entre el número de constantes depende del tipo de estructura cristalina considerada para cada partícula.

La combinación de los valores de las constantes elásticas, para el cálculo de las propiedades mecánicas se realizó mediante el conjunto de ecuaciones 3.8 a la 3.11 del capítulo 3 y del método Voigt-Reuss-Hill (Yu, 2014) para el cálculo del módulo volumétrico (B) y de corte (G). Los valores calculados se muestran en la tabla 5.19.

Tabla 5.19. Valores del módulo volumétrico (B) y el módulo de corte (G).

Nanopartícula	B (GPa)	G (GPa)
Cr(0)	178.6	115
Cr ₂ O ₃	267.47	119.125
Cr ₃ C ₂	312.9	162

Con los valores calculados de los módulos volumétrico (B) y de corte (G), tabla 5.16, se determinaron los valores correspondientes a las propiedades mecánicas como el módulo de elasticidad (E), la relación de Poisson (ν) y la dureza teórica (HV) de las nanopartículas estudiadas.

Los resultados y el análisis se muestran en el capítulo 6.

CAPÍTULO 6

PRESENTACIÓN Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS

En este capítulo se presentan los resultados correspondientes a las etapas consideradas para el proceso de diseño del sistema mecatrónico de síntesis por biorreducción para la obtención de nanopartículas metálicas. Los resultados se encuentran ordenados siguiendo el procedimiento para la automatización de procesos productivos, mostrado en el capítulo 5. Se comienza por los resultados obtenidos del análisis del proceso a automatizar, donde se muestran los elementos necesarios para el inicio del diseño y automatización del sistema para realizar la síntesis, continuando con la propuesta de soluciones y consideraciones de costo para el desarrollo del sistema; y en consecuencia los resultados del ensamble del dispositivo, como una etapa de instalación de forma virtual del sistema; el cual permita en la última instancia del proyecto validar el proceso de síntesis.

6.1. RESULTADOS DEL ANÁLISIS DEL PROCESO

Como resultados del análisis y documentación del proceso de síntesis por biorreducción para la obtención de nanopartículas metálicas, desarrollado en el capítulo 5, se obtuvo el diagrama de secuencia de operaciones; así como se definió también el tipo de biomasa utilizada con mayor frecuencia.

6.1.1 DIAGRAMA DE SECUENCIA RESULTANTE

Un diagrama de secuencia es considerado como el punto de partida para la automatización de cualquier proceso productivo; ya que en este se muestra el orden de las operaciones realizadas en función del tiempo; además que su elaboración y seguimiento permiten validar la automatización del proceso en cuestión.

Para la construcción del diagrama se colocaron en orden descendente, sobre el eje vertical, las operaciones necesarias para realizar la síntesis inducida de nanopartículas (tabla 5.2), en la parte superior del diagrama fueron colocados los elementos físicos usados en cada etapa, de izquierda a derecha y en orden de uso, de acuerdo a la tabla 5.4; así mismo, en el eje horizontal se tiene el tiempo estimado en el que interviene cada dispositivo dentro de las operaciones de la síntesis inducida.

Con el diagrama de secuencia completo, se estableció el tiempo que se ocupa para realizar la síntesis inducida de nanopartículas mediante el método de biorreducción propuesto, de forma que se pueda comparar y evaluar su pertinencia contra los métodos físicos y químicos utilizados con mayor frecuencia para la obtención de nanopartículas metálicas.

De igual forma se ubicaron los puntos de verificación y control necesarios para el monitoreo y ajuste de los parámetros de síntesis; obteniendo así la operación y posición de éstos para el diseño del sistema mecatrónico.

En la figura 6.1, se presenta el diagrama de secuencia resultante.

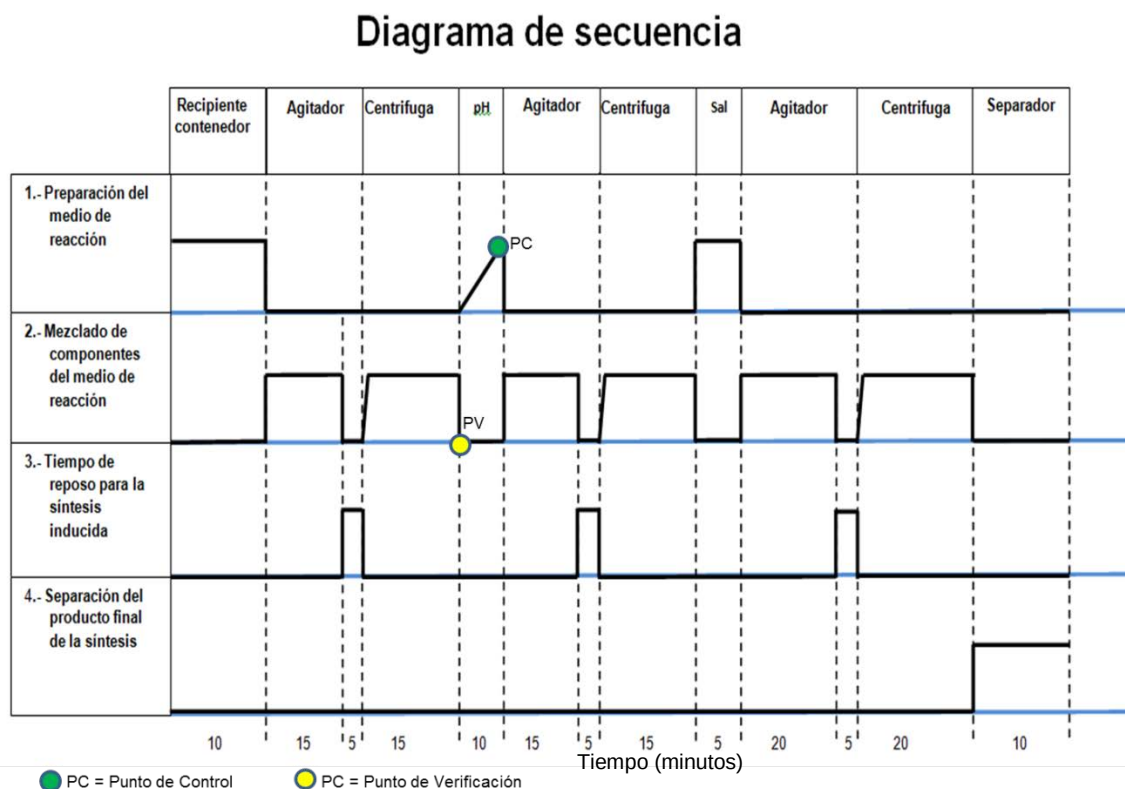


Figura 6.1. Diagrama de secuencia de operaciones para la automatización del proceso de biorreducción para la síntesis inducida de nanopartículas metálicas (Fuente: elaboración propia).

Se observa en la figura 6.1 que el tiempo empleado para la síntesis inducida de nanopartículas es de 150 min aproximadamente (2.5 h); considerando las cuatro operaciones básicas, tabla 5.2, y las propuestas de mejora, tabla 5.3.

Para establecer la pertinencia del método de síntesis de nanopartículas metálicas por biorreducción, tomando como valor de comparación el tiempo empleado en la síntesis, se realizó un contraste con los métodos físicos y químicos utilizados con mayor frecuencia para la síntesis de nanopartículas similares. Los resultados de la comparación se muestran en la tabla 6.1.

Tabla 6.1. Tiempo utilizado para realizar síntesis de nanopartículas metálicas por diferentes métodos.

Referencia	Ruta	Método de síntesis	Nanopartículas metálicas	Tamaño promedio	Tiempo de síntesis
Rosano-Ortega, 2009	Biológica	Biorreducción	Ag, Au, Co, Cr, Mn	3 -10 nm 10 -100 nm	2.5 h
Gan, 2012		Biorreducción	Au	10 -100 nm	2 h y 10 min
Belmares-Perales, 2015		Fisicoquímica verde	Au, Ag y Fe	10 -100 nm	30 min a 24 h
Trejo, 2005	Física	Molienda	MoO ₃	170– 300 nm	3 – 12 h la etapa estable para nanopulvos de 170 nm.
López-Cota, 2014		Molienda	Lantánidos	>100 nm	24 h para los de radio iónico pequeño. 30 h para los de mayor radio iónico.
Amendola, 2009		Ablación laser	Ag, Au, Cu	10 – 40 nm, en agua. 5 - 15 nm en solventes organicos.	20 min, a 10 Hz, laser a nano o femto segundos.
Morales, 2009	Química	Sol-gel	Ag ⁰	10 -100 nm	15 min
Blandon, 2015		Electrolisis	Ag ⁰	10 -100 nm	50 min

De los valores mostrados en la tabla 6.1, se encontró que, el tiempo de síntesis para la obtención de nanopartículas metálicas por biorreducción utilizando biomasa como agente reductor, es un periodo razonable; comparado contra otras propuestas de síntesis biológica, por medios físicos y químicos; teniendo como criterio de comparación una producción de nanopartículas estimada de 1 – 5 mg/síntesis en laboratorio (Amendola, 2009) para métodos biológicos y químicos, ya que para la molienda la producción se determina en relación masa_de_bolas/masa_de_material con un valor típico de 10:1 (López-Cota, 2014).

Para la síntesis por métodos biológicos (Gan, 2012; Belmares-Perales, 2013) un intervalo de tiempo que va de 30 min a 24 h; quedando el método propuesto por Rosano-Ortega (2009), con un valor de 2.5 h, cercano al límite inferior del intervalo de tiempo citado.

En el caso de los métodos físicos como la molienda el intervalo de síntesis para nanopartículas está en el rango de horas, por causa de las condiciones propias del proceso (ver fundamentación teórica), siendo de 3 (Trejo, 2005) a 30 h (López-Cota, 2014); por lo cual, los métodos biológicos se encuentran abajo del límite inferior del intervalo señalado. Para el método de ablación laser, se observa que el tiempo empujado en el proceso de síntesis, 20 min, es 5 veces menor que el usado para el método biológico y cercano al utilizado en el químico; sin embargo, la complicación para el uso extenso de este método en la producción masiva radica en el costo que representa el sistema laser (Amendola, 2009).

En cuanto a los métodos químicos, se encontró que el tiempo utilizado está en el rango de los minutos, lo cual indica que son los más rápidos para la síntesis de nanopartículas; sin embargo, se deben considerar las implicaciones prácticas del proceso (ver en la justificación) comparadas con el método de síntesis biológica.

Por lo anteriormente descrito, se puede concluir que el método de síntesis biológica es factible de utilizarse para la producción de nanopartículas; esto con base en la comparación y discusión de la tabla 6.1,

6.1.2 TIPO DE BIOMASA

La biomasa usada con mayor frecuencia es la que se extrae de plantas, ver tabla A-2. Sin embargo, como se puede observar la mayoría de las plantas listadas son de uso común por el ser humano, ya sea como alimento en el caso de las frutas o como forraje para alimentar ganado; lo cual compromete su uso para fines de síntesis a gran escala.

De la revisión de la tabla A-1, se obtuvo que las características principales observadas para la biomasa y requeridas para el proceso de síntesis por biorreducción son las listadas en la tabla 6.2.

Tabla 6.2. Biomasa utilizada con mayor frecuencia en biosíntesis.

Tipo de biomasa	Método de obtención	Presentación	Tamaño de grano	Observaciones
Obtenida de plantas o de partes de estas	- Recolección - Lavado - Picado (corte en piezas pequeñas) - Secado - Molienda - Almacenamiento	Polvo fino	10 – 100 micras	Ver referencias en tabla A-2 y A-3.

De la información contenida en la tabla 6.2, se concluye que la biomasa extraída del lirio acuático (*Eichhornia crassipes*) cumple con las características de método de obtención, presentación final de la biomasa y tamaño del grano de polvo (Rosano-Ortega, 2009; Munive-Olarte, 2014). Por lo cual, se puede utilizar como agente reductor en el proceso síntesis inducida por biorreducción para la obtención de nanopartícula metálicas mediante el sistema mecatrónico diseñado.

Finalmente, para la biomasa extraída de lirio acuático, es importante resaltar que de las propuestas de síntesis por biorreducción revisadas (tabla A-2 y A-3), no se encontró evidencia del uso de plantas consideradas como maleza para la obtención de biomasa; por lo cual, la propuesta de utilizar plantas de éste tipo cobra una importancia mayor y potencia su uso como materia prima en el proceso de síntesis de nanopartícula por biorreducción.

6.2. RESULTADOS DE LA BÚSQUEDA DE SOLUCIONES

Una vez establecidos los dispositivos y equipos necesarios para el diseño del sistema mecatrónico de síntesis de nanopartículas metálicas por biorreducción, tabla 5.4, las especificaciones de operación, tabla 5.5 y 5.6; así como el diagrama de secuencia de las operaciones, figura 6.1, se contó con los elementos necesarios para elaborar la propuesta de diseño del sistema, los resultados obtenidos se presentan a continuación:

6.2.1 SISTEMA PROPUESTO

En primera instancia, como propuesta de solución, se presenta el diagrama esquemático resultante para el diseño propuesto, en el cual se involucró a los dispositivos y equipos seleccionados, tabla 5.4, las variables de diseño, tabla 5.7 y el diagrama de secuencia de operaciones de la figura 6.1.

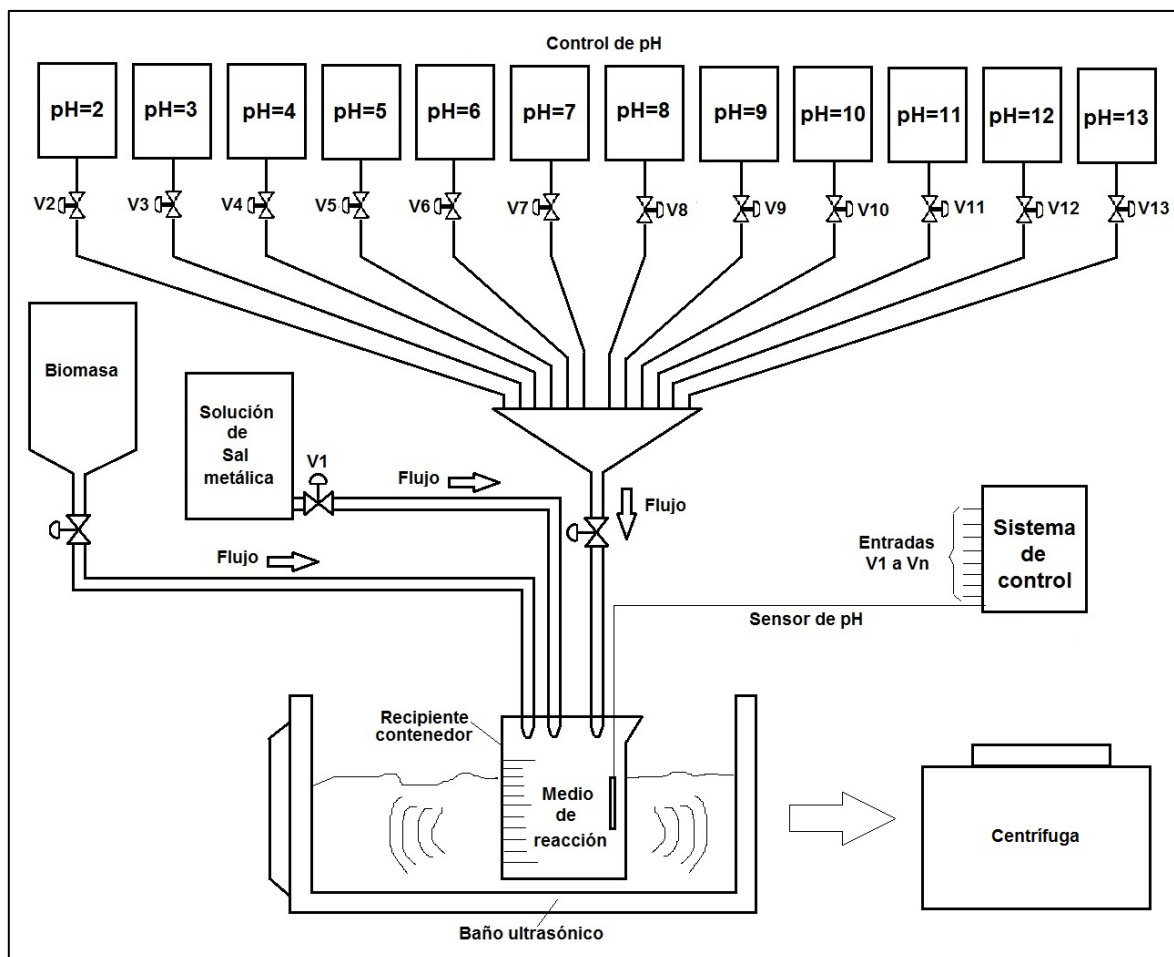


Figura 6.2. Diagrama esquemático del sistema mecatrónico para síntesis de nanopartículas metálicas por biorreducción (Fuente: elaboración propia).

En el diagrama de la figura 6.2, se muestra cómo interactúan y se controlan las variables de diseño del sistema (pH de la solución precursora, concentración de la biomasa, concentración de la sal metálica, y la temperatura de crecimiento y nucleación). Así como la función que realizan los diferentes equipos o dispositivos seleccionados para el diseño del sistema (recipiente contenedor, agitador, máquina centrífuga y medio de almacenamiento).

Para el caso de las variables mencionadas en el párrafo anterior, consideradas tanto para el diseño del sistema como para el de las nanopartícula; se obtuvo como resultado la propuesta de los valores límite recomendados de las variables para realizar síntesis por biorreducción mediante el sistema mecatrónico propuesto. En la tabla 6.3, se presentan los valores encontrados.

Tabla 6.3. Valores recomendados para realizar síntesis por biorreducción de nanopartículas metálicas utilizando biomasa extraída de lirio acuático (*Eichhornia crassipes*).

Variable de diseño	Valores recomendados	Observaciones
pH de la solución precursora	2 - 13	No se encontró evidencia de formación de nanopartículas metálicas después de estos valores, figura 5.3 y sus respectivas referencias.
Concentración de sal metálica	1 mM (1×10^{-3} M)	Se recomienda una concentración inicial baja por causa de las afectaciones que altas concentraciones ejercen sobre la biomasa, por ejemplo concentraciones > 5 mL de AgNO_3 son tóxicas para la biomasa (Korbekandi, 2013).
Concentración de la biomasa	Relación 1:1	Referida al volumen de solución conteniendo biomasa y volumen de solución de sal metálica a reducir. (Rosano-Ortega, 2009).
Temperatura de crecimiento y nucleación	36 °C	Temperatura ideal para la velocidad máxima de reacción enzimática (Baker & Murray, 2001).

Los valores de los pH indicados corresponden en específico al uso de biomasa como agente reductor, en el caso de utilizar extractos los valores de referencia deben ser consultados en la figura 5.3 del capítulo 5.

Solo en el caso de la concentración de la biomasa no se pudo definir una concentración óptima, esto por causa de la diferente concentración de enzimas reductoras presentes en la biomasa, cuando esta se obtiene de diferentes partes de una misma planta o diferentes plantas, tal es el caso del lirio acuático y la biomasa obtenida de la raíz, tallo y hoja de la planta (Bedolla, 2014). Sin embargo, de forma experimental pueden probarse diferentes concentraciones de biomasa, de forma tal que se obtenga la tasa de reacción deseada, es decir la cantidad de sustancia que se transformará en un producto dentro de una determinada reacción por unidad de volumen y tiempo. Por lo anterior se recomienda iniciar la síntesis con la concentración de biomasa propuesta por Rosano-Ortega (2009) y hacer los ajustes necesarios para obtener la tasa de reacción deseada.

Es importante resaltar que el sistema mecatrónico se diseñó considerando la posibilidad de realizar síntesis por diseño de nanopartículas; por lo cual, si se requiere un tamaño de nanopartícula determinado para una aplicación en específico, se deben considerar los parámetros indicados en la figura 6.3 y tabla 6.3.

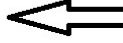
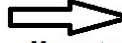
Variación Variable	Efecto de la disminución	Valor de referencia	Efecto del aumento
pH	 Mayor tamaño de la NPs	7	 Menor tamaño de la NPs
Concentración de sal metálica	 Mayor tamaño de la NPs	1 mM	 Menor tamaño de la NPs
Concentración de biomasa	 Mayor tamaño de la NPs	1:1	 Menor tamaño de la NPs
Temperatura	 Mayor tamaño de la NPs	36 °C	 Mayor tamaño de la NPs

Figura 6.3. Esquema general del efecto de manipulación de las variables de diseño para el control sobre el tamaño de nanopartículas sintetizadas utilizando el sistema mecatrónico propuesto (Fuente: elaboración propia).

En la figura 6.3, se muestra únicamente el comportamiento del tamaño de la nanopartícula cuando se manipula el valor de cada una de las variables, tomando como valores de referencia los listados en la tabla 6.3. Así, al diseñar una nanopartícula mediante el sistema mecatrónico, se recomienda de inicio mantener fijas las variables de concentración de sal metálica, concentración de biomasa y la temperatura y utilizar como variable de control para el tamaño al pH presente en el medio de reacción.

Con el objetivo de verificar la propuesta de solución presentada para el método de síntesis por biorreducción para la obtención de nanopartículas metálicas, se realizó la síntesis de ciertas nanopartículas consideradas como casos de estudio, bajo este esquema y utilizando el método experimental convencional. Los resultados se presentan en la siguiente sección.

6.2.2 CASOS DE ESTUDIO

Con base en lo anterior, se presenta en la tabla 6.4 los parámetros iniciales recomendados para realizar la síntesis de nanopartículas mediante el sistema mecatrónico diseñado para tal fin. Considerando como caso de estudio la síntesis de nanopartículas de materiales como plata (Ag), el oro (Au), el cromo (Cr) y el cobalto (Co).

Tabla 6.4. Condiciones para la síntesis de nanopartículas por biorreducción utilizando biomasa como agente reductor.

Nanopartículas	pH	Concentración de sal metálica (sustrato)	Concentración de la biomasa (sol. Biomasa:sol. metálica)	Temperatura	Estabilidad
Plata (AgNPs)	7 – 8	1 – 5 mM	1:1	36 °C	15 días
Oro (AuNPs)	2 – 3	1 mM	1:1	36 °C	15 días
Cromo (CrNPs)	7	1 mM	1:1	36 °C	15 días
Cobalto (CoNPs)	7	1 mM	1:1	36 °C	15 días

De la tabla 6.4, se puede observar lo siguiente:

- Los valores del pH y de la concentración de la sal metálica son los utilizados de manera frecuente en la síntesis de nanopartículas de los materiales listados en la tabla 6.1, para consultar las referencias ver tabla A-3 del anexo 1.
- Para la concentración de la biomasa, se tomó como valor de referencia la relación establecida por Rosano-Ortega (2009), donde por cada mL de solución de biomasa se agrega 1 mL de solución de sal metálica a concentración definida.
- Para el caso de la temperatura, este valor corresponde a la temperatura ambiente del lugar donde se realiza la síntesis, aunque en la tabla 6.1 se muestra un valor de 36 °C que es considerado como temperatura óptima para la síntesis y cuanto más cercano sea a este valor, se favorece la cinética de la reacción enzimática de la síntesis.
- La estabilidad de las muestras, que contiene las nanopartículas en solución acuosa, fue evaluada en función del tiempo de almacenamiento previo a su caracterización, encontrando que después de 15 días (2 semanas aproximadamente) se comienzan a formar impurezas dentro de la solución que contiene las nanopartículas; lo cual se atribuye a la descomposición de la materia orgánica remanente de la síntesis (Bedolla, 2014).
- Finalmente, de la información presentada en la tabla 6.4 y su discusión, se espera que el proceso de síntesis proporcione nanopartículas con tamaños entre 10 a 100 nm, aplicando las condiciones indicadas.

Es importante resaltar que, con los resultados contenidos en esta sección y combinados con el proceso de selección de equipos y dispositivos realizada en la sección 5.4.1, se elaboraron los modelos de CAD, individuales, de los equipos seleccionados; de igual forma se ensamblaron para dar forma al modelo completo del sistema mecatrónico propuesto. El modelo resultante se presenta en la sección siguiente

6.3. RESULTADOS DEL ENSAMBLE DEL SISTEMA MECATRÓNICO

Para el ensamble del sistema se utilizaron los modelos elaborados de los componentes principales que intervienen en el proceso de síntesis por biorreducción y los elementos auxiliares utilizados para su interacción, figura 5.7 y tabla 5.9 respectivamente; tal como se indicó en la sección 5.5.2.

El modelo resultante, del ensamble correspondiente al sistema mecatrónico para realizar síntesis por biorreducción para obtener nanopartículas metálicas, se muestra en la figura 6.4.

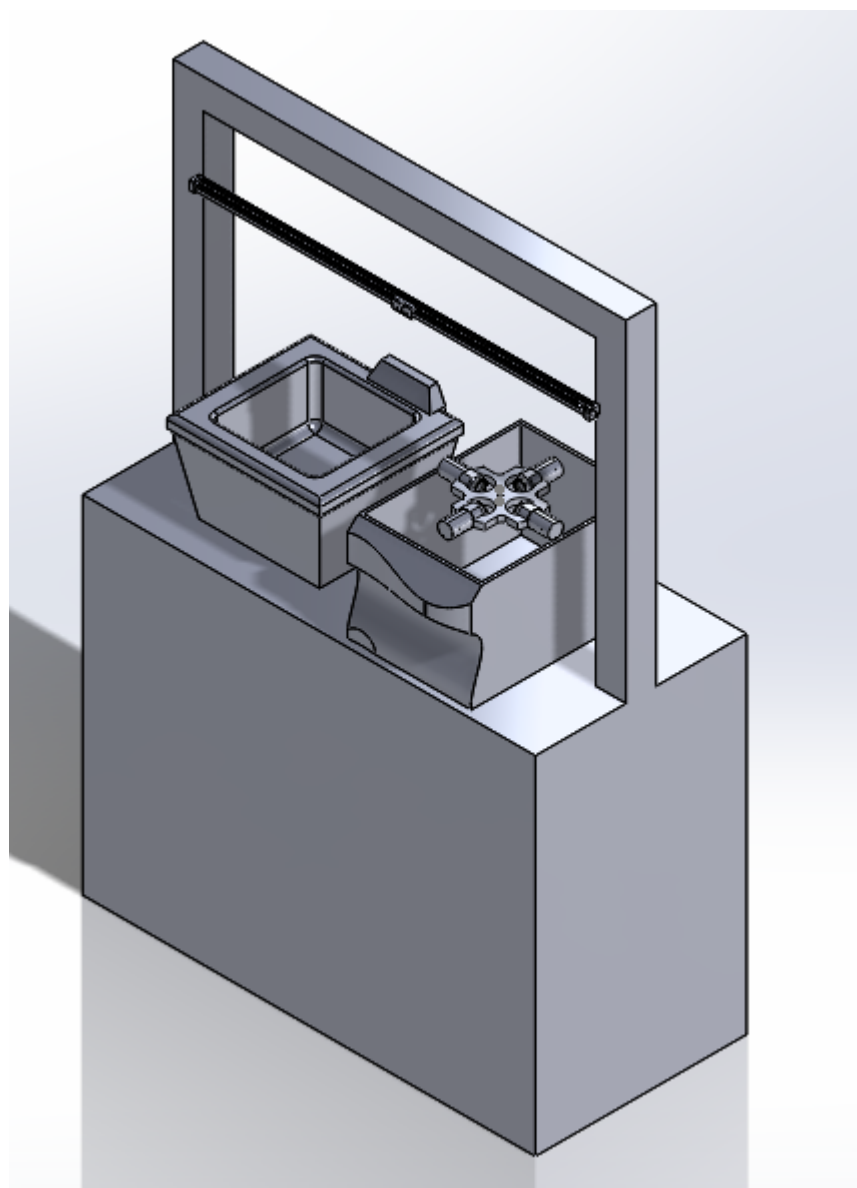


Figura 6.4. Modelo completo del sistema mecatrónico para síntesis de nanopartículas metálicas por biorreducción (Fuente: elaboración propia).

En la figura 6.4, se muestra la disposición final de los dispositivos y elementos que conforman el sistema mecatrónico; el acomodo se dio en función de la dimensión de los equipos (anexo 2 y 6) y la trayectoria a recorrer durante el proceso de síntesis (figuras 5.7 y 5.8).

Una vez concluido el ensamble del sistema se evaluó, de forma virtual, su comportamiento cuando se realiza una síntesis inducida de nanopartículas. La evaluación del desempeño se realizó en los rubros de:

- Pruebas de movimiento
- Resistencia de los componentes a las cargas aplicadas
- Producción
- Manejo de residuos

6.3.1. PRUEBAS DE MOVIMIENTO

Las pruebas de movimiento se realizaron tomando como base las trayectorias descritas en la figura 5.8. Se verificó que la disposición e interacción de los componentes proporcionaran los grados de libertad requeridos para el proceso de síntesis; por lo cual, el tiempo proyectado a utilizarse en cada etapa del proceso, al estar en marcha el sistema, no fue considerado.

La verificación de movimiento se muestra a manera de resumen en la tabla 6.5.

Tabla 6.5. Resultados de la verificación de movimientos.

Paso en la síntesis (ver figura 5.8)	Tipo de movimiento	Descripción	Se realiza	
			Si	No
Paso 2	Lineal ascendente	Va del punto de fijación de los tubos de ensaye hacia la posición de desplazamiento horizontal que lleva al baño ultrasónico y centrífuga.	X	
Paso 3	Lineal hacia la derecha	Del punto anterior hacia la ubicación del baño ultrasónico.	X	
	Lineal descendente	Del punto anterior hacia abajo hasta ubicar los tubos dentro del baño ultrasónico.	X	
	Lineal ascendente	Movimiento inverso al punto anterior.	X	
	Lineal hacia la derecha	Del punto anterior hacia la ubicación de la máquina centrífuga.	X	
	Lineal descendente	Del punto anterior hacia abajo hasta ubicar los tubos dentro de la máquina centrífuga.	X	
	Lineal ascendente	Movimiento inverso al punto anterior.	X	

Paso en la síntesis (ver figura 5.8)	Tipo de movimiento	Descripción	Se realiza	
Paso 4	Lineal ascendente	Del punto anterior hacia la ubicación del módulo de control del pH.	X	
	Lineal descendente	Del punto anterior hasta la posición de desplazamiento horizontal.	X	
Paso 5	Lineal hacia la izquierda	Del punto anterior al inicio del paso 3.	X	
	Movimientos paso 3 y 4	Ciclo de repetición	X	
Paso 6	Lineal hacia la izquierda	Del punto anterior hacia el depósito controlado de sal metálica.	X	
Paso 7	Lineal descendente	Del punto anterior al inicio del paso 3.	X	
	Movimientos paso 3	Ciclo de repetición	X	
Fin				

Del seguimiento de movimientos descrito en la tabla 6.5, se observa que el ciclo requerido para la síntesis de nanopartículas metálicas por biorreducción mediante el sistema mecatrónico propuesto se realiza de forma completa. Sin embargo para completar los detalles de posicionamiento para los desplazamientos, es necesario colocar sensores de posición que limite los movimientos a las posiciones requeridas; lo cual permitirá dar versatilidad de tamaños en los tubos a utilizar y por consecuencia a la cantidad de producto final a obtener, inferior a los 400 mL.

6.3.2. RESISTENCIA DE LOS COMPONENTES A LAS CARGAS APLICADAS

Para la evaluación de la resistencia a la carga aplicada, se utilizó como criterio la cantidad de masa que debe ser trasladada dentro del sistema mecatrónico hacia los diferentes dispositivos que intervienen en el proceso de síntesis, ver figura 5.8.

Como carga al sistema se consideran las mostradas en la tabla 6.6.

Tabla 6.6. Masa acumulada a desplazar por los componentes móviles del sistema mecatrónico.

Elemento	Cantidad	Masa [Kg]	Masa acumulada [Kg]	Observaciones
Cabezal (rotor) oscilante	1	2.9	2.9	Masa calculada, para un cabezal oscilante fabricado en acero inoxidable y tubo de ensayo de vidrio (borosilicato 3.3) de acuerdo a los modelos de la tabla 5.9. Ver los modelos en el anexo 6.
Tubos de ensayo	4	0.103	0.412	
Solución acuosa (medio de reacción)	4	0.1	0.400	Masa calculada tomando la como referencia la igualdad de 1 mL = 1 g, para los tubos de ensayo de capacidad 100 mL.
Masa total acumulada			3.712	Masa acumulada a desplazar.

Para el cálculo de los valores de la masa del cabezal oscilante y los tubos de ensayos, mostrados en la tabla 6.6, se utilizaron los modelos de CAD construidos para dichos elementos (ver anexo 6) y mediante el software *Solidworks* se determinó la cantidad de masa correspondiente para cada elemento, de acuerdo a la geometría (tabla 5.8) y al material de fabricación (tabla 6.6). Los resultados se muestran en las figuras 6.5 y 6.6.

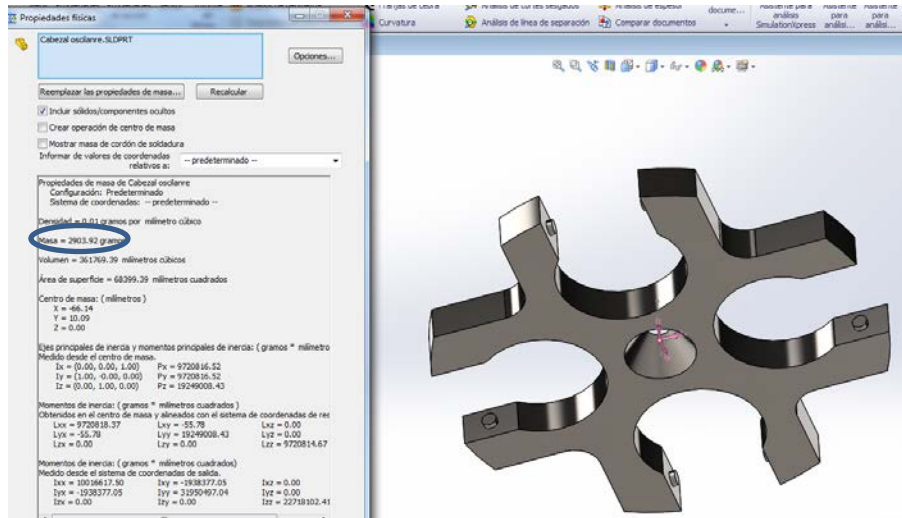


Figura 6.5. Cálculo de la masa del cabezal oscilante

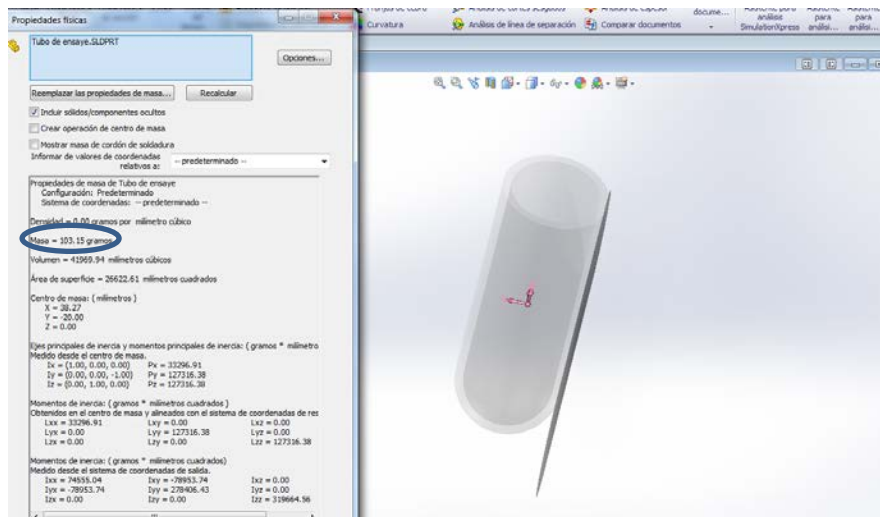


Figura 6.6. Cálculo de la masa del tubo de ensayo.

Con el valor calculado de masa acumulada, 3.712 Kg, se evaluó si el diseño de los elementos móviles resiste tal carga, los datos y comparación se presentan en la tabla 6.7.

Tabla 6.7. Análisis de la fuerza máxima soportada por los elementos móviles del sistema.

Elemento	No. de producto (Festo, 2015)	Fuerza máxima [N]	Carga en el sistema [N]	Diferencia [N]
Actuador longitudinal lineal	DGC-12-1200-G-P-A---(0)	68	37	31
Actuador longitudinal vertical	DGC-12-800-G-P-A---(0)	68	27	41

En la tabla 6.7, se observa que la fuerza máxima de diseño de los elementos de la tabla es de 68 N, superando por 31 N a la carga desplazada longitudinalmente; y en el caso del actuador vertical por 41 N. Por lo tanto no existe falla en el sistema por resistencia de los elementos a la carga aplicada.

Finalmente de acuerdo a las recomendaciones del fabricante, los actuadores lineales seleccionados son de grado resistente a la corrosión (Festo, 2015), por lo cual son aplicables al caso de manejo de líquidos.

6.3.3. PRODUCCIÓN

Para la estimación de la producción, se debe considerar que las nanopartículas metálicas resultantes del proceso de síntesis por biorreducción, mediante el sistema mecatrónico propuesto, se encuentran contenidas en solución acuosa; por lo cual, el volumen máximo de solución del diseño inicial (400 mL) no es la cantidad de nanopartículas producidas.

Para determinar la cantidad de nanopartículas producto de la síntesis, es necesario establecer la concentración de estas dentro de la solución acuosa; es decir, la cantidad de nanopartículas por unidad de volumen de la solución.

Para verificar lo anterior, se tomó de forma específica el caso de la síntesis de nanopartículas de plata (AgNPs). Los resultados encontrados al sintetizar estas partículas, mediante biorreducción utilizando biomasa de lirio acuático como agente reductor, se presentan a continuación.

Síntesis de nanopartículas de plata

Con los valores mostrados en la tabla 6.4, se realizó la síntesis de nanopartículas de plata utilizando biomasa obtenida de la raíz del lirio acuático, AgNO_3 como sal metálica a una concentración de 3×10^{-3} M. Las muestras obtenidas, solución acuosa con nanopartículas de plata, fueron caracterizadas mediante TEM (Microscopia Electrónica de Transmisión); con lo cual, se determinó el tamaño promedio y cantidad de las nanopartículas (Bedolla, 2014). La caracterización fue

realizada por Munive-Olarte (2014) en las instalaciones del Instituto de Física de la UNAM.

Tabla 6.8. Cantidad y tamaño promedio de AgNPs para las muestras seleccionadas.

Muestra	Sal metálica	Concentración	Distribución de tamaños	Diámetro promedio	Cantidad de nanopartículas
R37	AgNo ₃	3X10 ⁻³ M	102 – 687 nm	344 nm	750
R311	AgNo ₃	3X10 ⁻³ M	17.8 – 586 nm	36.2 nm	300

Como se observa en la tabla 6.8, el tamaño promedio de las nanopartículas corresponde a las contenidas en la muestra producto de la síntesis; sin embargo la cantidad de nanopartículas contabilizadas, en la medición de la muestra, es la contenida en la rejilla utilizada para la medición por TEM, por lo cual no es la cantidad total que se obtiene como producción de la síntesis.

Para estimar la cantidad de nanopartículas que se obtienen por cada síntesis a realizar con el sistema mecatrónico, se considera el volumen total de solución acuosa producto de la síntesis; siendo esta de 400 mL aproximadamente, de acuerdo a las especificaciones de diseño para el sistema, tabla 5.6.

Tomando en cuenta que la rejilla utilizada para la medición por TEM tiene un diámetro de 3 mm y una cantidad de 0.5 mL de solución a medir es utilizada para para obtener una muestra solida (seca) con espesor de 5 µm. Con lo anterior se calculó el volumen de control para la muestra medida, siendo de 3.53X10⁻¹¹ m³, mientras que el volumen de una nanopartícula de 36.2 nm de diámetro promedio es de 5.5X10⁻¹⁵ nm.

Con los datos calculados de volumen, se estableció la cantidad de nanopartículas, de 36.2 nm de diámetro, que podrían esta contenidas en el volumen de control de la muestra; siendo un total de 6426 nanopartículas. Por lo tanto para 0.5 mL de solución se pueden tener una cantidad de nanopartículas en el intervalo de (300 – 6426) y para la producción de 400 mL una cantidad en el rango de 240,000 – 5,140,800 nanopartículas. Siendo éste el rango de producción de nanopartículas por cada síntesis realizada.

Con estos datos como base se puede proyectar el escalamiento y la producción para aplicaciones definidas.

6.3.4. MANEJO DE RESIDUOS

De acuerdo al informe de Seguridad y Salud en el Trabajo con Nanomateriales, emitido por el Instituto Nacional de Higiene y Seguridad en el trabajo del gobierno español (2015), los residuos generados por los procesos de manufactura de

nanomateriales se manejan en la etapa de gestión del residuo, es decir, como material para la reutilización, reciclado, otras operaciones de valorización o eliminación del mismo

Para el caso de producción de nanomateriales mediante procesos de síntesis, como la biorreducción, el residuo generado es un biosólido compuesto por materia orgánica (biomasa); el cual, por ser el agente reductor durante la síntesis, queda con nanopartículas del material reducido, condicionando esto su manejo, ver proceso de síntesis en el anexo 4.

Con base en lo anterior, la determinación sobre la gestión del residuo se debe realizar tomando el valor de la concentración del nanomaterial presente y posterior comparación contra los valores de concentración máxima permitida, por norma, de acuerdo al tipo de nanomaterial de que se trate. La concentración máxima permitida (CMP), se define como la máxima cantidad de sustancia por unidad de volumen (p. ejem. mg/m³, ppm) que se encuentra permitida para el uso dentro de los rangos normales de inocuidad, en condiciones estándar (25 °C y 1 atm).

En México los niveles de CMP para metales pesados en biosólidos, se encuentran reglamentados bajo la Norma Oficial Mexicana NOM-004-SEMARNAT-2002, Protección ambiental.- Lodos y biosólidos.-Especificaciones y límites máximos permisibles de contaminantes para su aprovechamiento y disposición final, emitida por la Dirección General de Normas y publicada en el Diario Oficial de la Federación (DOF) con fecha 15 de agosto de 2003.

Los límites máximos permisibles para metales pesados en biosólidos se encuentran en la tabla 1 de la norma referida, mismos que se pueden consultar para realizar la comparación con los niveles de concentración de metales pesados (para este caso nanopartículas metálicas) presentes en el biosólido; permitiendo así establecer la gestión del residuo de acuerdo a la tabla 3 de la citada norma.

Sin embargo, al no formar parte de los alcances de éste proyecto, los valores de la concentración de nanopartículas en el biosólido residual no fueron determinados, pero se plantea su realización dentro de los trabajos futuros de continuidad para la investigación; de forma tal, que se establezca la potencialidad de reutilización de la biomasa, ya sea nuevamente como agente reductor o para otros procesos de revalorización y disposición final.

6.4. RESULTADOS DE VALIDACIÓN DEL PROCESO (CASO DE APLICACIÓN)

En esta sección se presentan los resultados obtenidos, con base en el procedimiento descrito en la sección 5.7, para el modelado, simulación y análisis de nanopartículas mediante herramientas computacionales; considerando como caso de aplicación la síntesis por diseño de nanopartículas de cromo Cr(0), óxido de cromo (Cr_2O_3) y carburo de cromo (Cr_3C_2) para su aplicación en recubrimientos de superficies metálicas.

La validación del proceso, desde esta perspectiva, correspondió en establecer la pertinencia de las nanopartículas de cromo que potencialmente sintetizadas por biorreducción mediante el sistema mecatrónico propuesto, cubran las expectativas de incrementar las propiedades de dureza y resistencia al desgaste de las superficies metálicas recubiertas. Para lo cual, se realizó un contraste entre los valores de estas propiedades para recubrimientos superficiales formados con nanopartículas sintetizadas por biorreducción y recubrimientos elaborados con nanopartículas homologas pero obtenidas por otros métodos de síntesis.

Los resultados obtenidos se presentan a continuación.

6.4.1 CÁLCULO DE LA DUREZA SUPERFICIAL

Para el cálculo de los valores de dureza, para recubrimientos superficiales con materiales nanoestructurados, se utilizó la teoría de Simunek (2007); la cual propone un modelo de cálculo para la dureza teórica de un cristal simple mediante la aproximación semiempírica de la forma mostrada en la ecuación 6.1.

$$H = \frac{C}{\Omega} n \left[\prod_{i,j=1}^n b_{ij} s_{ij} \right]^{1/n} e^{-\sigma f_e}$$

$$f_e = 1 - \left[\frac{k(\prod_{i=1}^k e_i)^{1/k}}{\sum_{i=1}^k e_i} \right]^2$$

$$s_{ij} = \frac{\sqrt{e_i e_j}}{n_i n_j d_{ij}}$$
(6.1)

Donde n_i y n_j son los puntos coordenados de los átomos i y j respectivamente; d_{ij} es la distancia interatómica de los átomos i y j ; la energía de referencia $e_i = Z_i/R_i$; la cual representa el potencial del átomo individual i para atraer la carga de valencia del cristal; Z_i es el número de electrones de valencia del átomo i ; y R_i es el radio iónico del átomo publicado por Pearson (1972); K corresponde al número de

átomos diferentes en el sistema; S_{ij} es la resistencia de las ligaduras individuales entre los átomos i y j en la celda unitaria; Ω es el volumen de la celda. La constante semiempírica C es igual a 1450 calculada de valores experimentales, $e^{-\sigma_{fe}}$ (varia de 0 a 1) y modifica el efecto entre las energías de referencia (e_i , e_j) y σ es igual a 2.8.

Usando la ecuación 6.1 y los resultados de la simulación de la optimización de geometría y energía de la celda unitaria para cada nanopartícula considerada, se calcularon los valores de dureza teóricos mostrados en la tabla 6.9.

Tabla 6.9. Determinación de la variación de dureza superficial para recubrimientos a base de nanopartículas de cromo.

Nanopartícula	Sustrato	Dureza		% diferencia
		De literatura	Cálculos Numéricos	
Carburo de cromo (Cr_3C_2)	Depositado sobre acero endurecido	22 Gpa (Esteve, 2004)	20.9 GPa	4.5
	Depositado sobre aceros grados St3 y U9	21 – 23 Gpa (Stulov, 2014)		0 – 8.7
	Grupo de componentes cilindro – piston de automóviles	20 -24 GPa (Bryskin, 2014)		5 – 12.5
	Tamaño de la nanopartícula 30 – 40 nm.	22 GPa (Mahajan, 2015)		4.5
Oxido de cromo (Cr_2O_3)	Depositado sobre un sustrato de acero inoxidable	32 – 36 GPa (Ji, 2004)	30.7 GPa	3 – 13.8
	Depositado sobre un sustrato de vidrio, silicón y HSS	32 GPa (Hones, 1999)		3
Cromo ($\text{Cr}(0)$)	Tamaño de la nanopartícula 10 – 50 nm	10.8 Gpa (Gidikova, 2014)	10.2 GPa	5.5
	Depositado sobre un sustrato de vidrio, silicón y HSS	10 GPa (Hones, 1999)		2
	Placas de Cu	12.356 ± 1.537 GPa (Liang, 2015)		5.5

Como se mencionó en el estado del arte y la fundamentación teórica, la mejora en la dureza es determinada por la medición de este parámetro específicamente sobre la superficie recubierta, por lo cual el dato obtenido es independiente de las propiedades del sustrato, como se observa en las columnas 2 y 3 de la tabla 6.9, donde los valores de dureza son muy cercanos y con nula o poca afectación por el sustrato. Con base en esto, la mejora de dureza superficial para superficies recubiertas con nanopartículas de $\text{Cr}(0)$, Cr_2O_3 y Cr_3C_2 , se determinó comparando los valores obtenidos de las simulaciones numéricas para cada arreglo contra valores de referencia, obtenidos de literatura técnica, de recubrimientos formados con arreglos similares.

De los resultados mostrados en la tabla 6.9, se observa que los valores de dureza, en orden descendente, corresponden a las nanopartículas de Cr_2O_3 , Cr_3C_2 y $\text{Cr}(0)$, siendo 30.7, 20.9 y 10.2 GPa respectivamente. Es importante recalcar que los porcentajes de diferencia muestran una buena aproximación con los datos de referencia, teniendo a los valores calculados con una diferencia aproximadamente al 10 % en todos los casos.

6.4.2 CÁLCULO DE LA RESISTENCIA AL DESGASTE

El imperativo, por muchos años, en los recubrimientos tribológicos ha sido el desarrollo de recubrimientos más duros (y rígidos). Sin embargo, se reconoce cada vez más que la dureza no es necesariamente el requisito primordial para la resistencia al desgaste. La elasticidad y tenacidad en los recubrimientos pueden ser igualmente (si no más) factores importantes, particularmente para la resistencia al desgaste por abrasión, impacto o erosión. Con respecto al comportamiento elástico, describir las propiedades del recubrimiento por una relación H/E (una descripción en términos de "*deformación elástica para falla*") y no por dureza solamente, se puede mostrar que tiene mérito; por ejemplo para determinar las propiedades de recubrimientos superficiales para aplicaciones tribológicas, tales como presión de falla de contacto y tenacidad a la fractura, pueden (si la geometría de contacto es conocida) ser descritos también en términos de la dureza H y elasticidad E . Siendo para la dureza los valores calculados mediante la ecuación 6.1 y mostrados en la tabla 6.9, mientras que para el módulo de elasticidad el cálculo se realizó con la ecuación 3.16 y los valores se muestran en la atabla 6.10.

Los desarrollos en tecnología de recubrimientos superficiales, principalmente en la producción de películas delgadas nanoestructuradas mediante técnicas experimentales de deposición, han revelado la posibilidad de controlar H y E con algún grado de independencia, produciendo de ese modo superficies resistentes al

desgaste con combinaciones de propiedades que eran previamente inalcanzables (Leyland, 2000).

Con base en lo anterior se evaluó la relación H/E para los valores calculados de las nanopartículas de cromo propuestas para elaborar recubrimientos superficiales de elementos mecánicos en contacto. Los valores de H/E se presentan en la tabla 6.10.

Tabla 6.10. Valores de H/E de diferentes nanopartículas propuesta para elaborar recubrimientos superficiales.

Nanopartícula	Módulo de elasticidad $E(\text{GPa})$	Dureza $H(\text{GPa})$	H/E
Cr(0)	283.87	10.2	0.050
Cr_2O_3	311.17	30.7	0.099
Cr_3C_2	414.47	20.9	0.050

En la tabla 6.10, se observa que para valores de H/E , la secuencia en orden descendente es $\text{Cr}_2\text{O}_3 > \text{Cr}_3\text{C}_2 > \text{Cr}(0)$, con 0.099, 0.050 y 0.050; por lo tanto y de acuerdo a Liang (2015), la alta relación de dureza con el módulo elástico es favorable para resistir el desgaste y la falla por fatiga en los recubrimientos.

Por lo tanto, los recubrimientos nanoestructurados con nanopartículas a base de Cr_2O_3 presentan las mejores condiciones para generar los recubrimientos de los elementos mecánicos en contacto con $H/E = 0.099$, seguido por los recubrimientos a base de Cr_3C_2 con $H/E = 0.05$ y reservado las potenciales aplicaciones del cromo Cr(0) en tanto no se obtengan nanopartículas con tamaños entre 10 – 100 nm.

Finalmente, considerando que las simulaciones se realizaron con los modelos contruidos a partir de datos de nanopartículas de Cr_2O_3 , Cr_3C_2 y Cr(0), obtenidas por biorreducción, se infiere que éstas nanopartículas pueden ser utilizadas para la elaboración de recubrimientos superficiales con resultados de dureza similares a los obtenidos por otros métodos de síntesis; teniendo que controlar los parámetros de síntesis, con el sistema mecatrónico, para obtener nanopartículas en los rangos mostrados en la tabla 5.15.

Con base en lo anterior y de acuerdo a los tamaños de nanopartícula de la tabla 5.15, se establece que las nanopartículas de Cr(0) deben incrementarse en tamaño para su potencial uso en recubrimientos superficiales; lo cual se define manipulando los parámetros de síntesis. En el caso de las nanopartículas de

Cr_3C_2 , y Cr_2O_3 los tamaños de nanopartícula corresponden a los requeridos para su uso en el diseño y elaboración de recubrimientos superficiales con alta dureza y alto módulo de elasticidad; además de simplificar el proceso de recubrimiento, por causa de que tamaños de grano entre 10 -100 nm, ofrecen las mismas características que los recubrimientos formados por nanocapas múltiples (Leyland, 2000).

En conclusión, tanto los resultados obtenidos del desarrollo de la investigación, así como los de la aplicación proyectada, demuestran la factibilidad de utilizar el dispositivo diseñado para producir nanopartículas metálicas por el método experimental de biorreducción. Las conclusiones y recomendaciones para el cierre del presente trabajo de investigación, se exponen en el siguiente capítulo.

CAPÍTULO 7

CONCLUSIONES

En este proyecto de investigación, se desarrolló la propuesta de diseño de un sistema mecatrónico mediante el cual se realice la síntesis de nanopartículas metálicas. El método de síntesis por biorreducción usando como agente reductor biomasa extraída del lirio acuático (*Eichhornia crassipe*), fue el utilizado como base del proyecto.

El sistema propuesto fue diseñado para la síntesis de nanopartículas metálicas en general; sin embargo, como casos de estudio y en secciones específicas durante la realización de este trabajo, fueron consideradas nanopartículas de plata, oro, cobalto y cromo.

Una vez finalizado el proceso de diseño del sistema mecatrónico, se enuncian en este capítulo, las conclusiones y observaciones resultantes de la investigación; así como las recomendaciones y trabajos futuros que den continuidad a la misma.

El contenido de este capítulo se ordenó iniciando por las conclusiones generales; las cuales enuncian el grado de cumplimiento del objetivo general, acotado por sus alcances y limitaciones. Después, las conclusiones correspondientes al desarrollo del proyecto; las cuales están enmarcadas por las etapas de la metodología propuesta y las respuestas a preguntas de investigación planteadas.

7.1. CONCLUSIONES GENERALES

En lo referente al objetivo general, el desarrollo del proyecto cumplió con las etapas para la automatización de procesos productivos, salvo la construcción y puesta en marcha puesto que se limitó solo a la fase de diseño. Por lo tanto, al término del proyecto se tiene un diseño, a nivel de planta piloto de un sistema mecatrónico, para realizar la síntesis inducida de nanopartículas metálicas por el método de biorreducción.

En cuanto a los alcances y limitaciones, se concluye que con el diseño propuesto, se cubrió completamente el método experimental de biorreducción considerado como base para investigación y se proyectó una posible aplicación de las nanopartículas a obtener.

7.2. CONCLUSIONES DEL DESARROLLO DEL PROYECTO

Sobre el proceso de síntesis por biorreducción:

- No se encontró evidencia del uso del lirio acuático (*Eichhornia crassipe*) como fuente de biomasa (agente reductor) para realizar síntesis por biorreducción; por lo cual, la propuesta de utilizar una planta considerada como maleza, cobra una importancia mayor y potencia su uso como materia prima en el proceso de síntesis de nanopartículas metálicas.
- Se determinó que son cuatro (recipiente/contenedor, agitador, máquina centrífuga y medio para almacenamiento) los componentes básicos requeridos y que intervienen en el proceso de síntesis de nanopartículas por biorreducción, siendo estos los considerados con mayor frecuencia en diferentes propuestas experimentales, ver tabla 5.4.
- Se establecieron los valores base para la síntesis por diseño de nanopartículas metálicas, siendo pH entre 2 – 13 (figura 5.4), concentración de la solución de la sal del metal a reducir de 1×10^{-3} M (tabla 5.8), concentración de solución de biomasa 1:1 respecto al volumen de solución metálica (tabla 6.1) y temperatura ambiente para la reacción.
- En cuanto al control del tamaño, se definió el efecto que causa la variación (incremento o decremento) de los valores utilizados como parámetros de diseño para síntesis de nanopartículas metálicas (figura 6.3), dando como recomendación para el control del tamaño la de variación del pH mientras se mantienen constantes los otros tres valores.

Sobre el sistema mecatrónico diseñado:

- El sistema diseñado, es modular y agrupa las operaciones necesarias para realizar síntesis inducida de nanopartículas metálicas, puede utilizar como agente reductor biomasa o extractos de plantas y semillas, permite mayor control sobre los parámetros de síntesis, y funciona a condiciones estándar de presión y temperatura; permitiendo con ello su uso dentro del laboratorio así como en las zonas donde se obtenga y procese la biomasa.
- El diseño se basó en los rangos de valores operacionales (tabla 5.7) de las variables de diseño (parámetros de síntesis), con lo cual se proyecta la obtención de nanopartículas metálicas con características específicas y tamaños entre 10 – 100 nm; es decir se realiza síntesis por diseño de nanopartículas.
- Al ser un sistema diseñado para utilizar biomasa, no se consideró la adición de un equipo de calentamiento para el medio de reacción, ya que al hervir la biomasa se inhibe la producción de nanopartículas; con lo cual simplificó el proceso de diseño y se facilita la operación del sistema.
- El sistema diseñado cumple con la condición de realizar la síntesis de nanopartículas metálicas en un proceso de un solo paso y proporciona como producto final nanopartículas metálicas, del metal sintetizado, contenidas en solución acuosa en un volumen máximo de 400 mL por síntesis realizada.
- Para el incremento en la producción de nanopartículas, considerando como base al sistema propuesto, se considera como factor de escalamiento la capacidad máxima disponible, ya sea comercial o por diseño y fabricación, de los cuatro componentes principales.

Sobre la validación del método de síntesis y la aplicación de nanopartículas:

- En cuanto a la validación del método, mediante simulación numérico-computacional, se encontró que existe una diferencia menor al 10 % entre las magnitudes geométricas de celda unitaria, medidas experimentalmente, y comparadas contra los valores de referencia de las nanopartículas del material sintetizado (tablas cristalográficas y base de datos del software Materialstudio), ver tablas 5.12 y 5.13; con lo que se concluye que el método produce nanopartículas con tamaños inferiores a 100 nm.

- Mediante el proceso de simulación se calculó y determinó el comportamiento de las propiedades físicas, de nanopartículas tomadas como caso de estudio, cuando se manipula el tamaño. Encontrando relaciones como en el caso del cobalto, donde al reducir el tamaño de la nanopartícula de 5 a 3 nm el módulo de elasticidad aumenta.
- Para el caso de aplicación práctica, se propuso una síntesis por diseño de nanopartículas de cromo y mediante la metodología de simulación y análisis, se determinaron las propiedades mecánicas de interés (dureza y resistencia al desgaste), relacionando los resultados obtenidos de la simulación (por ejemplo las constantes elásticas) con las teorías necesarias; validando así la aplicación de las nanopartículas a obtener con el sistema mecatrónico para síntesis de nanopartículas metálicas por biorreducción.

7.3. RECOMENDACIONES Y TRABAJOS FUTUROS

Como parte fundamental para dar continuidad al trabajo realizado en este proyecto, se proponen lo siguiente.

- Continuar con la fase de mejora dentro del proceso de diseño del sistema mecatrónico, considerando como criterio una optimización por magnitud de las dimensiones y capacidad de los equipos y dispositivos que lo integran, y teniendo como función objetivo el incremento en la cantidad del producto final respecto al diseño original.
- Concluida la fase de optimización, iniciar con la fase de construcción, considerando para ello la obtención de recursos económicos mediante la participación en convocatorias de financiamiento a proyectos de investigación, como es el caso de la Convocatoria: Apoyo a la Investigación Científica, Aplicada, Desarrollo Tecnológico e Innovación, en los programas Educativos de los Institutos Tecnológicos y las convocatorias de Ciencia básica y desarrollo tecnológico que emite el CONACYT.
- Extender los casos de estudio de nanopartículas a otros metales de interés, por ejemplo hierro (Fe), titanio (Ti), óxidos metálicos, etc., para poder establecer así los parámetros de diseño necesarios para su obtención por medio del sistema mecatrónico diseñado y que sean aplicables en el campo de la ingeniería mecatrónica u otras áreas.

- Evaluar la estabilidad, al realizar envasado al vacío, de la biomasa en forma de polvo y de la solución acuosa que contiene las nanopartículas; para determinar el tiempo máximo de almacenamiento antes de presentar degradación.
- De las nanopartículas consideradas como caso de estudio, investigar a profundidad las propiedades químicas asociadas al tamaño, y determinar sus posibles aplicaciones en las áreas de ingeniería química y ciencias biológicas.
- Realizar un estudio sobre la posibilidad de reutilización de la biomasa en el proceso de síntesis, y de resultar factible establecer el número de ciclos de reúso.
- Desarrollar estudios sobre los riesgos asociados a la producción de nanopartículas mediante el sistema propuesto; tanto en el proceso de obtención del nanomaterial, como del manejo de sus residuos. Lo anterior con la finalidad de garantizar la formación del personal en la mejora y determinar la gestión de los residuos.
- Finalmente, si es el caso, realizar las acciones y trámites necesarios para el registro y/o patente del sistema de síntesis desarrollado.

CONTRIBUCIONES ORIGINALES

Las innovaciones que se aportan al campo de la ingeniería mecatrónica y afines, como productos de éste trabajo de investigación, son principalmente relacionadas con el desarrollo de materiales nanoestructurados. Considerando tanto el aspecto del nanomaterial, así como de su producción.

En la tabla 8.1 y 8.2, se muestran las innovaciones consideradas como contribuciones originales; indicándose de igual manera el organismo que recibe y acepta la información, el formato en que fue presentada y el lugar y fecha para su exposición.

Tabla 8.1. Contribuciones originales desde la perspectiva del nanomaterial.

Contribución	Organismo Colegiado al que se presentó la contribución	Formato de presentación (ver sección de productividad académica)	Lugar y fecha
Se determinación la relación tamaño-propiedades mecánicas para nanopartículas de cobalto.	Sociedad Mexicana de Instrumentación. XXVIII Congreso Anual de la SOMI.	Artículo técnico-científico y ponencia.	Campeche, México; Octubre de 2013.
Se realizó la propuesta y el diseño de nanopartículas de cromo (CrNPs) para su uso en recubrimientos de superficies metálicas.	Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT). Parte del proyecto 102025 de investigación básica, financiado por el CONACyT.	Reporte técnico.	México D.F.; Marzo de 2014.

Tabla 8.2. Contribuciones originales desde la perspectiva de la producción de nanomateriales.

Contribución	Organismo Colegiado al que se presentó la contribución	Formato de presentación (ver sección de productividad académica)	Lugar y fecha
Se realizó la validación del método experimental que utiliza biomasa de lirio acuático como agente reductor para la síntesis de nanopartículas metálicas.	Centro Interdisciplinario de Posgrados CIP-UPAEP. 6° Coloquio Interdisciplinario de Posgrados.	Artículo técnico-científico y ponencia.	Puebla, México; Junio de 2013.
Se determinación de parámetros y su rango de valores para realizar síntesis por diseño de nanopartículas de plata (AgNPs), oro (AuNPs), cromo (CrNPs) y cobalto (CoNPs), mediante síntesis por biorreducción.	Sociedad Mexicana de Instrumentación. XXIX Congreso Anual de la SOMI.	Artículo técnico-científico y ponencia.	Puerto Vallarta, México; Octubre de 2014

Tabla 8.2. Contribuciones originales desde la perspectiva de la producción de nanomateriales (continuación).

Contribución	Organismo Colegiado al que se presentó la contribución	Formato de presentación (ver sección de productividad académica)	Lugar y fecha
Se desarrolló el diseño de un sistema semi-automatizado para realizar la síntesis de nanopartículas metálicas por el método de biorreducción.	Centro Interdisciplinario de Posgrados CIP-UPAEP. Coordinación del Posgrado en Ingeniería Mecatrónica	Tesis de Doctorado	Puebla, México; Noviembre de 2015.

De forma amplia, en la sección de Productividad académica producto del proyecto de tesis, pueden consultarse el documento completo que da soporte a cada una de las contribuciones mencionadas en las tablas 8.1. y 8.2.

REFERENCIAS

1. Accelrys Inc. (2008). Materialstudio:Users Manual. Londres. UK.
2. Acharya, N., Fatima, B., Singh, S., and Sanyal, S. (2013). First principles study on structural, electronic, elastic and thermal properties of equiatomic MTi (M= Fe, Co, Ni). *Chemistry and materials research*, 3(8): 22-30.
3. Aguilar, J. L. L., Filho, J. H. D., Paniago, R., Pfannes, H. D., & Balzuweit, K. (2014). Progresos en la preparación de nanopartículas magnéticas multifuncionales para aplicación en la medicina Progress in the preparation of magnetic nanoparticles for applications in medicine. *Revista ECIPerú Volumen,10(2)*.
4. Ahmed, J., Sharma, S., Ramanujachary, K. V., Lofland, S. E., & Ganguli, A. K. (2009). Microemulsion-mediated synthesis of cobalt (pure fcc and hexagonal phases) and cobalt–nickel alloy nanoparticles. *Journal of colloid and interface science*, 336(2), 814-819. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcis.2009.04.062>.
5. Ahmed, S., Ahmad, M., Lal Swami, B. and Ikram, S. (2015). A review on plants extract mediated synthesis of silver nanoparticles for antimicrobial applications: A green expertise. *J Adv Res* (2015), <http://dx.doi.org/10.1016/j.jare.2015.02.007>.
6. Aki, A. and Nidà, S. (2012). Green synthesis of silver nanoparticles by mulberry leaves extract. *Nanoscience and Nanotechnology*, 2(4): 125-128. doi:10.5923/j.nn.20120204.06.
7. Aki, A., Nida, S. and Amany, A. (2013). Green synthesis of silver nanoparticles using carob leaf extract and its antibacterial activity. *International Journal of Industrial Chemistry*, 4(29): 1 – 6.
8. Alarifi, A., Deraz, N. and Shaban, S. (2009). Structural, morphological and magnetic properties of NiFe₂O₄ nano-particles. *Journal of Alloys and Compounds*, 486 (1): 501–506
9. Alcantara, V. (2008). Nanomateriales, el futuro automotriz. Marzo, 12, 2008. <http://www.cnnexpansion.com/manufactura/tendencias/nanomateriales-el-futuro-automotriz>
10. Amendola, V and Meneghetti, M. (2009). Laser ablation synthesis in solution and size manipulation of noble metal nanoparticles. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 11(1): 3805–3821.
11. Anandini, R., Padan, K., Umesh, K. and Birendra, K. (2013). Green synthesis of silver nanoparticles using leaves extract of centella asiatica l. For studies against human pathogen. *Int J Pharm Bio Sci.*, 4(4): 661 – 674.
12. Arockiya Aarthi Rajathi, F.; Parthiban, C.; Ganesh Kumar, V.; Anantharaman, P. Biosynthesis of antibacterial gold nanoparticles using brown alga, stoechospermum marginatum (kützing). *Spectrochim. Acta Part A Mol. Biomol. Spectrosc.* 99(1), 166–173.
13. Aromal A. and Philip, D. (2012). Green synthesis of gold nanoparticles using Trigonella foenum-graecum and its size-dependent catalytic activity. *Spectrochim Acta A Mol Biomol Spectrosc*, 97(1):1-5. doi: 10.1016/j.saa.2012.05.083.
14. Astalakshmi, A., Nima, P. and Ganesan, V. (2013). A green approach in the synthesis of silver nanoparticles using bark of Eucalyptus globulus, Labill. *Int. J. Pharm. Sci. Rev. Res.*, 23(1): 47-52.

15. Ávalos, A., Haza, A., & Morales, P. (2013). Nanopartículas de plata: aplicaciones y riesgos tóxicos para la salud humana y el medio ambiente. *Revista Complutense de Ciencias Veterinarias*, 7(2): 1-23.
16. Azizi, s. Namva, F. Mahdavi, M., Ahmad, M. and Mohamad, R. (2013). Biosynthesis of silver nanoparticles using brown marine macroalga, sargassum muticum aqueous extrac. *Materials* , 6(1): 5942-5950.
17. Baker, R. & Murray, R. (2001). PDQ, Biochemistry. 1a. Ed. Vol. 1, PMPH-USA.
18. Bar, H., Bhui, D., Sahoo, G., Sarkar, P., Pyne, S. & Misra, A. (2009). Green synthesis of silver nanoparticles using seed extract of *Jatropha curcas*. *Colloids Surf A Physicochem Eng Asp* 2009b, 348, 212–2169.
19. Bedolla, M. Szwedowicz, D. y Bedolla, J. (2002). Análisis de fuerza y torque en uniones mecánicas. Congreso anual de la SOMIM, Celaya, Gto. México.
20. Bedolla, M. (2008). El diseño asistido por computadora: Ventajas aplicaciones. Memorias del 2° Congreso Nacional de Ingeniería Electromecánica, Congreso llevado a a cabo en el Instituto Tecnológico de la Costa Grande. Ziuhtanajo, Gro., México.
21. Bedolla, M., Rosano-Ortega, G., Bedolla, J., Flores, V., Hernández, F. and Schabes-Retchkiman, P. (2013). Análisis del comportamiento de propiedades mecánicas de nanopartículas de cobalto obtenidas mediante síntesis por biorreducción. 1er. Congreso Iberoamericano de Instrumentación y Ciencias Aplicadas y SOMI XXVIII Congreso de Instrumentación. Campeche, Camp., México.
22. Bedolla, M., Rosano-Ortega, G., Bedolla, J., Flores, V., Hernández, F. and Schabes-Retchkiman, P. (2015). Desarrollo de un sistema mecatrónico para realizar síntesis por diseño de nanopartículas metálicas. (en proceso).
23. Bedolla, M., Rosano-Ortega, G., Munive, A., Bedolla, J., Schabes-Retchkiman, P. (2014). Determinación de parámetros de diseño para síntesis de nanopartículas metálicas por biorreducción. SOMI XXIX Congreso de Instrumentación, Puerto Vallarta, Jal., México.
24. Bedolla, M., Rosano-Ortega, G., Munive, A., Bedolla, J., Schabes-Retchkiman, P., Ortiz, M. and Vega, C. (2014). Modelling and analysis of Ag nanoparticles: Validation of a green synthesis method. XXIII International Materials Research Congress. Cancún, México.
25. Belmares-Perales, S., Torres-López, E., Coparan-Elizondo, J., Arriaga-Garza, J. y Elizondo-Villareal, N. (2013). Síntesis y caracterización de nanopartículas de oro, plata y fierro por el método de fisicoquímica verde. 3 er . Foro de divulgación científica y tecnológica. FCFM-UANL, Nuevo León, México.
26. Birendra, K. and Ashok, K. (2014). Green synthesis and characterization of gold nanoparticles using leaf extracts of *Withania somnifera* (Linn.) (Ashwagandha). *American Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, 2(5): 121-126.
27. Blandón, L., Vázquez, M., Boannini, E. y Ballarin, B. (2015). Síntesis electroquímica de nanopartículas de plata en presencia de un surfactante neutro. *AFINIDAD LXXII*, 569(1): 48 – 52.
28. Bouhemadou, A., Boudrifa, O., Guechi, N., Khenata, R., Al-Douri, Y., Ugur, S., Bin-Omran, S. and Ghebouli, B. (2014). Structural, elastic, electronic, chemical

- bonding and optical properties of Cu-based oxides ACuO (A = Li, Na, K and Rb): An ab initio study. *Computational Materials Science*. 81(1): 561-574.
29. Brik, M. (2010). First-principles calculations of electronic, optical and elastic properties of ZnAl_2S_4 and ZnGa_2O_4 . *Journal of Physics and Chemistry of Solids*; 71(10): 1435-1442.
 30. Bryskin, B., Kostylev, A., Pokrovskiy, Y., and Lumpov, A., (2014), CVD Technology for Preparing Wear-Resistive Chromium Carbide Coatings of Engine Components, *SAE Int. J. Mater. Manf.* 7(3):630-632.
 31. Buehler, M. and Gao, H. (2005). Ultra–Large Scale Simulations Dynamic Materials Failure. Handbook of Theoretical and Computational Nanotechnology. Edited by Michael Rieth and Wolfram Schommers, 10(1): 1-41.
 32. Car, R. and Parrinello, M. (1985). Unified approach for molecular dynamics and density-functional theory. *Phys. Rev. Lett.* 55(22): 2471-2474.
 33. Chang, J., Larentis, S., Tutuc, E., Register, L. and Banerjee. S. (2013). Atomistic simulation of the electronic states of adatoms in monolayer MoS₂. *Applied Physics Letters*, 104(1):1-15. doi: 10.1063/1.4870767.
 34. Chen, Y., . Liew, k. and Li, J. (2009). Size controlled synthesis of Co nanoparticles by combination of organic solvent and surfactant. *Applied Surface Science*, 255(7): 4039–4044. doi:10.1016/j.apsusc.2008.10.077.
 35. Chowdhury, A., Sanjog, J., Reddy. SM. and Karmakar, S. (2012). Nanomaterials in the field of design ergonomics: present status. *Ergonomics*. 2012;55(12):1453-62. doi: 10.1080/00140139.2012.720287.
 36. Christensen, L., Vivekanandhan, S., Misra, M. and Mohanty, A. (2011). Biosynthesis of silver nanoparticles using murraya koenigii (curry leaf): An investigation on the effect of broth concentration in reduction mechanism and particle size. *Adv. Mat. Lett.*, 2(6): 429-434. DOI: 10.5185/amlett.2011.4256
 37. Córdoba, W., Sosa, W., Otálora, J., Puerto, M., Fonseca, G. y Rodríguez, J. (2012). Structural and electronic properties study for (p4(2)/mm) phase of MnO₂. *Avances en Ciencias e Ingeniería*, 3(4): 125-130.
 38. Cruz, D., Rodríguez, M., López, J., Herrera, V., Orive, A. y Creus, A. (2012). Nanopartículas metálicas y plasmones de superficie: una relación profunda. *Avances en ciencia e .ingeniería*, 3(2): 67-78.
 39. Dang, Z., Li, Y. and Zhan, Y. (2014). Systematic analysis of the structural, elastic, and electronic properties of Ti–Cu–Me (Me = Al, Ga and In) ternary intermetallics. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 75(1):453 – 460.
 40. Devi, H., Pagare, G., Chouhan, S. and Sanyal, S. (2015). Electronic and high pressure elastic properties of RECd and REHg (RE^{1/4}Sc, La and Yb) intermetallic compounds. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 76 (1): 70–81.
 41. Ebel, F., Idler, S., Prede, G. y Scholz, D. (2008). Fundamentos de la técnica de automatización. Denkendorf, Alemania. Festo Diadactic.
 42. Elia, P., Zach, R., Hazan, S., Kolusheva, S., Porat, Z., & Zeiri, Y. (2014). Green synthesis of gold nanoparticles using plant extracts as reducing agents. *International Journal of Nanomedicine*, 9(1): 4007 – 4021. doi:10.2147/IJN.S57343.

43. El-Sheikh, S. Mohamed, R. and Fouad, O. (2009). Synthesis and structure screening of nanostructured chromium oxide powders. *Journal of Alloys and Compounds*, 482(1-2): 302 – 307. doi:10.1016/j.jallcom.2009.04.011.
44. Enzimas, (s.f.). En Wikipedia. Recuperado el 20 de Julio de 2015 de <https://es.wikipedia.org/wiki/Enzima>.
45. España, Ministerio de Empleo y Seguridad Social. (2015). Seguridad y salud en el trabajo con nanomateriales. Madrid. INSHT.
46. Esteve, J., Romero, J., Gómez, M. and Lousa, A. (2004). Cathodic chromium carbide coatings for molding die applications. *Surface and Coatings Technology*, 188(1): 506 – 510.
47. Extraído de http://www.mim-us.es/estructuras_cristalinas/estructuras_cristalinas.html, el 14 de Julio de 2015.
48. Farzane, F. and Najafi, M. (2011). Synthesis and Characterization of Cr₂O₃ Nanoparticles with Triethanolamine in Water under Microwave Irradiation. *Journal of Sciences, Islamic Republic of Iran*, 22(4): 329-333.
49. Forough, M. and Farhadi, K. (2010). Biological and green synthesis of silver nanoparticles. *Turkish J. Eng. Env. Sci.* 34(1): 281 – 287.
50. Gaceta electronica Innovación. (2014). Desarrolla UAM tecnología para tratar el lirio acuático, 2014(5a): 1 -2. Nov.-Dic. 2014, UAM.
51. Gan, P., Ng, S., Huang, Y. and Li, S. (2012). Green synthesis of gold nanoparticles using palm oil mill effluent (POME): A low-cost and eco-friendly viable approach. *Bioresource Technology*, 113 (1): 132–135. doi:10.1016/j.biortech.2012.01.015.
52. Gasik, M. (2013). Handbook of ferroalloys theory and technology. 1a. Edition. Oxford, Massachusetts, USA.
53. Ghodake, G., Deshpande, N., Lee, Y. and Jin, E. (2010). Pear fruit extract-assisted room-temperature biosynthesis of gold nanoplates. *Colloids Surf. B: Biointerfaces*, 75(2):584–589.
54. Gidikova, N., Ciaś, A., Petkov, V., Madej, M., Sułowski, M. and Valov, R. (2014). Wear resistant chromium coatings modified with diamond nanoparticles. *Archives of metallurgy and materials*, 59(4): 1513 – 1516.
55. Goel, S., Haque Faisal, N., Ratia, V., Agrawal, A. and Stukowski, A. (2014). Atomistic investigation on the structure–property relationship during thermal spray nanoparticle impact. *Computational Materials Science*. 84(1): 163–174.
56. Gómez, S. (2010). El gran libro de Solidworks. México. Alfaomega.
57. González, E. and Badillo, C. (2014). Aplicación al control de procesos batch. *Revista Tecnura*, 189-204. <http://dx.doi.org/10.14483/udistrital.jour.tecnura.2014.SE1.a14>
58. González, J.. (2008). Red de innovación en nanotecnología en el estado de Nuevo León: Contribuciones del CIMAV. 15 de septiembre de 2015, de CIMAV Sitio web: file:///C:/Users/metalmarcos/Downloads/13_JESUS_GONZALEZ-RED_DE_INNOVACION_EN_NANOTECNOLOGIA.pdf.
59. Grande A. H. (2007). Nanotecnología y Nanopartículas Magnéticas: La Física Actual en la Lucha Contra la Enfermedad, *Rev. R. Acad. Cienc. Exact. Fís. Nat. (Esp)*, 101(2): 321-327

60. Guo, D., Xie, . and Luo, J. (2014). Mechanical properties of nanoparticles: basics and applications. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 47(1): 1 – 25. doi:10.1088/0022-3727/47/1/013001.
61. Guo, J., Chang, B., Jin, M., Yang, M., Wang, H., Wang, M., Huang, J., Zhou, L. and Zhang, Y. (2014). Theoretical study on electronic and optical properties of In_{0.53}Ga_{0.47}As(1 0 0) _2 (2 × 4) surface. *Applied Surface Science*, 288(1): 238 – 243. doi.org/10.1016/j.apsusc.2013.10.014.
62. Gupta, R., Mitchelle, E., Candler, J., Kahol, P., Ghos, K. and Dong, L. (2014), Facile synthesis and characterization of nanostructured chromium oxide. *Powder Technology*. 254(1): 78 – 81.
63. Hasnip P., Refson K., Probert M., Yates J., Clark S and Pickard C. (2014). Article review: Density functional theory in the solid state. *Phil. Trans. R. Soc. A*. 372(1).
64. Haverkamp, R. and Marshall, A. (2009). The mechanism of metal nanoparticle formation in plants: limits on accumulation. *Journal of Nanoparticle Research*, 11(6): 1453-1463. <http://dx.doi.org/10.1007/s11051-008-9533-6>.
65. He, J. and Schoenung, J. (2002). Review Nanostructured coatings. *Materials Science and Engineering*, A336 (1): 274–319. Chemical Vapor Deposition of N-Doped Graphene and Carbon Films: The Role of Precursors and Gas Phase. *ACS Nano*, 8(4): 3337–3346.
66. Hielscher – Tecnología de Ultrasonidos. Ultrasonidos: Aplicaciones y Procesos. Recuperado de <http://www.hielscher.com/es/tecnolo.htm>.
67. Hones, P., Diserens, M. and Levy, F. (1999). Characterization of sputter-deposited chromium oxide thin films. *Surface and Coatings Technology*, 120–121: 277–283.
68. Ibrahim, H. M. M. (2015) Green synthesis and characterization of silver nanoparticles using banana peel extract and their antimicrobial activity against representative microorganisms, *Journal of Radiation Research and Applied Sciences*, <http://dx.doi.org/10.1016/j.jrras.2015.01.007>.
69. INEGI. (2014). El clima. Recuperado de <http://www.cuentame.inegi.org.mx/monografias/informacion/pue/territorio/clima.aspx?tema=me&e=21>.
70. Ingale, A. and Chaudhari, A. (2013). Biogenic Synthesis of Nanoparticles and Potential Applications: An Eco-Friendly Approach. *J Nanomed & Nanotechol*, 4(165). doi:10.4172/2157-7439.1000165.
71. International Union of Crystallography. (2014). International Tables for Crystallography (eight-volume set). Lugar: Brock, Caroline.
72. Ipsita, K., Kousik, M. and Syed, S. (2013). Green synthesis of gold nanoparticles using a glucan of an edible mushroom and study of catalytic activity. *Carbohydrate Polymers*, 91(1): 518-528.
73. ISO/TS 80004-1. (2010). Nanotechnologies. Vocabulary. Part 1: Core terms.
74. ISO/TS 80004-4. (2011). Nanotechnologies. Vocabulary. Part 4: Nanostructured materials.
75. Jaber, B. and Laânab, L. (2014). One step synthesis of ZnO nanoparticles in free organic medium: Structural and optical characterizations. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 27 (1): 446–451.
76. Jae, Y. and Beom, S.. (2009). Rapid biological synthesis of silver nanoparticles using plant leaf extracts, *Bioprocess Biosystematics Engineering*, 32(1): 79-84.

77. Jaswal, V., Arora, A., Singh, J., Kinger, M. and Gupta, V. (2014). Synthesis and Characterization of Chromium Oxide Nanoparticles. *Orient J Chem*, 30(2): 559-566. [.doi.org/10.13005/ojc/300220](https://doi.org/10.13005/ojc/300220).
78. Ji, A., Wang, W., Seng, G., Wang, Q., Sun, C. and Wen, L. (2004). Microstructures and mechanical properties of chromium oxide films by arc ion plating. *Materials Letters*, 58(14): 1993–1998.
79. Karki, B., Stixrude, L., Clark, S., Warren, M., Ackland, G. and Crain, J. (1997), Elastic properties of orthorhombic MgSiO₃ perovskite at lower mantle pressures, *Am. Mineral.*, 82(1): 635–638.
80. Kirtee, W., Amit, C., Rajeev, C. and Kaul-Ghanekar, R. (2013). Synthesis and characterization of gold nanoparticles using *Ficus religiosa* extract. *Carbon – Sci. Tech*, 5(1): 203 – 210.
81. Korbekandi, H., Asheri, Z., Iravani, S. and Abbasi, S. (2013). Optimization of biological synthesis of silver nanoparticles using *fusarium oxysporum*. *Iranian Journal of Pharmaceutical Research*, 12(3): 289 – 298.
82. Kulkarni, N. and Mulddapur, U. (2014). Biosynthesis of metal nanoparticles: A review. *Journal of Nanotechnology*, 1(1): 1 – 8.
83. Lengke, M., Sanpawanitchakit, C., Southam, G: (2011). Biosynthesis of gold nanoparticles: a review. In: Rai and N. Duran (eds.), *Metal Nanoparticles in Microbiology*, 1st ed, (pp 37-74). New York: Springer.
84. Leylan, A. and Matthews, A. (2000). On the significance of the H/E ratio in wear control: a nanocomposite coating approach to optimised tribological behavior. *Wear*, 246 (1): 1–11.
85. Li, Q., Songa, L., Panb, L., Chenc, Y., Ling, M., Zhuang, . and Zhang, X. (2014). Density functional theory studies of electronic properties of PdAg/Pd surface alloys. *Applied Surface Science*, 288(1): 69– 75. doi.org/10.1016/j.apsusc.2013.09.116.
86. Li, Y., Gao, Y., Xiao, B., Min, T., Yang, Y., Shengqiang, M. and Yi, D. (2011). The electronic, mechanical properties and theoretical hardness of chromium carbides by first-principles calculations. *Journal of Alloys and Compounds*, 509(1): 5242–5249. [doi:10.1016/j.jallcom.2011.02.009](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2011.02.009).
87. Liang, Y., Li, Y., Yu, Q., Zhang, Y., Zhao, W. and Zeng, Z. (2015). Structure and wear resistance of high hardness Ni-B coatings as alternative for Cr coatings. *Surface & Coatings Technology*, 264(1): 80–86.
88. Logeswari, P., Silambarasan, S. and Abraham, J. (2013). Ecofriendly synthesis of silver nanoparticles from commercially available plant powders and their antibacterial properties. *Scientia Iranica F: nanotechnology*, 20 (3): 1049–1054. [doi:10.1016/j.scient.2013.05.016](https://doi.org/10.1016/j.scient.2013.05.016).
89. Logeswari, P., Silambarasan, S. and Abraham, J. (2015). Synthesis of silver nanoparticles using plants extract and analysis of their antimicrobial property. *Journal of Saudi Chemical Society*, 19(1): 311–317. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jsocs.2012.04>.
90. Lopez, M., Pecchia, M., Auf der Maur, M., Sacconi, F., Penazzi, G. and Di Carlo, A. (2014) . Atomistic simulations of InGa_N/Ga_N random alloy quantum well LEDs. *physica status solidi (c)*, 11(3-4): 632–634. [doi: 10.1002/pssc.20130045](https://doi.org/10.1002/pssc.20130045).

91. López-Cota, F. (2014). Tesis: Síntesis por molienda mecánica y caracterización de hafnatos de lantánidos de tipo $\text{Ln}_2\text{Hf}_2\text{O}_7$ para su uso en celdas de combustible y como recubrimientos de alta temperatura (Tesis de Maestría). Unstituto Tecnológico de Saltillo, Coahuila, México.
92. Lópezfuentes, A. (2013). Síntesis de nanopartículas de plata sobre fibras poliméricas renovables para su valuación como hilos de sutura (Tesis de maestría). Universidad Autónoma del Estado de México. Estado de México, México.
93. Lu Y., Lu, X., Mayers, B., Herricks, T. and Xi, Y. (2008). Synthesis and characterization of magnetic Co nanoparticles: A comparison study of three different capping surfactants. *Journal of Solid State Chemistry*, 181(1): 1530–1538.
94. Mahajan, M., Raipoot, S. and Pandey, O. (2015). In-situ synthesis of chromium carbide (Cr_3C_2) nanopowders by chemical-reduction route. *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*, 50(1): 113 – 119.
95. Mahajan, M., Raipoot, S. and Pandey, O. (2015). In-situ synthesis of chromium carbide (Cr_3C_2) nanopowders by chemical-reduction route. *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*, 50(1): 113 – 119.
96. Mahdavi, M.; Ahmad, M.B.; Haron, M.J.; Namvar, F.; Nadi, B.; Ab Rahman, M.Z.; Amin, J. (2013). Synthesis, surface modification and characterisation of biocompatible magnetic iron oxide nanoparticles for biomedical applications. *Molecules*, 18, 7533–7548.
97. Mai, M., Hikmet, G. and Etibar, H. (2012). Nanostructured Materials: Importance, Synthesis and Characterization-A Review. *Chemistry Journal*, 02(03): 118-125.
98. Makarov, V. Love, A., Sinitsyna, O., Makarova, S., Yaminsky, N., Taliansky, M. and Kalinina, N. (2014). Green Nanotechnologies: Synthesis of Metal Nanoparticles Using Plants. *Acta Nature*, 6(20): 35 – 44.
99. Milman, V. and Warren, MC. (2001). Elastic properties of TiB_2 and MgB_2 . *Journal of Physics: Condensed Matter*, 13 (24): p. 558.
100. Milman, V. and Warren, MC. (2001). Elasticity of hexagonal BeO . *Journal of Physics: Condensed Matter*, 13 (2): p. 241.
101. Miranda, A., Guzman, D. Niño de R., L., Vázquez, R. y Cruz-Irison, M. (2007). Densidad de estados electrónicos de nanoalambres de Germanio. *Revista mexicana de física*, 53(5): 78 – 82.
102. Mohanan, S. and Soundarapandian, K. (2013). Green synthesis of gold nanoparticles using Citrus fruits (Citrus limon, Citrus reticulata and Citrus sinensis) aqueous extract and its characterization. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 102 (1): 15–23.
103. Morales, J., Moran, J., Quintana, M. y Estrada, W. (2009). Síntesis y caracterización de nanopartículas de plata por la ruta sol-gel a partir de nitrato de plata. *Rev. Soc. Quím. Perú* [online], 75(2): 177-184.
104. Mukherjee, P., Roy, M., Mandal, B. (2008). Green synthesis of highly stabilized nanocrystalline silver particles by a non-pathogenic and agriculturally important fungus *T. asperellum*. *Nanotechnology*, 19(7), 75103–75110.
105. Munive-Olarte, A. (2014). (Tesis de Licenciatura). Universidad Politécnica Autónoma del Estado de Puebla. Puebla, México.

106. Murty, B., Shankar, P., Raj, B., Rath, B., & Murday, J. (2013). Applications of Nanomaterials. In *Textbook of Nanoscience and Nanotechnology*. (pp. 107-148). Springer Berlin Heidelberg.
107. Musarrat, J., Dwivedi, S., Singh, B., Saquib, Q. & Khedhairi, A. (2011). *Microbes and Microbial Technology*. London: Springer.
108. Nama, M., Mijbil, Z., Aboud, H. and Abdul-Lettif, A. (2012). Ab Initio Calculations for the Effect of Pressure on the Structural Properties of Si Nanoclusters. *World Journal of Condensed Matter Physics*, 2(1): 133-138.
109. Naz, S., Khaskheli, A., Aljabour, A., Kara, H., Talpur, F., Sherazi, S., kheli, A. and Jawaid, S. (2014). Synthesis of highly stable cobalt nanomaterial using gallic acid and its application in catalysis. *Hindawi Publishing Corporation Advances in Chemistry*, 2014(1): 1 - 6. doi.org/10.1155/2014/686925.
110. Njagi. E., Huang, H., Stafford, L., Genuino, H., Galindom H., Collins, J., Hoag, G. and Suib, S. (2011). Biosynthesis of iron and silver nanoparticles at room temperature using aqueous sorghum bran extracts. *Langmuir*, 27(1):264-71.
111. Olmo. (s.f.). El nivel de Fermi. Recuperado de <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbasees/solids/fermi.html#c2>.
112. Ortiz, S. (2008). CNN EXPANSIÓN. Del laboratorio al mercado. 30, julio, 2008. <http://www.cnnexpansion.com/manufactura/tendencias/del-laboratorio-al-mercado>.
113. Pearson, W. B. (1972). *The Crystal Chemistry and Physics of Metals and Alloys*, Wiley, New York, pp.151.
114. Ponarulselvam, S., Panneerselvam, C., Murugan, K., Aarthi, N., Kalimuthu, K. and Thangamani, S. (2012). Synthesis of silver nanoparticles using leaves of *Catharanthus roseus* Linn. G. Don and their antiplasmodial activities. *Asian Pac J Trop Biomed*, 2(7): 574-580. doi:10.1016/S2221-1691(12)60100-2.
115. Ponsa, P., and Granollers, A. (2009). *Diseño y Automatización Industrial*.
116. Poole, C. and Owens, F. (2003). *Introduction to nanotechnology*. Wiley & Sons, Inc. 1ª. Ed, Hoboken, New Jersey, USA. p. 29.
117. Poole, C. Jr. & Owens, F. (2003). *Introduction to Nanotechnology*, Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons, p. 5-6.
118. Prasad, R. (2014). Synthesis of silver nanoparticles in photosynthetic plants. *Journal of Nanoparticles*, 2014(1): 1 – 8.
119. Puentes, V., Krishnan, K. and Alivisatos, A. (2002). Synthesis of Colloidal Cobalt Nanoparticles with Controlled Size and Shapes. *Topics in Catalysis*, 19(2): 145 - 148. Doi: 10.1023/A:1015252904412.
120. Rai, M. & Durn, N (2011). *Metal Nanoparticles in Microbiology*. London: Springer.
121. Rakesh, Ananda, S. and Netkal M. (2013). Synthesis of Chromium(III) Oxide Nanoparticles by Electrochemical Method and Mukia Maderaspatana Plant Extract, Characterization, KMnO₄ Decomposition and Antibacterial Study. *Modern Research in Catalysis*, 2(1): 127-135.
122. Ramanathan, R., Field, M., O'Mullane, A., Smooker, P., Bhargava, S., Bansal, V. (2013). Aqueous phase synthesis of copper nanoparticles: a link between heavy metal resistance and nanoparticle synthesis ability in bacterial systems. *Nanoscale* 21. 5(1): 2300–2306. doi:10.1039/C2NR32887A.

123. Ramesh, C., Mohan. K., Senthil, M. and Ragunathan, V. (2012). Antibacterial activity of Cr₂O₃ nanoparticles against E.coli; Reduction of chromate ions by Arachis hypogaea leaves. *Archives of Applied Science Research*, 4 (4):1894-1900.
124. Research And Markets. (2011). Nanomaterials Production 2002-2016: Production Volumes, Revenues and End User Market Demand. Septiembre, 2011. http://www.researchandmarkets.com/reports/1924269/nanomaterials_production_20022016_production.
125. Research And Markets. (2013). The Global Market for Metal Oxide Nanoparticles to 2020. Marzo, 2013. http://www.researchandmarkets.com/reports/2488811/the_global_market_for_metal_oxide_nanoparticles.
126. Rico-Moctezuma. A., Vilchis-Nestor, R., Sánchez-Mendieta, V., Avalos-Borja, M. y Camacho-López, M. (2010). Biosíntesis de nanopartículas de oro mediante el extracto de Opuntia ficus-indica. *Superficies y Vacío*, 23(S): 94-97.
127. Rodolfo F.K. Gunnewiek , Camilla F. Mendes, Ruth H.G.A. Kiminami. (2014). Synthesis of Cr₂O₃ nanoparticles via thermal decomposition of polyacrylate/chromium complex. *Materials letters*, 29(1): 54 – 56.
128. Rosado, L. (1987). Electrónica física y microelectrónica. Paraninfo S. A. 1ª. Ed. Madrid, España.
129. Rosano-Ortega, G. (2009). Síntesis de nanopartículas mediante un proceso autosustentado (Tesis doctoral). Universidad Autónoma del Estado de México. Estado de México, México.
130. Rosano-Ortega, G., Avila-Perez, P., Zavala, G., Santiago, P., Canizal, G. and Ascencio, J. (2007). Inorganic nanoparticles induced naturally in water hyacinth: Structural and chemical study. *Jorunal of bionaoscience*, 1(1): 51 – 59.
131. Rosano-Ortega, G., Schabes-Retchkiman, P., Zorrilla, C., Liu, H., Canizal, G., Avila-Perez, P. and Ascencio, J. (2006). Synthesis and characterization of Mn quantum dots by bioreduction with water hyacinth. *Journal of nanosciencie and nanotechnology*, 6(2): 1 – 5.
132. Rouleau, C.,Shih, C., Wu, C., Zhigilei, L., Puretzky, A. and Geohegan, D. (2014). Nanoparticle generation and transport resulting from femtosecond laser ablation of ultrathin metal films: Time-resolved measurements and molecular dynamics simulations. *Appl. Phys. Lett.* 104(193106):1-5.
133. Ruiz, P. (2008). Mecatronica Revolución para el siglo XXI. Revista Metal actual. 2008(8): 46 – 53.
134. Saion, E., Gharibshahi, E. and Naghavi, K. (2013). Size-Controlled and Optical Properties of Monodispersed Silver.
135. Sala de Inversión (7 de febrero de 2014). Nanotecnología: Una llamativa oportunidad de inversión. El economista, Recuperado de <http://eleconomista.com.mx/fondos/2014/02/07/nanotecnologia-llamativa-oportunidad-inversion>.
136. Salunke, B., Shin, A. Sawant, S. (2014). Rapid biological synthesis of silver nanoparticles using Kalopanax pictus plant extract and their antimicrobial activity. *J Korean Journal of Chemical Engineering*, 31(11): 2035 – 2040. <http://dx.doi.org/10.1007/s11814-014-0149-5>.

137. Sampieri, R., Collado, C. & Lucio, P. (2010). Metodología de la Investigación. México: El Comercio S.A.
138. Sargentelli, V., & Ferreira, A. (2010). Magnetic nanoparticles: the cobalt. *ECLÉTICA química*, 35 (4): 153 – 163.
139. Sathishkumar M., Sneha K., Yun Y.S. (2010). Immobilization of silver nanoparticles synthesized using Curcuma longa tuber powder and extract on cotton cloth for bactericidal activity. *Bioresour. Technol*, 101(20):7958–7965.
140. Sermakkani, M. and Thangapandium, V. (2012). Biological synthesis of silver nanoparticles using medical plant (cassia italic) leaves. *International Journal of Current Research*, 4(10): 53 – 58.
141. Sharma, V., Yngard, R. & Lin, Y. (2009). Silver nanoparticles: green synthesis and their antimicrobial activities. *Adv Colloid Interface Sci* 2009, 145, 83–96.
142. Šimůnek, A. (2007). How to estimate hardness of crystals on a pocket calculator. *Phys. Rev. B*. 75(7).
143. Singaravelu, G., Arockiamary, J., Ganesh Kumar, V. and Govindaraju. K. (2007). A novel extracellular synthesis of monodisperse gold nanoparticles using marine alga, *Sargassum wightii* Greville. *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, 57(1): 97 – 101. doi:10.1016/j.colsurfb.2007.01.010.
144. Singh, J. (1997). Dispositivos semiconductores. Mc Graw Hill. 1ª. Ed. México, D.F., México.
145. Son, S., Jang, Y and Yoon, K. (200). Synthesis of monodisperse chromium nanoparticles from the thermolysis of a Fischer carbene complex. *Chem. Commun*, 1(1): 86-88.
146. Stulov, Y. and Kuznetsov, S. (2014). Synthesis of chromium carbide coatings on carbon steels in molten salts and their properties. *Glass Physics and Chemistry*, 4(3): 324-328.
147. Sun, Y. and Xia, Y. (2002). *Science* 13, 298(1): 2176 – 2179.
148. Tamuly, C., , Hazarika, M., Borah, S., Das, M. and Boruah, M. (2013). In situ biosynthesis of Ag, Au and bimetallic nanoparticles using *Piper pedicellatum* C.DC: Green chemistry approach. *Colloids and Surfaces B:Biointerfaces*, 102 (1): 627–634. doi: 10.1016/j.colsurfb.2012.09.007.
149. Tan, S., Sherman, L. and Ford, W. (2004). Nanoscale compression of polymer microspheres by atomic force microscopy. *Langmuir*, 20 (17): 7015 – 7020. doi:10.1021/la049597c.
150. Thakkar, K., Mhatre, S. and Parikh R. (2010). Biological synthesis of metallic nanoparticles. *Nanomedicine: Nanotechnology, Biology, and Medicine*, 6(1): 257 – 262. doi:10.1016/j.nano.2009.07.002.
151. Thomas, K. G. (2009). Tuning functional properties: From nanoscale building blocks to hybrid nanomaterials. *Current Trends in Science, Platinum Jubilee Special*. 53 – 66.
152. Tikariha, S., Singh, S., Banerjee, S. & Vidyarthi, A. (2012). Biosynthesis of gold nanoparticles, scope and application: A review. *International Journal of Pharmaceutical Sciences and Research*, 3(6), 1603-1615.
153. Trejo, A. (2005). Obtención de nanopartículas de MoO₃ en un molino de baja producción (Tesis de Licenciatura). Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Hidalgo, México.

154. Tripathy, A., Raichur, A.M., Chandrasekaran, N., Prathna, T.C., Mukherjee, A. (2010). Process variables in biomimetic synthesis of silver nanoparticles by aqueous extract of *Azadirachta indica* (Neem) leaves. *J. Nanopart. Res*, 12(1): 237 – 246.
155. UAM. (2014). Desarrolla la UAM tecnología para tratar el lirio acuático. *Gaceta electrónica Innovación*. 59(1): 1-2.
156. Umoren, S., Obot, I. and Gasem, Z. (2014). Green Synthesis and Characterization of Silver Nanoparticles Using Red Apple (*Malus domestica*) Fruit Extract at Room Temperature. *J. Mater. Environ. Sci.* 5 (3): 907-914.
157. Unión Europea. (2012). Comisión SWD 288 final: Segunda revisión de la normativa sobre los nanomateriales.
158. Universidad de Oviedo, (s.f.). Dispositivos electrónicos y fotónicos. Recuperado de <http://slideplayer.es/slide/2484967/>.
159. Universidad de Sevilla. (2015). Estructura cristalina básica para metales. Recuperado de http://www.us.es/estudios/grados/plan_207/asignatura_2070012.
160. Vadlapudi, V. and Kaladhar, K. (2014). Review: Green Synthesis of Silver and Gold Nanoparticles. *Middle-East Journal of Scientific Research*, 19 (6): 834-842.
161. Vázquez-Contreras, E. (2003). Efecto de la temperatura en la actividad enzimática. Recuperado de <http://laguna.fmedic.unam.mx/~evazquez/0403/velocidad%20reaccion%20enzimatica3.html>.
162. Veerasamy, R., Xin, T., Gunasagaran, S., Xiang, T., Yang, E., Jeyakumar, N and Arumugam, S. (2011). Biosynthesis of silver nanoparticles using mangosteen leaf extract and evaluation of their antimicrobial activities. *Journal of Saudi Chemical Society*, 15 (1): 113–120. doi:10.1016/j.jscs.2010.06.004.
163. Wang, J and Zhou, Y. (2004). Dependence of elastic stiffness on electronic band structure of nanolaminate M_2 Al C (M =Ti, V, Nb, and Cr) ceramics. *Phys. Rev. B*, 69(21): 4111. doi.org/10.1103/PhysRevB.69.214111.
164. Winkler, M. and Sander, W. (2001). The Structure of meta-Benzynes Revisited A Close Look into σ -Bond Formation. *J. Phys. Chem.*, 105(45):10422–10432. doi: 10.1021/jp012100c.
165. Wu, Z., Hao, X., Liu, X. and Mengli, J. (2007). Structures and elastic properties of OsN_2 investigated via first-principles density functional calculations. *Phys. Rev. B*, 75(5): 4115. doi.org/10.1103/PhysRevB.75.054115.
166. Yokoyama, M., Nakada, K. and Ishii, A. (2014). Density functional theory calculations for Pd adsorption on SO_4 adsorbed on h-BN. *Computational Materials Science*, 82 (1): 231–236.
167. Yu, R., Jiang, Y. and Zhou, R. (2014). First-principle studies of the stability, electronic and elastic properties of trigonal-type M_2N (M =Cr, V, Nb and Ta). *Solid State Communications*, 186(1): 32–37.
168. Zanella, R., (2012), Metodologías para la síntesis de nanopartículas: controlando forma y tamaño, *Mundo nano*, 5 (1), 69-81.
169. Zayago, E., Foladori, G., Appelbaum, R. y Arteaga Figueroa, E. (2013). Empresas nanotecnológicas en México: hacia un primer inventario. *Estudios Sociales*, 42 (1): 13 - 25.
170. Zhao, Z., Zheng, H., Liu, S., Shen, J., Song, W. and Chen, J. (2015). Low temperature synthesis of chromium carbide (Cr_3C_2) nanopowders by a novel

- precursor method. *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*, 48(1): 46 – 50.
171. Zhenling, D., Yitai, L., Yong, W., and Yongzhong, Z. (2014). Systematic analysis of the structural, elastic, and electronic properties of Ti–Cu–Me (Me $\frac{1}{4}$ Al, Ga and In) ternary intermetallics. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 75(1): 453-460.
172. Zhenzhao, P. and Yi, Z. (2008). A novel method to prepare Cr₂O₃ nanoparticles. *Materials Letters*, 62(3): 504 – 506. doi:10.1016/j.matlet.2007.05.073.
173. Zhigilei, L., Volkov, A., and Dongare, A. (2012). Computational Study of Nanomaterials: From Large-Scale Atomistic Simulations to Mesoscopic Modeling., *Encyclopedia of Nanotechnology*, B. Bhushan (Ed.), (Springer, Heidelberg, 2012), part 4, pp. 470-480.

ANEXOS

ANEXO 1. TABLAS

Tabla A-1. Métodos comunes utilizados para síntesis de nanopartículas.

Aproximación	Método	Requerimientos y equipos específicos
Top-Down (de arriba hacia abajo)	Evaporación térmica	Cámara de vacío. Control preciso de las condiciones del crecimiento
	Depósito químico en fase vapor (CVD, por sus siglas en inglés)	Descomposición de compuestos volátiles. Reactor (cámara de vacío).
	Preparación de clusters gaseosos	Laser pulsado de alta potencia. Gas inerte. Condiciones de ultra-alto-vacío
	Implantación de iones	Fuente de iones Acelerador de iones Cámara de impacto de iones.
	Molienda	Molinos de alta eficiencia Recuperación de partículas de tamaño manométrico por medios físicos.

Aproximación	Método	Requerimientos y equipos específicos
Bottom-Up (de abajo hacia arriba)	Método coloidal	Precursor, sal de un metal Agente reductor Un estabilizador.
	Reducción fotoquímica y radioquímica	
	Irradiación con microondas	Calentamiento asistido por microondas.
	Utilización de dendrímeros	uso de micelas, emulsiones y dendrímeros como nanoreactores.
	Síntesis solvotermal (hidrotermal)	Calentamiento del precursor a temperaturas superiores a su punto de ebullición. Presión superior a la atmosférica.
	Sol-gel	Muy sensibles a la humedad. Deshidratación y tratamiento térmico.

Tabla A-2. Operaciones utilizadas de forma frecuente para síntesis inducida de nanopartículas por biorreducción

Nanopartículas	Referencia	Materia orgánica (agente reductor) (A)	Sal metálica (B)	Proporciones y cantidades para síntesis inducida		Operación realizada
				A (mL)	B (mL)	
Plata (Ag)	Astalakshmi, 2013	Corteza de <i>Eucalyptus globulus</i>	AgNO ₃	10	190	1. Mezclado 2. Incubación y agitación magnética. 3. Reposo
	Azizi, 2013	Macroalga marina café (<i>Sargassum Muticum</i>)		50	50	1. Mezclado 2. Agitación magnética 3. Centrifugado 4. Reposo
	Umoren, 2014	Extracto de manzana roja (<i>Malus domestica</i>)		5	50	1. Mezclado 2. Agitación manual 3. Reposo
	Anandini, 2013	Extracto de hoja de <i>Centella Asiática</i>		200	--	1. Mezclado 2. Centrifugado 3. Almacenamiento
	Aki, 2013	Extracto de hoja de algarrobo		5	100	1. Mezclado 2. Agitación magnética 3. Centrifugado 4. Reposo
Oro	Birendra, 2014	Extracto de hojas de ginseng de la india (<i>Withania Somnifera</i>)	Ácido áurico (HAuCl ₄)	100	10 (1x10 ⁻³ M)	1. Mezclado 2. Agitación magnética 3. Reposo
	Ipsita, 2013	Glucano de hongo comestible (<i>Pleurotus florida</i>)		60	20 (1x10 ⁻³ M)	1. Mezclado 2. Agitación magnética 3. Reposo
	Mohanan, 2013	Extracto de Jugo de cítricos (limón, naranja)		1 - 6	50	1. Agitación magnética con calentamiento (sal metálica) 2. Mezclado 3. Agitación magnética 4. Almacenamiento en botella ámbar 5. Centrifugado 6. Reposo
Cromo	Ramesh, 2012	Extracto de hojas de cacahuete (<i>Arachis hypogaea</i>)	Dicromato de potasio (K ₂ Cr ₂ O ₇)	10	10	1. Mezclado 2. Reposo
Cobalto (Co)	Naz, 2014	Ácido gálico	CoCl ₂ ·6H ₂ O (99.9%)	1	10	3. 4. Mezclado 5. Agitación magnética 6. Reposo
						7.

Tabla A-3. Propuestas de métodos de síntesis por biorreducción para la obtención de nanopartículas metálicas.

Material	Autor	Materia orgánica	Sal metálica	Metodología de síntesis	Proporciones y cantidades	Equipo de laboratorio. utilizado	Especificaciones de equipo y de funcionamiento
Plata (Ag)	Astalakshmi, (2013)	<i>Eucalyptus globulus</i> , Labill (corteza)	AgNO ₃	Preparación de materia biorreductora	- 10 g de polvo fino de corteza. - 100 ml de agua destilada (Caldo de corteza)	Molino (no especificado) Calentador	No especificado Calentar a 90°C/ 10 min
				Síntesis inducida (medio de reacción)	- 10 ml de medio reductor. - 190ml de solución acuosa de AgNO ₃	Incubador – agitador (ORBITEK)	Vel. 250 rpm Temp. 30° C Tiempo 24 horas
				Caracterización	Uv-vis FTIR XRD TEM		Barrido 300-600 nm
	Azizi, (2013)	Macroalga marina café (<i>Sargassum Muticum</i>)		Preparación de materia biorreductora	- Secado en frío a -20°C. - 1 g de polvo fino. - 100 ml de agua destilada	Molino (no especificado) Agitador magnético Calentador Filtrado (0.2 µm)	No especificado 20 min 100° C / 20 min -20° C hasta su uso
				Síntesis inducida (medio de reacción)	- 50 ml de solución acuosa de AgNO ₃ (1x10 ⁻³ M) - 50 ml de medio reductor	-Matraz Erlenmeyer - Agitador magnético -Centrifugadora	Capacidad 150 ml Temp 35° C / 30 min Reposo de 2 horas a temp. Ambiente 6000 rpm / 10 min (para colectar el producto café oscuro sólido) Secado del sólido a temperatura ambiente
				Caracterización			
	Umoren, 2014	Extracto de manzana roja (<i>Malus domestica</i>)	AgNO ₃	Preparación de materia biorreductora	• Lavado de la fruta • Corte en rebanadas y secado por aire caliente • Molido de la fruta. • 10 g de polvo fino de manzana. • 200 ml de agua doble destilada • Calentamiento de la solución	Agua doble destilada Equipo de corte no especificado Horno de aire caliente Molino no especificado Papel filtro	3 veces Temp 70° C/ 24 horas Papel filtro Whatma No. 1

						Plato caliente	10 min
				Síntesis inducida (medio de reacción)	- 50 ml de solución acuosa de AgNO ₃ (0.1 M) - 5 ml de extracto (sol. precursora)	Agitación manual Reposo	Tiempo no definido Reposo a temperatura ambiente
				Caracterización	Uv-vis SEM XRD FTIR	-Espectrómetro JASCO 670- UV-Vis -JSM- 5800 LV, JEOL -Rigaku Mini-flex II -Termo-científico, Nicolet 6700 FT-IR	Barrido 300–700 nm $\lambda = 1.5406 \text{ }^{\circ}\text{A}$ at 40 kV and 30 mA Rango de espectro de 4000 a 450 cm ⁻¹ y resolución de 4 cm ⁻¹
	Anandini, 2013	Extracto de hoja de <i>Centella</i> <i>Asiática</i>	AgNO ₃	Preparación de materia biorreductora	Secado de las hojas Molido de hojas a polvo fino 10 g polvo de hoja 100 ml de solvente organico (metanol 90%)	Al aire libre Horno de aire caliente Molino no especificado Matraz cónico Vibrador rotatorio Filtros Centrifuga	10 días Temo. 60° C / 24-48horas 180 – 200 rpm/ 24 horas 4 capas de tela de muselina 5000 rpm / 10 min.
				Síntesis inducida (medio de reacción)	200 ml de solución de extracto de hojas y AgNO ₃	Centrifuga Almacenamiento	18000 rpm / 25 min 40° C
				Caracterización	Uv-vis XRD	Espectrometro UV-1601 pc shimadzu Difractometro D8 Advanced Brucker Espectrofotometro BIORAD- FTS-7PC tipo FTIR SEM Hitachi S – 4500	

					FTIR SEM TEM	TEM Philips CM-10	
	Aki, 2013	Extracto de hoja de algarrobo		Preparación de materia biorreductora	Lavado con agua destilada Secado al sol Corte en trozos Hervir los trozos con 200 ml de agua destilada Filtrado del extracto Centrifugado Almacenado	Al aire libre Al aire libre No especificado Vaso de precipitados 250 ml Calentador Papel filtro Centrifuga No especificado	Varias veces hasta eliminar residuos de polvo y eliminar humedad residual. Trozos pequeños Temp. No reportada Tiempo 10 min Papel filtro Whatman No. 1 1200 rpm / 5 min A temperatura ambiente
				Síntesis inducida (medio de reacción)	5 ml de extracto 100 ml de AgNO ₃ (1x10 ⁻³ M)	Agitador magnético Centrifuga	Tiempo de síntesis 5 min Tiempo 2 – 5 min 15000 rpm / 5 min
				Caracterización	Uv-vis XRD FTIR SEM	Espectrofotómetro Shimadzu UV-1601 Difractómetro Shimadzu, XRD-6000 IR-Prestige-21 Shimadzu Hitachi S-4500 SEM	Barrido 200 – 800 nm Radiación Cu Kα, filtro de Ni y valores de 30 kV/30 mA Rango de 4,000 to 400 cm ⁻¹
Oro (Au)	Birendra, 2014	Extracto de hojas de ginseng de la india (<i>Withania Somnifera</i>)	Acido aurico (HAuCl ₄)	Preparación de materia biorreductora	Secado de la hoja y tallo. Molido en polvo 100 g de polvo mezclado con éter de petróleo Filtrado y concentrado	No especificado Aparato de Soxhlet	Al aire libre, tiempo no especificado Polvo grueso Tiempo: 8 horas, hasta tener liquido transparente.

				Síntesis inducida (medio de reacción)	100 ml de extracto 10 ml de HAuCl ₄ (1x10 ⁻³ M) Relaciones utilizadas 10:1, 5:1 y 1:1.	No especificado Vaso de precipitados de 500 ml Agitador magnético	Concentrado al vacío 200 rpm a temp. Ambiente Por goteo
				Caracterización	Uv-vis FTIR TEM	UV-1601 pc shimadzu Espectrofotometro tipo FTIR, BIORAD-FTS-7PC Microscopio, Philips CM-10	Barrido de 500 – 650 nm Rango de 4,000 to 400 cm ⁻¹
	Ipsita, 2013	Glucano de hongo comestible (<i>Pleurotus florida</i>)	Acido aurico (HAuCl ₄)	Preparación de materia biorreductora	Lavado del hongo Hervido en agua destilada, para obtener extracto. Centrifugado, filtrado y precipitado en alcohol para obtener polisacárido puro	No especificado	No especificado
				Síntesis inducida (medio de reacción)	60 ml (0.05% w/v) en solución con extracto y agua doble destilada. 20 ml de HAuCl ₄ (1x10 ⁻³ M)	Agitador magnético	Agitar en un baño de agua a 70 ° C
				Caracterización			
	Mohanani, 2013	Extracto de Jugo de cítricos (limón, naranja)	Ácido aurico (HAuCl ₄)	Preparación de materia biorreductora	Exprimir la fruta para obtener el jugo. Filtrado del jugo Centrifugado para eliminar impurezas	No especificado Mediante malla fina de nylon Centrifuga	No especificado Malla fina 10,000 rpm / 10 min
				Síntesis inducida (medio de reacción)	50 ml de HAuCl ₄ ·3H ₂ O (1x10 ⁻³ M) a ebullición y agitación magnética Agregado de extracto de 1 a 6 ml del jugo de cada fruta. Almacenado	Agitador magnético con calentador. Agitador magnético Botella mabar	Temp. No especificada Tiempo no especificado rpm no especificado Se agrega el extracto y se apaga el calentador. Agitar 20 min más. Se enfría a temperatura ambiente y se almacena.

					Purificación	Centrifuga	15000 rpm, repetidas ocasiones
				Caracterización	Uv-vis TEM XRD	Espectrómetro Shimadzu UV-1601 Microscopio de alta resolución JEOL 3010. Difractómetro XPERTTVPVR-7130	Barrido de 400 a 700 nm, resolución de 1 nm. La muestra se observa en una película de carbón con rejilla de cobre y evap del solvente en vacío. Radiación $\lambda = 1.54$ nm, 40 kV y 30 mA.
	Kirtee, 2013	Extracto de corteza del árbol <i>Ficus religiosa</i>	Ácido aurico (HAuCl ₄)	Preparación de materia biorreductora	La corteza se pica en trozos pequeños y se secó a temperatura ambiente. Molienda en polvo fino. Centrifugado y el sobrenadante es el agente reductor	No especificado No especificado Centrifuga	No especificado No especificado 13000 rpm / 15 min
				Síntesis inducida (medio de reacción)			
				Caracterización	Uv-vis XRD FTIR TEM		
	Aromal, 2012	Extracto de semillas de fenogreco (<i>Trigonella foenum-graecum</i>)	Ácido aurico (HAuCl ₄)	Preparación de materia biorreductora	Lavado de las semillas 5 g de semillas hervidas en agua deionizada Filtrado	No especificad No especificado No especificado	Lavado riguroso con agua deionizada y secado al sol. Tiempo 5 min Se filtra y se obtiene el extracto
				Síntesis inducida (medio de reacción)	0.5 ml de extracto adicionados a 30 ml de HAuCl ₄ (1x10 ⁻³ M, en ebullición. Concentraciones adicionales de extracto(1, 2 y 3 ml) Concentración constante de 3ml de extracto y cambio de pH del HAuCl ₄ (4 a 7)	Np especificado No expecificado	No especificado Ebullición continua por 2 min más.
				Caracterización	Uv-vis TEM	Espectrofotómetro UV-2450 Shimadzu Microscopio Tecnai G ² 30.	Barrido 400 a 800 nm No especificado

					XRD	Difractómetro XPERT-PRO	Radiación $\lambda=0.1542$ nm
					FTIR	Espectrómetro IR Pestic-21 Shimadzu.	No especificado
Cromo (Cr)	Ramesh, 2012	Extracto de hojas de cacahuate (<i>Arachis hypogaea</i>)	Dicromato de potasio ($K_2Cr_2O_7$)	Preparación de materia biorreductora	20 g de hojas aproximadamente. Lavado con agua doble destilada y cortado en pequeñas piezas Hervido con 100 ml de agua doble destilada Enfriado y filtrado.	No especificad Matraz Erlenmayer y calentador Papel filtro Whattman no. 42.(2.5 μ m).	Deben ser frescas Lavado riguroso Por 8 a 10 min Enfriado a temp. Ambiente.
				Síntesis inducida (medio de reacción)	14.5 g de $K_2Cr_2O_7$ 10 ml de solución de $K_2Cr_2O_7$ 10 ml de extracto Evaporación de fase líquida para obtener material sólido	Contenedor no especificado y agitador magnético Beaker de laboratorio No especificado	Disolver en 50 ml de agua deionizada para obtener una solución acuosa de $K_2Cr_2O_7$ Tiempo 15 min Mezclar y esperar la reacción. Después de 10 min se torna de anaranjado a verde (formación de Cr NPs). Mantener a temperatura ambiente hasta el proceso de evaporación de la fase líquida.
				Caracterización	Uv-vis FTIR SEM XRD	Espectrofotometro TU-1901, double beam Espectrofotometro infrarrojo Nicolet 870 Microscopio SEM LEO 1455 VP Difractometro analítico Phillips	Entre 4000 y 400 cm^{-1} y resolución 4 cm^{-1} $\lambda=1.5406$ Å
Cobalto (Co)	Naz, 2014	Ácido gálico	$CoCl_2 \cdot 6H_2O$ (99.9%)	Preparación de materia biorreductora	Ácido gálico		
				Síntesis inducida (medio de reacción)	10 ml de $CoCl_2 \cdot 6H_2O$ (1×10^{-3} M). Adicionar 1 ml de ácido gálico (1×10^{-3} M). Ajustar el pH de la solución a	Matraz volumétrico de 100 ml Agitador magnético Ajuste de pH	Tiempo de reacción 10 - 15 min. Para la caracterización se secó el producto final, mediante aire por 24 horas. Después de decantado o magnetización.

					9.5, adicionando NaOH (1 M).		
				Caracterización	Uv-vis IRFT XRD SEM		

Tabla A-4. Análisis de las diferentes propuestas de métodos de síntesis por biorreducción para la obtención de nanopartículas metálicas.

Material	Autor	Materia orgánica	Sal metálica	Agente reductor	Estructura y Tamaño de NP obtenida (nm)	Presentación del producto obtenido	SPR	Cambio de coloración
Plata (Ag)	Astalakshmi, (2013)	<i>Eucalyptus globulus</i> , Labill (corteza)	AgNO ₃		-Esférica Hexagonal Cúbica 30 -50	Solución acuosa	420	Amarillo a café oscuro
	Azizi, (2013)	Macro alga marina café (<i>Sargassum Muticum</i>)	AgNO ₃		Esférica 5 - 15	Sólido	420	Amarillo a café oscuro
	Umoren, 2014	Extracto de manzana roja (<i>Malus domestica</i>)	AgNO ₃		Forma de flor 145	Solución acuosa Sólido (polvo para pruebas XRD)	420	Amarillo a café oscuro
	Anandini, 2013	Extracto de hoja de <i>Centella Asiática</i>	AgNO ₃		Esférica 15 -45 Cúbica 30 - 50	Solución acuosa	420	Amarillo a café oscuro
	Aki, 2013	Extracto de hoja de algarrobo	AgNO ₃		Esférica 5 – 40	Solución acuosa	420	Amarillo a café oscuro
Oro (Au)	Birendra, 2014	Extracto de hojas de ginseng de la india (<i>Withania Somnifera</i>)	Acido aurico (HAuCl ₄)	Aminoácidos (Grupo – OH)	Hexagonal No reportado	Solución acuosa	545	
	Ipsita, 2013	Glucano de hongo comestible (<i>Pleurotus florida</i>)	Acido aurico (HAuCl ₄)	Polisacáridos (Glucano)	20.37 (0.02% w/v) 9.67 (0.04% w/v) 6.90 (0.08% w/v)	Solución acuosa	530-545	
	Mohanani, 2013	Extracto de Jugo de cítricos (limón, naranja)	Ácido aurico (HAuCl ₄)	Ácido cítrico y ácido ascórbico (grupo carbonilo)	Polimorfica (prisma y esferas) 32.2 (<i>C. limón</i>) 43.4 (<i>C. reticulata</i>) 56.7 (<i>C. sinensis</i>)	Solución acuosa	530-536	Incolora- purpura-rojo rubí en 10 min.
	Kirtee, 2013	Extracto de corteza del árbol <i>Ficus religiosa</i>	Ácido aurico (HAuCl ₄)	Fenoles, aminos y carboxilos	monodispersas Esférica 20 – 30 nm	Solución acuosa	540	Amarillo transparente a rojo vino.
	Aromal, 2012	Extracto de semillas de fenogreco (<i>Trigonella foenum-graecum</i>)	Ácido aurico (HAuCl ₄)	Fenoles	Esférica en su mayoría 18 (g4) alta con de extracto. 20(h4) pH alto	Solución acuosa	552 reduce a 533.	Después de 5 min de síntesis inducida, color azul (indica reducción de iones de Au ⁺³ Para g4, color rojo rubí.

Cromo (Cr)	Ramesh, 2012	Extracto de hojas de cacahuete (<i>Arachis hypogaea</i>)	Dicromato de potasio ($K_2Cr_2O_7$)	Azúcares, grupo aldehídos Grupo OH y –COO-iones carboxilo son los responsables de la estabilización.	Cr_2O_3 Hexagonal y cúbico 60 - 80	Sólido a partir de una fase líquida	458	Naranja (dicromato) a verde (iones de Cr(III)).
	Rakesh, 2013	Extracto de planta <i>Mukia Maderaspatana</i>	($K_2Cr_2O_7$)		Cr_2O_3 65	Solución acuosa	430 Valor característico (Rames, 2012)	
Cobalto (Co)	Naz, 2014	Ácido gálico	$CoCl_2 \cdot 6H_2O$ (99.9%)	Grupo fenol	Cúbica de cara centrada 4 - 9	Solución acuosa	350-370	Café Rosa a azul

ANEXO 2.

INFORMACIÓN TÉCNICA DE LOS COMPONENTES SELECCIONADOS

1.- BAÑO ULTRASÓNICO

BRANSON

CPX Series

Branson® CPX Ultrasonic Baths

General Description

Branson CPX ultrasonic baths feature digital controls with power tracking capabilities to adjust for light or heavy loads, high/low power control, degassing and sleep mode.

The CPX baths offer the following features:

- Sweep frequency eliminates standing waves and creates consistent cavitation throughout the tank.
- 40 kHz rugged industrial transducers.
- 99 minute digital timer with continuous ultrasonic operation.
- Last stored parameters are recalled when unit is turned back on.
- Constant activity/power tracking automatically maintains the ultrasonic power by adjusting for changes in liquid level and temperature caused by a light or heavy load. This helps ensure more uniform cleaning and consistent performance, even with multiple users or when bath conditions change.
- Degassing and conditioning the solutions: The CPX degassing period can be set up to 99 minutes. Extended degas time periods allow for "beyond cleaning" applications such as sample preparation, which includes degassing liquids, mixing and homogenization, dissolving solids, cell lysing, and dispersion of particles.
- High/low power control: When cleaning delicate parts, the CPX allows the user to lower the amplitude of the acoustic energy in the bath. 100% power to the tank for normal applications, 70% power for delicate applications. Manipulating the output waveform in this manner greatly helps to avoid damage to the components in the bath during the ultrasonic process.
- Controls are located above and behind the cleaning tank in an easily accessible control tower panel, and raised above the tank to avoid damage from cleaning solutions.
- Convenient built-in pour drains are featured on .5- and .75-gallon models. Tank drains with valves are incorporated on models 1.5-gallon and larger.
- Plastic body, chemical resistant.

Consult with your Branson representative about the Branson accessories and solution best suited for your application needs. Visit us at www.bransonic.com



EMERSON

BRANSON

CPX Series

CPX Series (Digital timer)

Model	Model 1800	Model 2000	Model 3000	Model 5000	Model 8000
Operating Part No.	CPX1800	CPX2000	CPX3000	CPX5000	CPX8000
Power	120 V	230/240 V	230/240 V	230/240 V	230/240 V
Part No.	CPX952-1198	CPX952-2198	CPX952-3198	CPX952-5198	CPX952-8198
Part No.	CPX1800-E	CPX2000-E	CPX3000-E	CPX5000-E	CPX8000-E
Part No.	CPX952-1398	CPX952-2398	CPX952-3398	CPX952-5398	CPX952-8398

Specifications

Model	Model 1800	Model 2000	Model 3000	Model 5000	Model 8000
Tank Capacity	1.9/0.5	2.8/0.75	5.7/1.5	9.5/2.5	20.8/5.5
Tank Size (LxWxD)	6 x 5.5 x 4	9.5 x 5.5 x 4	11.5 x 6 x 6	11.5 x 9.5 x 6	19.5 x 11.5 x 6
Inches	150 x 140 x 100	230 x 140 x 100	290 x 150 x 150	290 x 240 x 150	495 x 290 x 150
mm	150 x 140 x 100	230 x 140 x 100	290 x 150 x 150	290 x 240 x 150	495 x 290 x 150
Overall Size (LxWxD)	9.9 x 12 x 11.9	13.3 x 12 x 11.9	15.6 x 12.5 x 14.8	15.6 x 15.8 x 14.9	23.5 x 18.3 x 15.4
Inches	251 x 304 x 302	337 x 304 x 302	397 x 317 x 377	397 x 401 x 378	596 x 466 x 391
mm	251 x 304 x 302	337 x 304 x 302	397 x 317 x 377	397 x 401 x 378	596 x 466 x 391
Weight	7/3.2	9/4.1	12/5.4	14/6.4	24/11.8
Pounds/Kilograms	7/3.2	9/4.1	12/5.4	14/6.4	24/11.8
Frequency	40 kHz	40 kHz	40 kHz	40 kHz	40 kHz
Drain	No	No	Yes	Yes	Yes

NOTE: Tank cover included. For optimum cleaning results, Branson offers a line of accessories including perforated trays, solid trays, basket covers and support racks for your application needs.

América
Branson Ultrasonics Corp.
411 Eagle Road
Danbury, CT 06810, USA
T: 203 796-0400
F: 203 796-2120
Tollfree: 800 734-9262
www.bransonultrasonics.com

Europe and Africa and Middle East
Branson Ultrasonics SA
Ch. du Raineville de Courcelles 9
1217 Courmayeur
Switzerland
T: +41 (0)21 30 48 153
F: +41 (0)21 30 48 159
www.branson.ch

Asia
Branson Ultrasonics (China) Co., Ltd.
758 Hong Leong Road
Song Jiang, Shanghai, PRC, 201613
T: 86-21 2711 2588
F: 86-21 2717 8100
www.branson.com.cn

ISO 9001
Branson Ultrasonics is ISO 9001 certified.
All products are subject to change without notice. All dimensions are nominal.
All dimensions are in inches, unless otherwise specified.
Responsible for accuracy.

CE
Branson Ultrasonics is CE certified.
All products are subject to change without notice. All dimensions are nominal.
All dimensions are in inches, unless otherwise specified.
Responsible for accuracy.

Numero de catálogo 1-29221 Baño ultrasónico con capacidad de 2.8 Lt, con calentamiento y cronometro digital, modelo CPX2800H, 120V

Tiene un precio de 15,000.00 pesos + IVA

Se entrega de 30 a 45 días hábiles, pago de contado en compras menores a 5,000 pesos y 50% de anticipo en mayores a dicha cantidad, no hay cancelaciones ni devoluciones una vez hecha la orden de compra, en caso de que el producto este antes de el tiempo de entrega se da aviso del día de embarque. Todos los precios son masiva y se aplicara cargo por concepto de envio al interior de la republica

Fabian Juarez | Depto. de Cotizaciones

CIENTIFICA SENNA, S.A. DE C.V.

Correo: cotizaciones@cientificasenna.com

TEL: (55) 5741 1460 Ext.: 628, FAX: (55) 5741 2097

www.cientificasenna.com

2. MÁQUINA CENTRÍFUGA



Z 326 and Z 326 K




Specifications:

	Z 326	Z 326K
Max Capacity:	4 x 100 mL	4 x 100 mL
Max Speed :	18,000 rpm	18,000 rpm
Max RCF:	23,545 x g	23,545 x g
Timer:	10s- 99h 59s "Quick" button	10s- 99h 59s "Quick" button
Temp Range	N/A	-20° to 40°C
Dim. (WxDxH)	16 x 14 x 14 in 41 x 36 x 36cm	16 x 19 x 14 in 41 x 48 x 36 cm
Weight	96 lb/43 kg	132 lb/60 kg
Electrical	120V~, 60 Hz or 230V~ 50 Hz	120V~, 60 Hz or 230V~ 50 Hz

- Swing-out rotors for tubes and microplates
- Precise microprocessor control with g-force conversion, rotor ID and program memory
- Temperature range -20° to 40°C
- High speed rotors for 85, 50 and 30 mL tubes, up to 20,980 x g

Ordering Information

Cat#	Description
C0326*	Z 326 High Performance Non-refrigerated Centrifuge, 120V
C0326-K*	Z 326 High Performance Refrigerated Centrifuge, 120V

See pages 9 & 10 for rotors and accessories

* To order 230V units add -230V to the end of the catalog number.

Numero de catálogo 1-64832 Centrifuga modelo Hermle Z326, capacidad máxima de 4 x 100 ml, velocidad máxima de 18,000 rpm, rfc máximo: 23,545 x g.

Tiene un precio de 76,000.00 pesos + IVA

Numero de catálogo 1-64851 Rotor ángulo fijo, 6 x 85 ml (12,000 rpm / 18,510 x g)

Tiene un precio de 34,500.00

Numero de catálogo 1-64853 Rotor ángulo fijo, 6 x 50 ml

Tiene un precio de 32,000.00 pesos + IVA

Numero de catálogo 1-64854 Rotor angulo fijo, 30 x 15ml, para centrifugas Z306/Z326/Z326K

Tiene un precio de 24,000.00 pesos + IVA

Fabian Juarez | Depto. de Cotizaciones
 CIENTIFICA SENNA, S.A. DE C.V.
 Correo: cotizaciones@cientificasenna.com
 TEL: (55) 5741 1460 Ext.: 628, FAX: (55) 5741 2097
www.cientificasenna.com

ANEXO 3.

PROCEDIMIENTO PARA LA ELABORACIÓN Y SIMULACIÓN DE MODELOS ATOMÍSTICOS

Caso de estudio para simulaciones con Materials Studio para Nanopartículas de cobalto (CoNPs)

En el caso de las nanopartículas obtenidas de Co en solución a pH=5, las imágenes muestran la síntesis en un 10% de nanopartículas con maclas y de tamaño menor a 20nm. En contraparte, a un pH=3 se aprecia una producción del 70% de nanopartículas de Co <3nm, las cuales poseen configuración esférica y estructura hexagonal, por lo que se considera que la relación entre el tamaño y estabilidad es favorable bajo estas condiciones. De lo anterior, se concluye que las condiciones óptimas de síntesis de nanopartículas de Co fue a pH=3.

Construcción del modelo de nanopartículas de cobalto

En esta sección se presenta el procedimiento seguido para la elaboración y simulación de un modelo de nanopartículas de cobalto (Co), mediante el software Materials Studio V5.5. También se hace referencia a los datos experimentales obtenidos por Rosano Ortega (2009), para la obtención de nanopartículas de Co mediante un proceso de síntesis por biorreducción; datos utilizados para la construcción de los modelos.

En el procedimiento se muestra la secuencia de pasos seguidos y se ilustra con figuras de ventanas y pantallas, del software utilizado, para una mejor comprensión tanto del procedimiento como de los resultados obtenidos durante la simulación.

1. Definición de grupo espacial

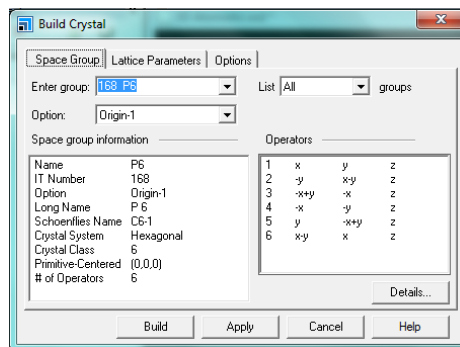


Figura 1. Selección del grupo espacial.

La figura 1, muestra la definición del grupo espacial correspondiente a la estructura de celda unitaria de la nanopartícula que se analiza.

2. Definición de los parámetros de red

La definición de la estructura se basa en los datos experimentales obtenidos por Rosano Ortega (2009), donde se indica que:

“La estructura de las nanopartículas de Co sintetizadas a pH= 3, se evaluaron a través de las FFT haciendo el análisis de sus respectivos planos cristalinos para reconocer su estructura (figura 4.17b y 4.17c).

En la figura 4.17a, se muestra una sección aislada de nanopartículas homogéneas esféricas de tamaño uniforme menor a 5nm, obtenidas a pH= 3. También se identifican **estructuras hexagonales en donde $a= b= 2.503$ y $c=4.060$ con tamaño de 3nm** con desviación estándar de $\sigma=2\text{nm}$, **con ángulo de 62.6°** entre las familias de planos (1,1,0) y (1,0,3), distancia de 1.2 y de 1.1 Å, respectivamente, y eje de zona [3,-3,-1]. En esta micrografía se nota que un segmento de la nanopartícula está embebido en la biomasa.”

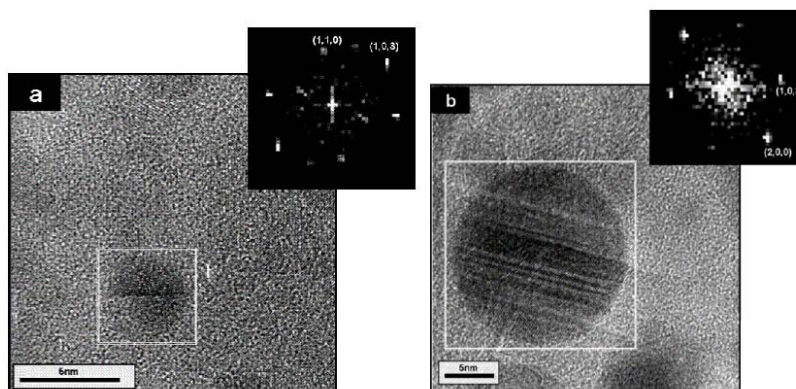


Fig. 4.17 a) y b) Imagen HRTEM de partículas de Co en muestras producidas a un pH=3 a una orientación [3,-3,-1] y con pH=5 a una orientación [0,6,0], respectivamente con sus referentes patrones de FFT.

Figura 2. Micrografías utilizadas para determinar los parámetros de red.

Con la información obtenida de la figura 2, se definieron los parámetros de red (***lattice definition***), en el software Material Studio para la construcción del cristal, los datos se presentan en la figura 3.

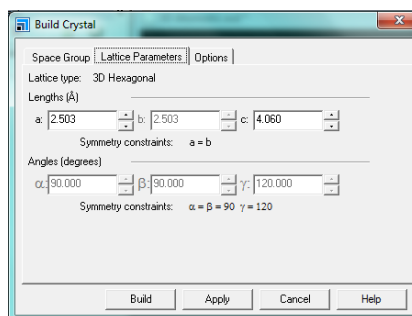


Figura 3. Introducción de parámetros de red para estructuras cristalinas.

Se observa en la figura 3, que los valores de $a=b$ es de 2.503 Å y $c=4.060$ Å, como se indica de los datos experimentales, y para los ángulos $\alpha=\beta=90^\circ$ y $\gamma=120^\circ$, lo que resulta que hará el ángulo suplementario de γ se tenga 60° , valor cercano a los 62.2° indicados en los datos experimentales.

Se observa cómo se modifica el comportamiento con este ángulo de 60° .

3. Construcción de la Celda básica.

Después de definir los parámetros de red se procede a construir la celda unitaria, el modelo resultante se presenta en la figura 4.

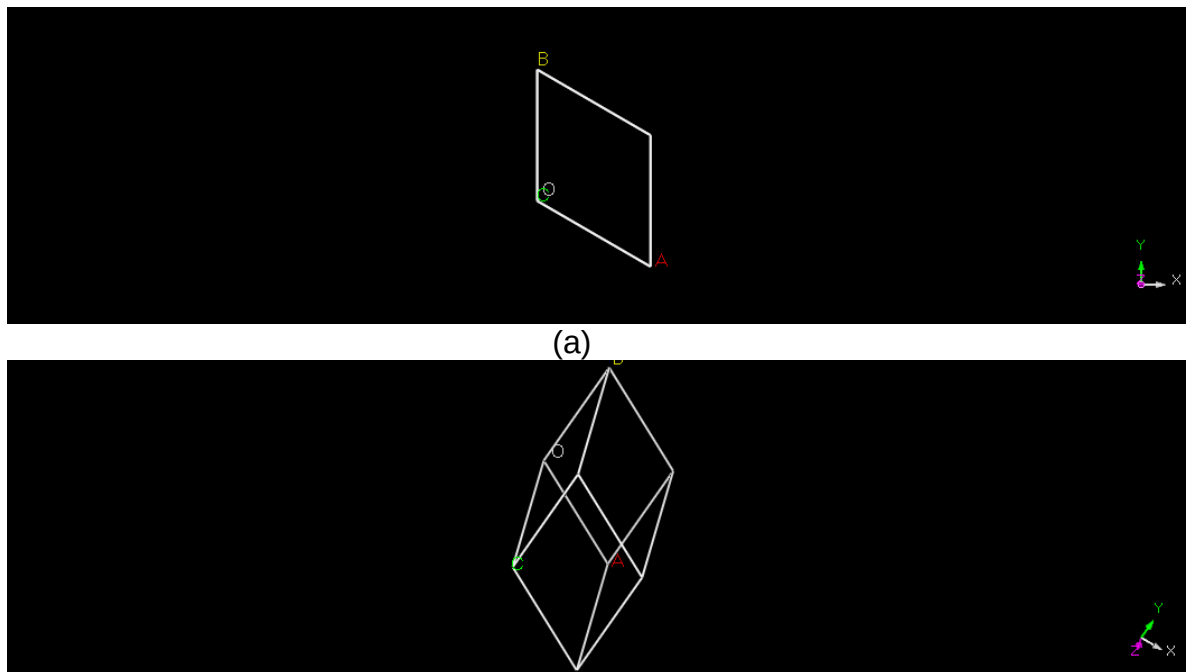


Figura 4. Modelo de celda unitaria. (a) Orientación estándar, (b) orientación con rotación para observar la estructura hexagonal, referencia para la colocación de los átomos en la red.

4. Adición de los átomos de Cobalto a la celda.

La figura 5 se presenta como se adicionan los átomos al modelo de celda unidad para la construcción del cristal.

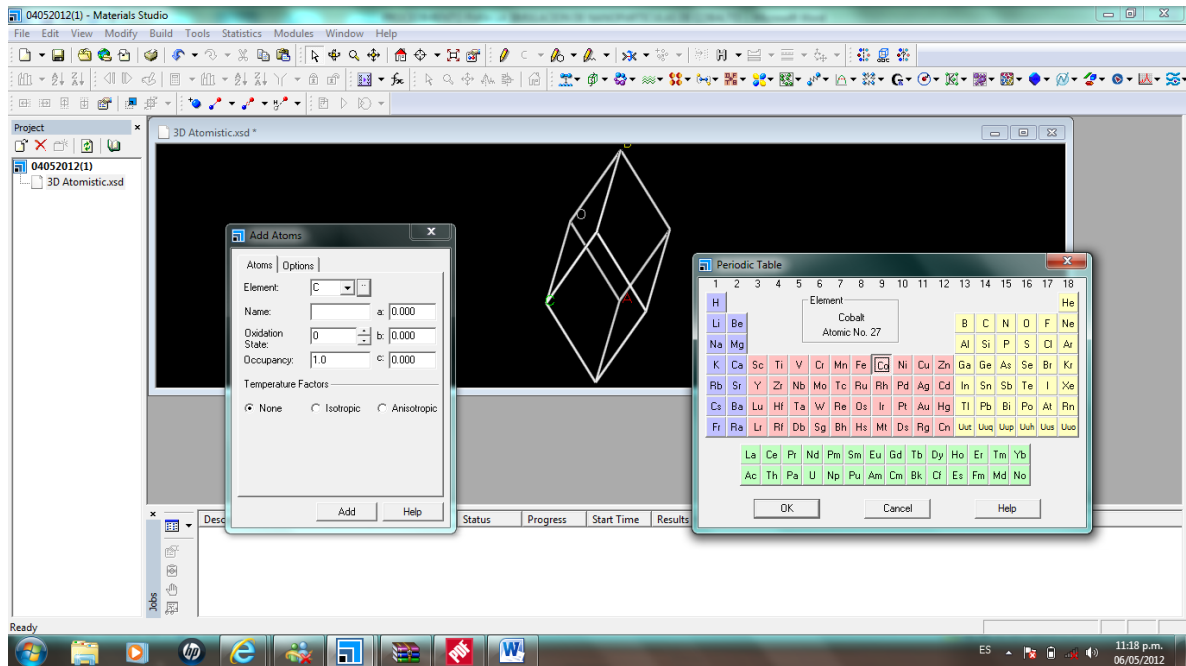


Figura 5. Adición de átomos al modelo de celda unidad.

Mediante la ventana mostrada en la figura 5, se pueden adicionar los átomos del elemento requerido en posiciones específicas o sobre la estructura diseñada para la celda. Para el presente caso se realizó sobre la estructura de la celda, el resultado se muestra en la figura 6.

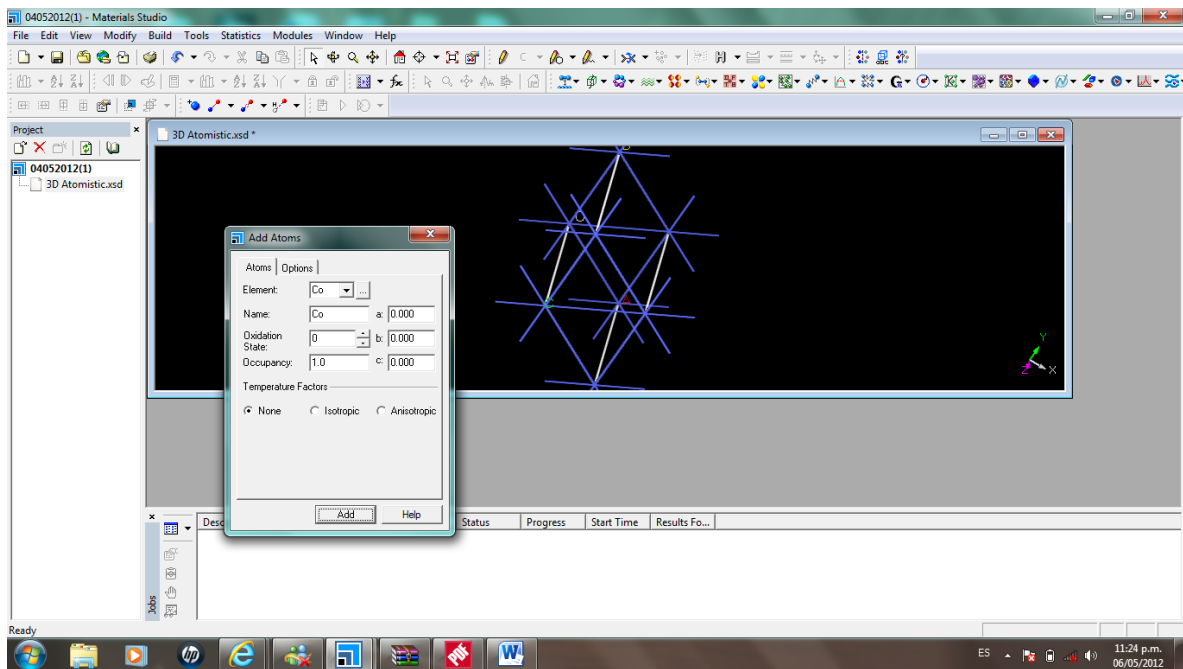


Figura 6. Adición de átomos de Co al modelo.

La presentación de manera inicial, automáticamente por el software, muestra los átomos con las ligaduras que se utilizarían con las celdas unitarias vecinas. Para eliminar esto es necesario reconstruir el cristal.

Después de reconstruir el cristal, se tiene la celda unitaria convencional sin embargo para el proceso de simulación (mediante el Modulo CASTEP), es necesario contar con la *celda unitaria primitiva*. CASTEP utiliza la simetría completa del modelo o alguna existente para obtener la celda primitiva. El resultado de esta aplicación sobre el modelo hexagonal de Co es el mostrado en la figura 7.

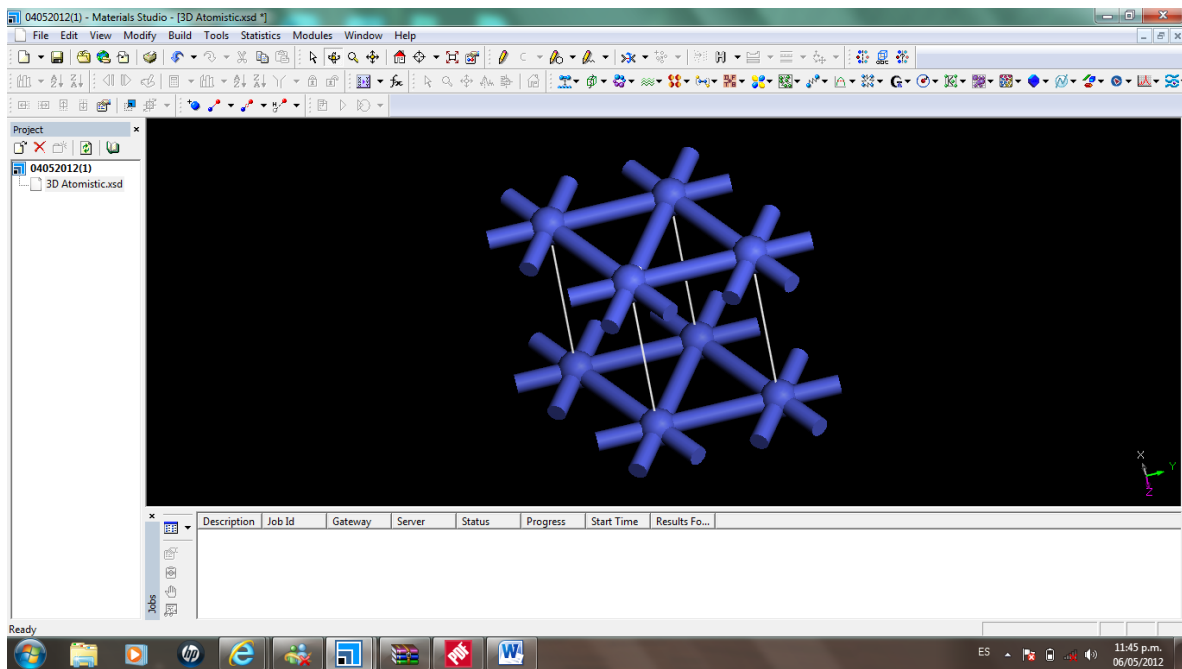


Figura. 7. Celda unitaria primitiva

En la figura 7 se observa que la celda unitaria primitiva está compuesta por 8 átomos de Co dispuestos en cada vértice de la red.

Con este paso se concluyó la construcción de modelo y se procedió a la simulación mediante el Módulo CASTEP.

5. Configurar y ejecutar el cálculo CASTEP

La configuración se refiere al tipo de cálculo a desarrollar, la forma de iniciar con esto se muestra en la figura 9.

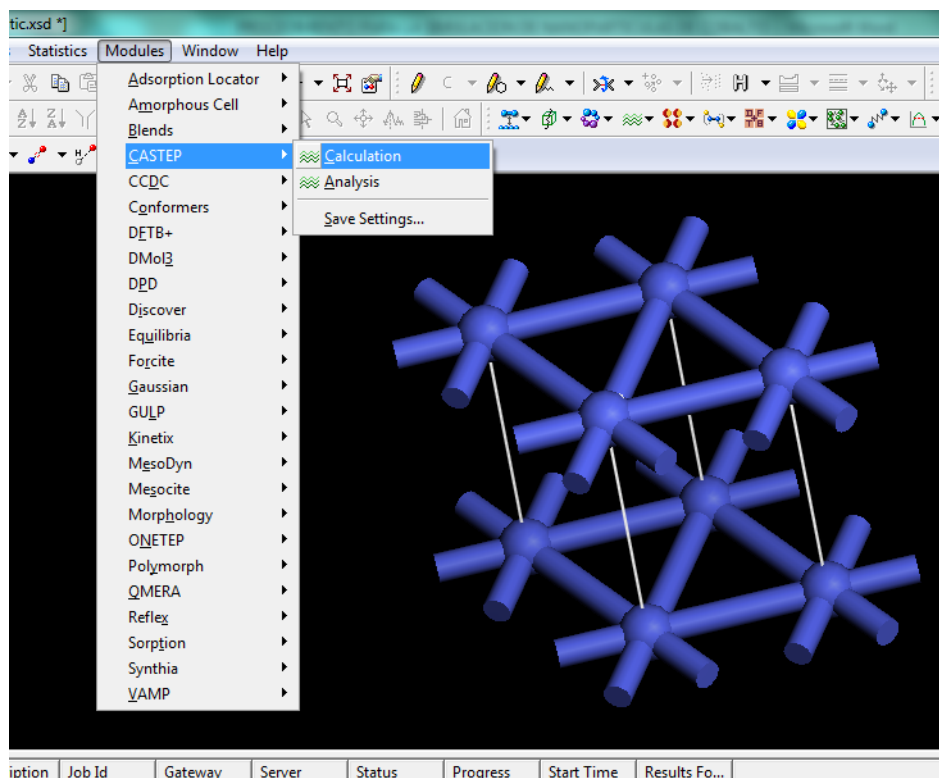


Figura 9. Acceso al modelo de cálculo.

6. Presentación de resultados

Después de ejecutar la simulación del modelo, se presentan los resultados obtenidos, estos pueden observarse en el visor del proyecto, figura 10. Algunos de los archivos generados son los siguientes:

Filename.xsd = Estructura optimizada final.

Filename.xtd = Archivo de trayectoria que contiene la estructura de la celda después de cada paso de la optimización.

Filename.castep = un documento de texto de salida que contiene la información de optimización.

Filename.param = información de entrada para la simulación.

Finalmente para cada propiedad calculada por la simulación existen archivos **castep** y **param**.

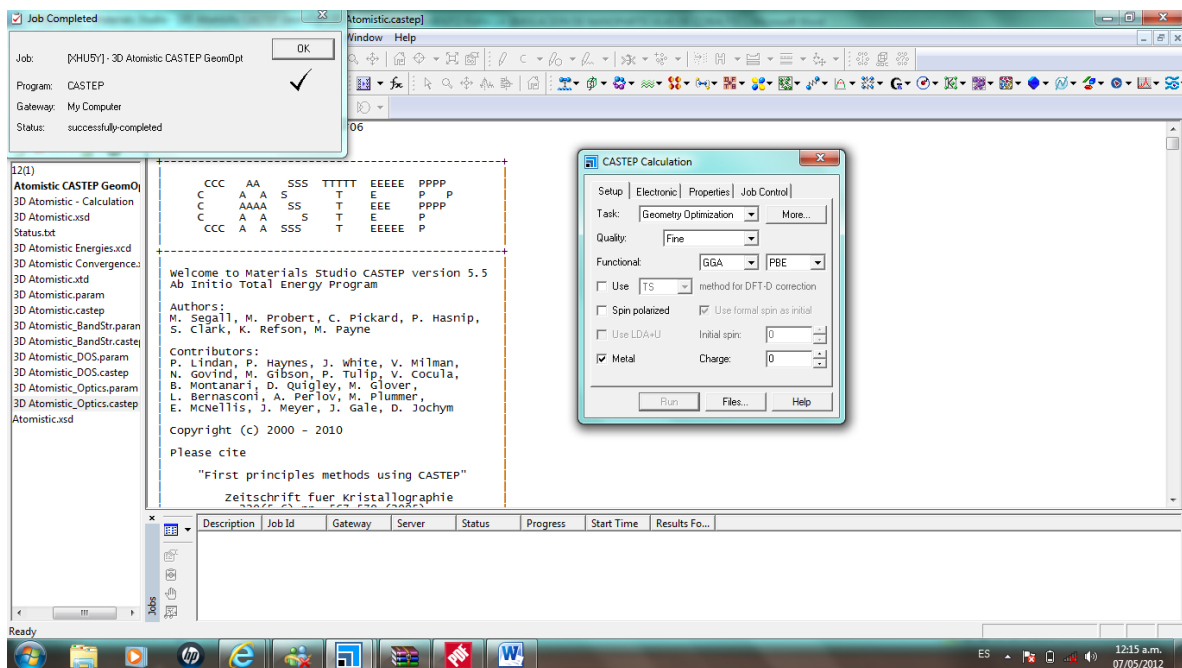


Figura 10. Ejecución del cálculo.

7. Análisis de resultados.

Una vez realizado el cálculo, se procede al análisis de resultados. Para ello se utiliza la opción de análisis, ubicada debajo de cálculos en la figura 9.

La comparación se realiza de acuerdo al parámetro que se analice.

ANEXO 4.

MÉTODO UTILIZADO DE SÍNTESIS POR BIOREDUCCIÓN

El método por biorreducción para la obtención de nanopartículas metálicas, utilizado como base para el desarrollo de este proyecto de investigación, es el desarrollado por Rosano-Ortega (2009); en el cual se utiliza como agente reductor biomasa extraída del lirio acuático.

Los pasos secuenciales para este método experimental de síntesis por biorreducción se detallan a continuación:

1. Prepara una solución a concentración conocida, entre 9×10^{-4} a 1×10^{-4} M, del metal en estudio con agua deionizada.
2. Tarar, en una balanza, la cantidad necesaria de biomasa de lirio la cual se vacía en tubos de ensaye de polietileno de 25 mL con tapa roscada. Posteriormente, se agrega la cantidad necesaria de agua deionizada.
3. Colocar los tubos dentro de baño ultrasónico durante 15 minutos y una vez terminado dejar reposar 5 min y en seguida, centrifugar las muestras durante 15 min a 5000rpm.
4. Agregar a cada muestra un 1 mL de solución buffer (pH= 3 a 14) por cada 5 mL de solución de biomasa.
5. Nuevamente, someter las muestras a baño ultrasónico durante 15 minutos, y dejar reposar 5 min, consecutivamente centrifugar durante 15 minutos a 5000rpm.
6. A continuación, adicionar solución metálica a cada muestra para obtener una relación 1:1 con respecto a la concentración de la solución de la biomasa (1mL por cada mL de solución de biomasa).
7. En seguida, someter las muestras a baño ultrasónico durante 20 min y dejar reposar 5 min, una vez concluido esto, centrifugar a 5000 rpm durante 20 min.
8. Teniendo cuidado de no agitar las muestras, separa el sobrenadante (solución coloidal) del precipitado (biomasa) por decantación, desechar este último y proceder a la caracterización por TEM del producto final obtenido.

ANEXO 5.

GUÍA RÁPIDA PARA USUARIO

El siguiente conjunto de instrucciones es recomendado para realizar, mediante el sistema mecatrónico, la síntesis inducida de nanopartículas metálicas de plata, oro, cromo y cobalto.

- 1- Preparar los materiales y soluciones que son utilizados como consumibles para el proceso de síntesis. La solución de biomasa y de sal metálica a concentración conocida. Las especificaciones recomendadas se muestran en la tabla 1 y 2.

Tabla 1. Biomasa utilizada con mayor frecuencia en biosíntesis.

Tipo de biomasa	Método de obtención	Presentación	Tamaño de grano	Observaciones
Obtenida de platas o de partes de estas	- Recolección - Lavado - Picado (corte en piezas pequeñas) - Secado - Molienda - Almacenamiento	Polvo fino	10 – 100 micras	Ver referencias en tabla A-2 y A-3.

Tabla 2. Concentraciones máximas de sustrato recomendadas para síntesis de nanopartículas metálicas.

Sustrato	Nanopartícula	Valor referencia de	Valor experimental	Justificación
AgNO ₃	Ag	≤ 5 mM	1 mM	>5 mM – 10 mM Condicion tóxica sobre la biomasa.
AuHCl	Au	1 mM inicial	1 mM	Valores anteriores a 1 mM, no registran formación de AuNPs
K ₂ Cr ₂ O ₇	Cr	1 mM inicial	1 mM	Para obtención de nanopartículas <100 nm.
CoCl ₂ ·6H ₂ O	Co	1 mM inicial	1 mM	Para obtención de nanopartículas <100 nm.

- 2- Llenar los tubos de ensaye con la solución de biomasa y colocarlos en el rotor para iniciar el ciclo de la síntesis. El proceso de síntesis inducida se muestra en la figura 1. Se recomienda realizar un seguimiento completo de la secuencia de movimientos indicados para identificar cada componente en el sistema y la trayectoria a realizar.

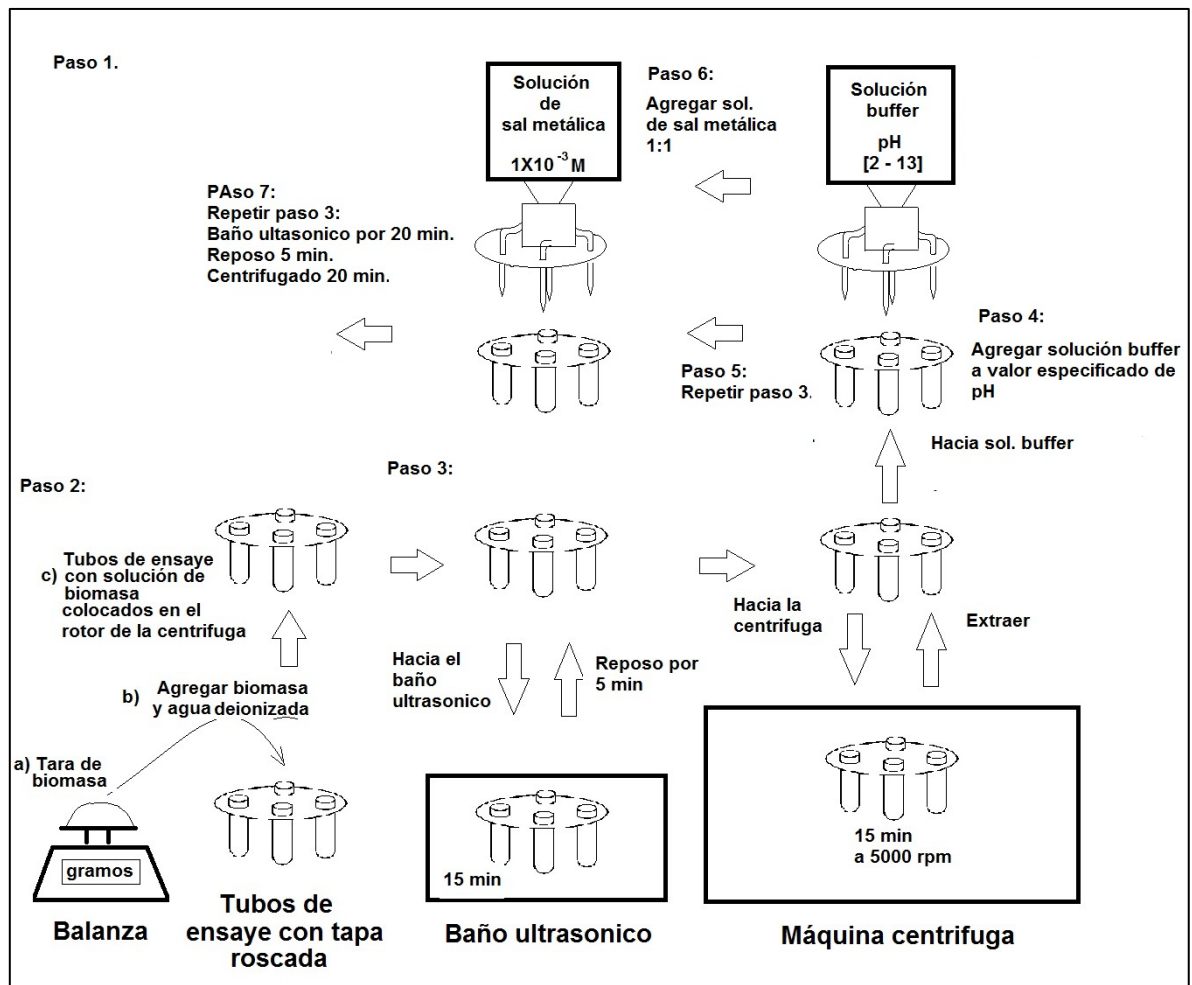


Figura 1. Movimientos y trayectorias a realizar por el sistema mecatrónico (elaboración propia).

- 3- Iniciar el ciclo y verificar el correcto desarrollo de los pasos 2 y 3 indicados en la figura 1.
- 4- Verificar el valor correcto de la solución buffer para el caso del metal a reducir (paso 4, figura 1). Utilizar la figura 2 para este paso.

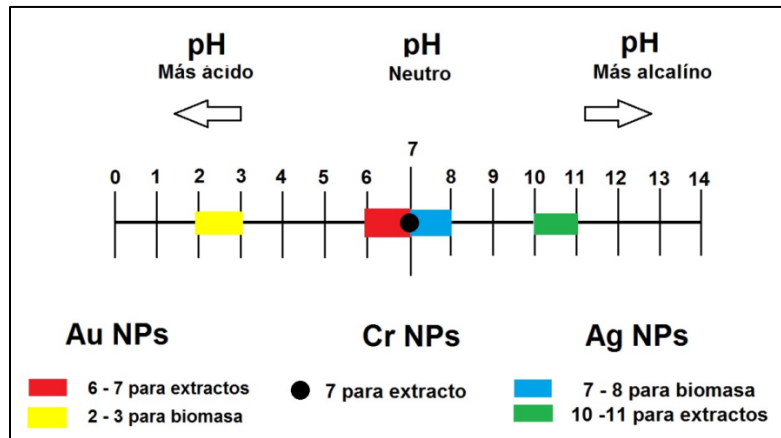


Figura 2. Valores de pH para síntesis de nanopartículas metálicas (Fuente: elaboración propia).

- 5- Continuar con el ciclo completo y verificar los ajustes a realizar de acuerdo a la figura 3.

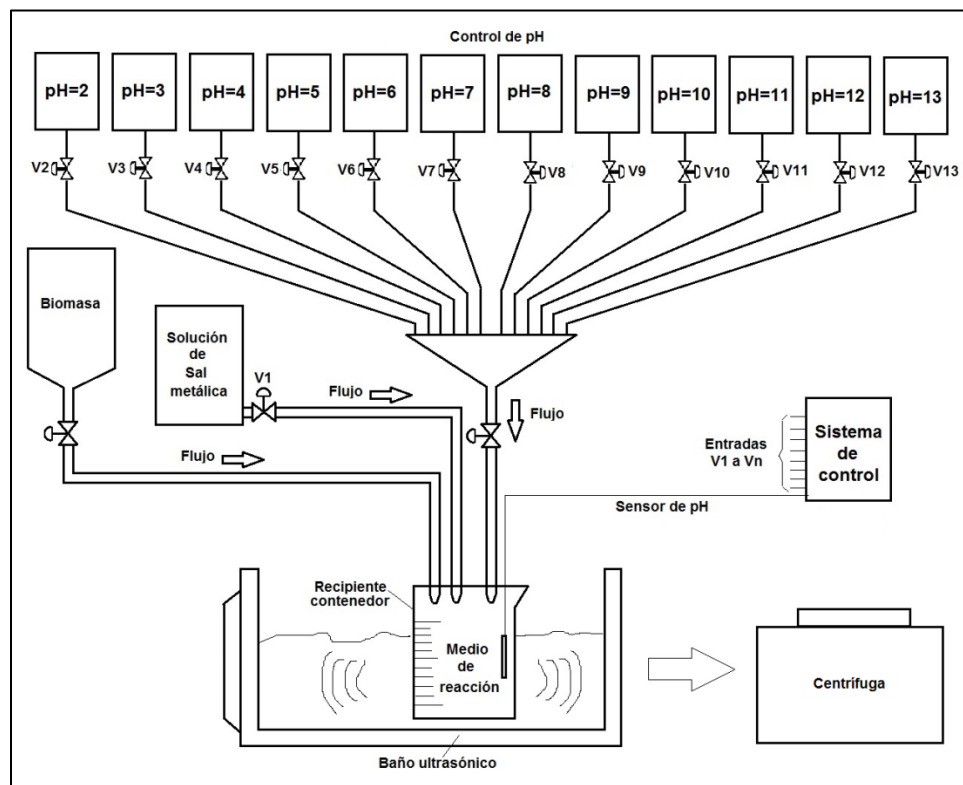


Figura 3. Diagrama esquemático del sistema mecatrónico para síntesis de nanopartículas metálicas por biorreducción (Fuente: elaboración propia).

- 6- Con la secuencia anterior se espera obtener nanopartículas con tamaños menores a 100 nm.

EVIDENCIA DE LA PRODUCTIVIDAD ACADÉMICA RESULTADO DEL PROYECTO DE TESIS



PUNTAJE DE LA PRODUCTIVIDAD ACADÉMICA DEL ALUMNO

Concepto	Evidencia	Ponderación	Producción	Puntaje obtenido	Características del trabajo
1. Reporte técnico (proyectos financiados)	Reporte técnico, carta de liberación del asesor y carta de finiquito de la empresa o institución financiadora.	7	1	7	Parte de reporte de Proyecto CONACYT 102025.
2. Memorias en extenso de congreso internacional	Copia con paginación de la memoria (se acepta la presentación en CD o la impresión de la liga del evento) y diploma de participación.	4	1	4	Artículo Técnico-científico: - Congreso SOMI 2013

PUNTAJE DE LA PRODUCTIVIDAD ACADÉMICA DEL ALUMNO (continuación)

Concepto	Evidencia	Ponderación	Producción	Puntaje obtenido	Características del trabajo
3. Memorias en extenso de congreso nacional	Copia con paginación de la memoria (se acepta la presentación en CD o la impresión de la liga del evento) y diploma de participación.	3	2	6	Artículo Técnico-científico: - 6° Coloquio Interdisciplinario de Posgrados UPAPE 2013 - Congreso SOMI 2014
4. Memorias en resumen de congreso nacional o internacional.	Copia con paginación de la memoria (se acepta la presentación en CD o la impresión de la liga del evento) y diploma de participación.	1	1	1	Resumen de Artículo Técnico-científico: - International Materials Research Congress, IMRC-2014
5. Divulgación (3 eventos).	Diploma o constancia.	1	3	3	Conferencias 2010, 2013, 2014
TOTAL ACUMULADO				21	

Con la productividad académica obtenida del desarrollo del proyecto de tesis, se tiene un total de 21 puntos; con lo cual se cubre el requisito de 10 puntos mínimos para solicitar el examen de grado.

En las páginas siguientes se anexa la evidencia de cada uno de los productos académicos citados.

1. Reporte técnico (proyectos financiados)



FONDO SECTORIAL DE INVESTIGACIÓN PARA LA
EDUCACIÓN SEP-CONACYT



INFORME DE ACTIVIDADES

Fecha

20	03	2015
DIA	MES	AÑO

DATOS DE IDENTIFICACIÓN

Clave del Proyecto	000000000102025
Responsable Técnico	Dr. Jorge Bedolla Hernández
Correo Electrónico	jbedolla@itapizaco.edu.mx, jbedolla@cenidet.edu.mx
Institución	Instituto Tecnológico de Apizaco

DATOS DEL BECARIO

Bedolla		Hernández		Marcos	
Apellido Paterno		Apellido Materno		Nombre(s)	
No. de becaria		21850		Correo Electrónico	
Nivel de Apoyo		II		mbedollah@hotmail.com	
		Periodo de Apoyo		Noviembre 2014- Marzo 2015	

ACTIVIDADES REALIZADAS

1. REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA SOBRE RECUBRIMIENTOS SUPERFICIALES CON MATERIALES NANOESTRUCTURADOS PARA APLICACIONES EN ELEMENTOS MECÁNICOS EN CONTACTO.

Se realizó la consulta bibliográfica de los tópicos correspondientes a recubrimientos de superficies con materiales nanoestructurados, enfocándose de forma particular en aquellos formados por arreglos metálicos recubrimiento-superficie. La revisión versa en torno a los materiales utilizados para el recubrimiento, sus características geométricas y propiedades físicas asociadas a su tamaño nanométrico, las técnicas de deposición por adsorción utilizadas para realizar el recubrimiento y las propiedades de dureza y resistencia al desgaste conferidas a la superficie recubierta.

Para determinar el tipo de material a utilizar en la elaboración de recubrimientos, se investigó sobre los metales de transición como el cromo (Cr), aluminio (Al), zinc (Zn), manganeso (Mn), titanio (Ti) y subproductos derivados de estos; así como los métodos de síntesis empleados para la fabricación de estos materiales a escala nanométrica. Con lo cual, se definió que los materiales nanoestructurados en forma de nanopartículas, son viables para utilizarse en el proceso de elaborar recubrimientos superficiales.

Una vez establecida la presentación del material nanoestructurado, se procedió con el análisis de las técnicas de deposición para elaborar recubrimientos utilizando nanopartículas; consultando las técnicas de deposición por rutas físicas y químicas con materiales de aporte como Cr, Zn, Ni y Mn, se encontró que mediante la técnica de electrodeposición, en sus diferentes variantes, se pueden obtener los recubrimientos superficiales metálicos con nanopartículas.

Con lo anterior se estableció la viabilidad de elaborar recubrimientos nanoestructurados a base de cromo (Cr), en forma de nanopartículas, sintetizadas por biorreducción y aplicadas por electrodeposición sobre superficies metálicas.

2. MODELADO Y ANÁLISIS NUMÉRICO DE PROPIEDADES MECÁNICAS DE NANOPARTÍCULAS DE CROMO (Cr) PARA POTENCIAL USO EN RECUBRIMIENTOS ANTIDESGASTE

Como siguiente fase y con los datos obtenidos de la revisión bibliográfica, se procedió a la elaboración de los modelos atomísticos de estructura de celda unitaria para las nanopartículas de Cr y sus derivados (óxido de cromo III y carburo de cromo). Los modelos fueron elaborados en el software Material Studio en su versión 5.5 (licencia académica), para

INFORME DE ACTIVIDADES

ello fue necesario determinar sus valores de parámetros de red y grupo espacial, consultando para ello tablas cristalográficas y clasificación general de los grupos espaciales.

Se procedió en primera instancia con la elaboración del modelo de las estructuras cristalinas correspondientes a las nanopartículas de Cr, se obtuvo la estructura de red simplificada y se procedió a realizar la optimización de la geometría para determinar la configuración de mínima energía correspondiente a la nanopartícula de Cr.

Con la configuración básica se realizó el análisis de las propiedades mecánicas de las nanopartículas, esto se desarrolló mediante el cálculo de las constantes elásticas para la estructura cristalina analizada y posterior cálculo del módulo volumétrico, de elasticidad y relación de Poisson.

Para las nanopartículas de óxido de cromo III (Cr_2O_3) y carburo de cromo (Cr_2C_3), se realizó la misma secuencia de modelado que la mencionada para el cromo.

Para el cierre de esta etapa, se realizó la búsqueda y se elaboró la fundamentación teórica necesaria para evaluar los recubrimientos superficiales a base de nanopartículas, mediante el cálculo de dureza y resistencia al desgaste; basado en los valores de las constantes elásticas y propiedades calculadas.

3. MODELADO DEL ARREGLO SUSTRATO-RECUBRIMIENTO DE LOS ELEMENTOS EN CONTACTO

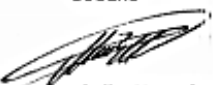
En esta etapa se realizó el modelado y análisis del arreglo estrato-superficie para los recubrimientos propuestos con las nanopartículas de Cr, Cr_2O_3 y Cr_2C_3 . Se idealizó con un arreglo monocapa constituido por un solo tipo de las nanopartículas mencionadas. El arreglo consistió de una monocapa sobre un sustrato de acero estructural AISI1020.

Se realizó la simulación respectiva, se determinaron las constantes de red y mediante la formulación de Voigt-Reuss-Hill (Yu, 2014), se determinaron los valores del módulo volumétrico (B), de elasticidad (E) y de corte (G). Posterior a esto, se hizo el cálculo de la dureza (H) con la teoría de Simunek (2007); y se evaluó la resistencia al desgaste mediante la relación (H/E). Esto se realizó para los arreglos formados con cada tipo de nanopartícula.

Finalmente se hizo una comparación entre los recubrimientos analizados para determinar la calidad de estos en función de los valores de H y H/E, cuando se aplican sobre superficies metálicas.

La descripción y datos concernientes a las actividades desarrolladas, se encuentran detallados en el anexo de información complementaria.

Becario


Marcos Bedolla Hernández
(Nombre y firma)

Va. Bo.
Responsable Técnico


Dr. Jorge Bedolla Hernández
(Grado, Nombre y firma)

MÉXICO

GOBIERNO FEDERAL



OFICIO NO. DICB/C110/1242/2015

DIRECCIÓN ADJUNTA DE DESARROLLO CIENTÍFICO
DIRECCIÓN DE INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA BÁSICA

"2015, Año del Generalísimo José María Morelos y Pavón"

México, D.F., a 21 de Abril de 2015
REF_PROY: CB-2008/102025

CARTA DE LIBERACIÓN

DR. JORGE BDOLLA HERNÁNDEZ
INSTITUTO TECNOLÓGICO DE APIZACO
P R E S E N T E

Por este medio notifico a Usted que se ha recibido en esta Subdirección el **INFORME DE ACTIVIDADES** debidamente avalado por usted como Responsable Técnico del proyecto cuya referencia aparece al margen, de:

BECARIO	NOMBRE	NIVEL
21850	Bedolla Hernández Marcos	III

Con lo anterior, se da cumplimiento al compromiso adquirido por el(la) becario(a) dentro del proyecto, mismo que se registra en el expediente correspondiente. Para fines de seguimiento del proyecto, como responsable técnico deberá registrar en los informes parciales y final, tanto técnicos como financieros, los resultados obtenidos y los montos erogados, respectivamente.

Le recuerdo que su proyecto podrá ser auditado por la Función Pública, por lo que es indispensable que todos los productos (tesis, artículos, bases de datos, entre otros) y documentos probatorios deberán quedar bajo su resguardo e integrados al expediente del proyecto, en caso de ser requeridos.

Sin más por el momento, queda de usted.

Atentamente


BIOL. MARTHA PATRICIA OJEDA CARRASCO
SUBDIRECTORA DE CONTROL DE PROYECTOS
DE INVESTIGACIÓN, CONACYT
MPOC/megf

2. Memorias en extenso de congreso internacional



Análisis del Comportamiento de Propiedades Mecánicas de Nanopartículas de Cobalto Obtenidas Mediante Síntesis por Biorreducción

Marcos Bedolla^{1,2}, Genoveva Rosano-Ortega¹, Jorge Bedolla², Vicente Flores², Francisco Hernández², Pablo Schabes-Retchkiman³

¹Universidad Popular Autónoma del Estado de Puebla, UPAEP, 21 Sur 1103, Colonia Santiago, C.P. 72410, Puebla, México.

²Instituto Tecnológico de Apizaco, Av. Instituto Tecnológico s/n, Apizaco, Tlaxcala, México.

³Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Física, México D.F., México

mbedollah@hotmail.com; genoveva.rosano@upaep.mx; jbedolla@itapizaco.edu.mx; f117u2@yahoo.com; francisco_hc2002@hotmail.com; pabloschabes@hotmail.com

RESUMEN

En este trabajo se presentan un estudio mediante simulación computacional y el uso de los resultados experimentales previos, para el análisis del comportamiento de las propiedades mecánicas de nanopartículas de cobalto (Co). Se consideró para el estudio nanopartículas con tamaño menor a 10 nm, obtenidas mediante síntesis por biorreducción a una concentración metálica de 3×10^{-4} M y pH de 3, 5 y 10, utilizando biomasa extraída de lirio acuático (*Eichhornia crassipes*), proveniente de la Presa de Valsequillo en el Estado de Puebla.

La metodología utilizada en esta fase de **simulación numérica**, se compone de las etapas de: a) Elaboración de modelos, b) Simulación mediante el método de pseudopotenciales, c) presentación y análisis de resultados. Los resultados de esta investigación comprueban que al reducir el tamaño de la partícula de 10 a 3 nm, en escala manométrica se incrementan el valor del Módulo de Elasticidad (E) y la Relación de Poisson (ν) aproximadamente un 3 %, como función de área superficial; así como también se corroboró la eficacia de la metodología utilizada para la producción de nanopartículas mediante síntesis por biorreducción.

PALABRAS CLAVE: Análisis, nanopartículas, propiedades mecánicas, síntesis por biorreducción.

1 INTRODUCCIÓN

Las nanopartículas son, por definición, partículas con diámetros debajo de la dimensión de micra: generalmente, debajo 0.1 μm (100 nm). Una definición más rigurosa considera nanopartículas como partículas con propiedades que dependen directamente su tamaño. Además, con la disminución del tamaño de partícula, la relación de superficie/volumen aumenta, de modo que las propiedades superficiales se hacen cruciales [1].

El proceso de biosíntesis es una forma probada para la obtención de nanopartículas metálicas, el cual ofrece ventajas funcionales respecto a los métodos físicos y químicos, ya que se puede realizar a condiciones normales de presión y temperatura, además de requerir equipo menos especializado que los otros dos métodos de síntesis mencionados [2]. Diversas fuentes de biomasa se usan en el proceso, plantas, hongos, bacterias y compuestos orgánicos [3-5].

La gama de aplicaciones de las nanopartículas en áreas de la ciencia como la medicina [6], el desarrollo de dispositivos y componentes electrónicos [7] y el mejoramiento en propiedades de los



CCADET
CENTRO DE CIENCIAS APLICADAS
Y DESARROLLO TECNOLÓGICO



1^{er} CONGRESO IBEROAMERICANO DE INSTRUMENTACIÓN Y CIENCIAS APLICADAS



CAMPECHE
ARROYO
BUENA SEGUESTA



SOMI XXVIII CONGRESO DE INSTRUMENTACIÓN

28 al 31 de octubre de 2013

El Centro de Ciencias Aplicadas y Desarrollo Tecnológico de la Universidad Nacional Autónoma de México
y la Universidad Autónoma de Campeche

Otorgan la presente

CONSTANCIA

a: Marcos Bedolla Hernández, Genoveva Rosano Ortega, Jorge Bedolla Hernández,
Vicente Flores Lara, Francisco Hernández Corona, Pablo Schabes Retchkiman

por haber presentado su trabajo

ANÁLISIS DEL COMPORTAMIENTO DE PROPIEDADES MECÁNICAS
DE NANOPARTÍCULAS DE COBALTO OBTENIDAS MEDIANTE
SÍNTESIS POR BIORREDUCCIÓN

Sn. Francisco de Campeche, Campeche, México, 31 de octubre de 2013

Dr. José Manuel Saniger Blosa

PRESIDENTE DEL COMITÉ ORGANIZADOR



3. Memorias en extenso de congreso nacional



Determinación de Parámetros de Diseño para Síntesis de Nanopartículas Metálicas por Biorreducción

M Marcos Bedolla 1, Areli Munive 1, Genoveva Rosano-Ortega 1, Jorge Bedolla 2, Benjamín Darío Ramírez 2

marcos.bedolla@upaep.edu.mx; genoveva.rosano@upaep.mx; ljbedolla@itapizaco.edu.mx

1. Universidad Popular Autónoma del Estado de Puebla
21 Sur 1103, Col. Santiago, Puebla, México
2. Instituto Tecnológico de Apizaco
Av. Instituto Tecnológico s/n, Apizaco, Tlaxcala, México

RESUMEN

En este trabajo se presenta un análisis cuantitativo y cualitativo de nanopartículas de plata obtenidas mediante síntesis por biorreducción. Los resultados son evaluados para determinar la influencia sobre el tamaño, estructura y forma de las nanopartículas, al modificar los valores de los parámetros que intervienen en el proceso de síntesis; estableciendo así los valores óptimos, considerados como parámetros de diseño para sintetizar nanopartículas de plata.

La síntesis de las nanopartículas de plata se desarrolló utilizando biomasa extraída de lirio acuático (*Eichhornia crassipes*) como agente reductor, una solución precursora con diferentes valores de pH y nitrato de plata (AgNO_3) como sal metálica. Diferentes muestras fueron obtenidas mediante este método de síntesis. Se utilizaron las mismas condiciones de trabajo y las variaciones de parámetros fueron sobre el pH de la solución precursora y la biomasa utilizada para la síntesis.

La caracterización de las muestras fue mediante espectrometría UV-vis y HRTEM, para determinar la presencia de nanopartículas y la estructura y tamaño respectivamente. Con el análisis de los resultados se establece la relación entre la concentración de sal metálica, el pH de solución precursora y la biomasa utilizada con la distribución y tamaño de las nanopartículas sintetizadas; determinando así los valores adecuados para síntesis por diseño de nanopartículas de plata.

PALABRAS CLAVE: Nanopartículas de plata, biorreducción, lirio acuático y parámetros de diseño

1. INTRODUCCIÓN

Los constantes avances en Nanociencia y Nanotecnología han brindado la posibilidad de contar en la actualidad con desarrollos e innovaciones tecnológicas que favorecen el bienestar humano. Diversos campos de la ciencia y la ingeniería utilizan nanopartículas, nanoclusters, materiales nanoestructurados, etc; para la mejora en productos existentes o en investigación para desarrollo de nuevos productos [1]. Tal es el caso del uso de nanopartículas de cobalto para el desarrollo de componentes electrónicos gracias a sus propiedades magnetizantes y de campo coherensivo [2], nanopartículas de zinc y sus óxidos (ZnO NPs) que son utilizadas para elaborar películas y recubrimientos para vidrios gracias a sus propiedades ópticas, nanopartículas de manganeso [3] (Mn NPs) para recubrimientos superficiales que minimizan el desgaste en herramientas de corte para máquinas convencionales y de CNC; así como nanopartículas de plata (Ag NPs), las cuales por sus propiedades eléctricas, térmicas y antibacterianas son ampliamente utilizadas; en ingeniería para el desarrollo de superconductores y sensores de temperatura y en medicina es bien conocida su alta toxicidad para microorganismos, mostrando fuertes efectos biosidas sobre más de 16 especies de bacterias[4].



CCADET
CENTRO DE CIENCIAS APLICADAS
Y DESARROLLO TECNOLÓGICO

SOMIXXIX

CONGRESO DE INSTRUMENTACIÓN

Puerto Vallarta, Jalisco, México, del 29 al 31 de octubre del 2014



La Sociedad Mexicana de Instrumentación, el Centro de Ciencias Aplicadas y Desarrollo Tecnológico
de la Universidad Nacional Autónoma de México y la Universidad de Guadalajara,
a través del Centro Universitario de la Costa

Otorgan la presente

CONSTANCIA

a: Marcos Bedolla Hernández, Areli Munive Olarte, Genoveva Rosano Ortega,
Jorge Bedolla Hernández, Benjamin Dario Ramirez Angulo, Pablo Samuel Schabes Restchikman

por haber presentado su trabajo

Determinación de Parámetros de Diseño para Síntesis de Nanopartículas Metálicas por Biorreducción

Puerto Vallarta, Jalisco, México, 31 de octubre del 2014

M.C. Gerardo A. Ruiz Botello

Por el Comité Organizador

Dr. Jonée I. Chavoya Gama

4. Memorias en resumen de congreso nacional o internacional.

MODELING AND ANALYSIS OF Ag NANOPARTICLES: VALIDATION OF A GREEN SYNTHESIS EXPERIMENTAL METHOD

M Bedolla Hernández¹, G Rosano-Ortega², A Munive Olarte², J Bedolla Hernández¹, P Schabes Retchkiman³, M Ortiz Gutierrez⁴, C Vega Lebrún².

¹Instituto Tecnológico de Apizaco, México, ²Universidad Popular Autónoma del Estado de Puebla, México, ³Universidad Nacional Autónoma de México, México, ⁴Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, México.

In this paper a computational numerical analysis using Density Theoretical Fuctional (DFT) and MaterialStudio software is shown. It is used to validate an experimental synthesis bioreduction method for obtaining metal nanoparticles using biomass extracted from water hyacinth (*Eichhornia crassipes*) [1]. The synthesis process used as reaction medium an aqueous silver nitrate solution (AgNO_3) at two concentrations 1×10^{-4} and 3×10^{-4} M, with biomass as a reducing to pH 3, 4, 5, 7, 9 and 11. The absorption optical property was used to validate the experimental method [2].

The analysis was developed by modeling, simulation and analysis of the theoretical models for fundamental structures of Ag_2O_3 , AgO and Ag nanoparticles. The results show that for every structure absorption peaks occur at a wavelength of approximately 420 nm, which corresponds to the characteristic absorption levels for Ag NPs [3].

With experimental measurements of several samples of nanoparticles, using UV-vis spectroscopy it was found that the absorption peaks are 410 nm and 420 nm for samples synthesized with the extracted biomass of stems and roots, respectively.

The comparison with the numerical data indicates that both synthesis parameters and root biomass extracted water hyacinth, have the best conditions for obtaining nanoparticles of Ag.

The size of the synthesized silver nanoparticles ranges from 2.345 nm to 24.85 nm and the corresponding structure Ag_2O_3 , AgO and Ag were identified

Keywords: Modeling, Simulation, Nanoparticles, Optical properties, validation

References:

- [1] Rosano-Ortega, G., Schabes-Retchkiman, P., Zorrilla, C., Liu, H. B., Canizal, G., Avila-Pérez P. & Ascencio, J. (2006). Synthesis and Characterization of Mn Quantum Dots by Bioreduction with Water Hyacinth. *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*. 8 (1): 1 – 5.
- [2] Henglein, A. (1998). Colloidal Silver Nanoparticles: Photochemical Preparation and Interaction with O_2 , CCl_4 , and Some Metal Ions. *Chemistry of Materials*. 10 (1): 444 – 500.
- [3] Astalakshmi, A., Nima, P. & Ganesan, V. (2013). A green approach in the synthesis of silver nanoparticles using bark of Eucalyptus globulus, Labill. *Int. J. Pharm. Sci. Rev. Res.* 23(1): 47 - 52.

Presenting author's email: mbedollah@hotmail.com



August 2014

TO WHOM IT MAY CONCERN
P r e s e n t

This is to certify that *Marcos Bedolla Hernández, Genoveva Rosano Ortega, Areli Munive Olarte, Jorge Bedolla Hernández, Pablo Samuel Schabes Retchkiman, Mauricio Ortiz Gutiérrez, Carlos Arturo Vega Lebrún* presented the contribution: **MODELING AND ANALYSIS OF Ag NANOPARTICLES: VALIDATION OF A GREEN SYNTHESIS EXPERIMENTAL METHOD**, in the Nanostructured Materials and Nanotechnology Symposium at the XXIII International Materials Research Congress held in Cancun, Mexico from August 17th to 21th, 2014.

Sincerely,

Armando Salinas Rodríguez
President



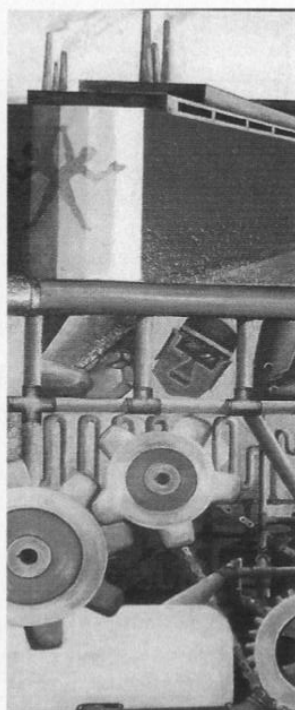
5. Divulgación (3 eventos).



DIRECCIÓN GENERAL DE EDUCACIÓN SUPERIOR TECNOLÓGICA
INSTITUTO TECNOLÓGICO DE APIZACO



SEP



Otorga el presente

Reconocimiento

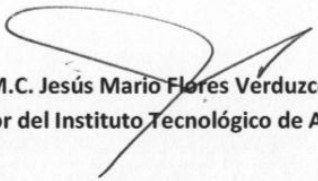
a

Marcos Bedolla Hernández

Por su participación con la ponencia
En la Nanotecnología, el Tamaño Si Importa
dirigida a los alumnos de Ingeniería de Metal-Mecánica,
en el marco del XXXV Aniversario del
Instituto Tecnológico de Apizaco

Apizaco, Tlax., Noviembre 11 de 2010
35 Años de Excelencia en Educación Tecnológica




M.C. Jesús Mario Flores Verduzco
Director del Instituto Tecnológico de Apizaco



Secretaría de Educación Pública
Instituto Tecnológico de Apizaco
DIRECCIÓN





Centro de Bachillerato Tecnológico industrial y de servicios No. 61
"José Manuel de Herrera"
Otorga la presente:



CONSTANCIA

A: M.C. MARCOS BEDOLLA HERNANDEZ

Como Colaborador en la 21ª Semana Nacional de Ciencia y Tecnología 2014, por haber
realizado la Conferencia « UN VIAJE A ESCALA NANOMETRICA »



Ing. Severiano Herrera Mendoza

Director

Huamantla, Tlax; Octubre de 2014



SECRETARÍA DE
EDUCACIÓN PÚBLICA
CENTRO DE BACHILLERATO
TECNOLÓGICO
Industrial y de Servicios No. 61
HUAMANTLA, TLAX.
DIRECCIÓN
Clave: 29DC102310



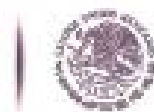
INSTITUTO
TECNOLÓGICO SUPERIOR DE
SAN MARTÍN TEXMELUCÁN

ORGANISMO PÚBLICO
DESCENTRALIZADO
DEL GOBIERNO DEL ESTADO

DIRECCIÓN GENERAL



Instituto Tecnológico Superior
de San Martín Texmelucán



Otorga el Presente:

RECONOCIMIENTO

A: M.C. MARCOS BEDOLLA
HERNÁNDEZ



POR HABER IMPARTIDO LA CONFERENCIA
"SIMULACIÓN Y ANÁLISIS DE PROPIEDADES
MECÁNICAS EN NANOPARTÍCULAS MECÁNICAS",
LLEVADA A CABO EL 20 DE MARZO DE 2013, EN ESTA
CASA DE ESTUDIOS.

"Formación Tecnológica de Vanguardia para el Desarrollo Regional"


M.C. FIACRO LUIS TORREBLANCA
COELLO
Director General



INSTITUTO TECNOLÓGICO
SUPERIOR DE SAN MARTÍN
TEXMELUCÁN, PUE.



Certificado No.
ECMX-0213/11-MA